

Université Mohamed Boudiaf - M'sila

FACULTÉ DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE.

Numéro de série :

Numéro d'inscription :



Thèse

Présentée pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT 3^{ème} CYCLE (LMD)

Spécialité: Physique des matériaux

Option: Matière et Rayonnement

THEME

Etude des paramètres d'interaction des rayonnements ionisants avec la matière en vue des applications analytiques

Présenté Par

BENDJEDI Ahlam

Soutenue le : 29/09/ 2018

Devant le jury composé de :

Nom & Prénom	Grade	Etablissement	Qualité
MAIRECHE Abdelmadjid	Pr.	Université Mohamed Boudiaf - M'sila	Président
DEGHFEL Bahri	Pr.	Université Mohamed Boudiaf - M'sila	Rapporteur
BENTABET Abdelouahab	Pr.	Université Mohamed El Bachir El Ibrahimi-BBA	Co-rapporteur
DAOUDI Salim	MCA	Université Mohamed El Bachir El Ibrahimi-BBA	Examineur
RADOUANE SALAH Asma	MCA	Université Mohamed Boudiaf - M'sila	Examineur
BOUSSENDEL Abdelmadjid	MCA	Université Mohamed Boudiaf - M'sila	Examineur

Année Universitaire : 2017/2018

REMERCIEMENTS

Remerciements

Je tiens avant tout à adresser notre reconnaissance à notre Dieu tout puissant de nous avoir permis d'en arriver là, car sans lui rien n'est possible.

J'exprime ensuite toute mon gratitude et mes remerciements les plus sincères :

A Mon professeur Deghfel Bahri pour m'avoir guidé grâce à ses précieux conseils et ses encouragements lors de la réalisation de ce mémoire.

Aux membres de jury qui ont accepté de juger mon Travail,

A Mes enseignants de l'université qui m'ont aidé à l'accumulation de connaissances nécessaires durant le cursus universitaire.

Aux membres du département des sciences de l'université de M'sila.

A mes parents et mes famille qui m'ont enseigné la patience, la politesse et qui ont toujours été là pour moi.

Enfin, à tous les amis et collègues qui m'ont apporté leur savoir et soutien moral tout au long de notre parcours universitaire.

BENDJEDI Ahlam

DEDICACE

Amon Père, à ma mère

Grâce à vous je suis arrivée là, merci !

TABLE DES MATIERES

TABLE DES MATIERESE

INTRODUCTION GENERALES	1
-------------------------------	----------

CHAPITRE I
RAPPELS THEORIQUES

I.1. Introduction	5
I.2. Interaction matière-rayons X	5
I.2.1. <i>Excitation</i>	6
I.2.2. <i>Déexcitation</i>	7
I.3. Couches électroniques	7
I.4. Règles de sélection	9
I.5. Transitions électroniques	10
I.6. Notations spectroscopiques	11
1.6.1. <i>Introduction</i>	11
I.6.2. <i>Loi de Moseley</i>	12
I.7. Fluorescence X	12
1.7.1. <i>Introduction</i>	12
I.7.2. <i>Principe de la fluorescence X</i>	13
I.8. Effet Auger	14
I.9. Rendement de fluorescence	15
I.9.1. <i>Transitions de Coster-Kronig</i>	17
I.9.2. <i>Le rendement de fluorescence en absence et en présence de transitions de Coster-Kronig</i>	17
I.10. Section efficace d'interaction rayonnement matière	20
1.10.1. <i>Introduction</i>	21
I.10.2. <i>Section efficace d'ionisation par des particules chargées</i>	21
I.11. Modèle quantique PWBA	21

I.12. La théorie ECPSSR	27
I.12.1. <i>L'augmentation de l'énergie de liaison de l'électron atomique</i>	28
I.12.2. <i>Déflexion coulombienne du projectile</i>	29
I.12.3. <i>Effets relativistes</i>	30
I.12.4. <i>Perte d'énergie de l'ion incident</i>	31
I.13. La théorie ECPSSR corrigée	32
I.14. La section efficace de production de rayons X	32
I.15. Approches semi-empiriques	35
I.15.1. <i>Modèle de Paul</i>	35
I.15.2. <i>Modèle d'Orlic</i>	35
Références bibliographiques	37

CHAPITRE II

SECTIONS EFFICACES EMPIRIQUES ET RENDEMENTS

DE FLUORESCENCE DE LA COUCHE L

II.1. Introduction	40
II.2. Distribution des données expérimentales	40
II.3. Sections efficaces totales d'ionisation et de production de rayons X	42
II.4. Rendements de fluorescence de la couche L	51
Références Bibliographiques	55

CHAPITRE III

SECTIONS EFFICACES SEMI-EMPIRIQUES DE PRODUCTION

ET D'IONISATION DE LA COUCHE L

III.1. Introduction	57
III.2. Distribution des données expérimentales	59

III.3. Sections efficaces semi-empiriques	63
III.3.1 Procédé Collectif	63
III.2.2 Procédé Z-Dépendance	67
III.2.3 Procédé Individuel	70
III.4. Discussion des résultats	83
III.4.1 Erreur quadratique moyenne	83
III.4.2 Comparaison	89
Références Bibliographiques	96
CONCLUSION GENERALE	98
LEGENDES DES FIGURES ET DES TABLEAUX	101
COMMUNICATIONS INTERNATIONALES	105

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

La physique atomique a été développée à partir du XX^{ème} siècle pour étudier les mouvements à l'échelle atomique ou subatomique et expliquer de façon précise les mécanismes de l'interaction de la matière avec le rayonnement. L'objectif principal de la physique atomique a été de comprendre et d'interpréter les raies observées dans les spectres. L'émission et l'absorption lors de l'interaction nécessite une étude quantique contrairement à l'étude classique qui est portée plutôt à l'échelle macroscopique.

L'une des quantités physiques les plus importantes dans la technique d'analyse par émission X induite par des particules chargées PIXE (Particle Induced X-ray Emission) est assurément la section efficace d'ionisation et de production de rayons X, qui formée sur l'ionisation des couches internes (*K*, *L* ou *M*) de l'atome cible par le projectile. Comme ce rayonnement X est caractéristique de l'élément ionisé, on peut tirer de l'analyse du spectre X obtenu des informations sur la composition élémentaire de l'échantillon. L'article fondateur de la méthode PIXE a été daté en 1970. Dans celui-ci, Johansson et al. [Jo.70] démontrent que l'émission de rayons X caractéristiques produits lors du bombardement d'un matériau par des protons de quelques MeV peut être à la base d'une analyse élémentaire très sensible.

Les travaux théoriques pour le calcul de la section efficace d'ionisation et de production ont été entamés par le modèle PWBA (Plane Wave in Born Approximation), ce sont les travaux de Merzbacher et Lewis [Me.58], Khandelwal et al. [Kh.69], Choi et al. [Ch.73], Rice et al. [Ri.77]. Dans ce modèle, le projectile est adopté à une onde plane se déplaçant selon une trajectoire rectiligne, les états électroniques sont décrits par des fonctions d'onde hydrogénoïdes et la répulsion coulombienne entre le projectile et le noyau cible est négligée. Le modèle s'applique essentiellement pour des ions légers animés de grande vitesse pour lesquels la durée de l'interaction est courte.

En utilisant le modèle PWBA, la comparaison entre les valeurs théoriques calculées et les valeurs expérimentales présente bien un désaccord surtout à basse énergie.

Brandt et Lapicki [Br.81] et Lapicki et Mc Daniel [La.80] ont adopté quelques effets pour corriger le modèle PWBA. Ce sont les effets de : la déviation du projectile par le champ coulombien dû au noyau cible (C), la perturbation des états stationnaires atomique par le projectile (PSS), les effets relativistes (R) et la perte d'énergie de l'ion incident (E) durant la collision. L'intégration de tous ces effets conduit au modèle ECPSSR. De nombreuses tables ont été présentés (Cohen et al. [Co.85], Chen et al. [Ch.85]) reprenant les sections efficaces pour les couches K en utilisant la théorie ECPSSR. Paul [Pa.84] puis Lapicki [La.89] ont fait une comparaison entre les données expérimentales et les valeurs théoriques du modèle ECPSSR pour les sections efficaces d'ionisations de la couche K par des protons. Il ont montré bien l'accord entre les données expérimentales et la théorie ECPSSR.

Les données expérimentales des sections efficaces d'ionisation de la couche L soient bien moins nombreuses comparativement de celles des raies K . Par conséquent, les formules analytiques qui reproduisent les données expérimentales sont du sujet ouvert. Ceci a motivé notre groupe [Ka.05, Ne.06] à calculer la section efficace d'ionisation et de production des orbites L en basant sur la normalisation des données expérimentales par rapport aux résultats déduites de la théorie ECPSSR.

Dans ce travail nous avons calculé les sections efficaces d'ionisation et de production des rayons X pour les couches L par des protons d'énergie comprise entre 0.02 et 10 MeV et pour des éléments de $47 \leq Z \leq 92$. Cette étude permet d'obtenir des relations analytiques simples pour calculer les sections efficaces semi-empiriques d'ionisation et de production des rayons X, basée sur une compilation des données expérimentales [Be.15] et sur les résultats théoriques du modèle ECPSSR.

De plus, basé sur le fait que le rapport section efficace ionisation-production soit constant pour chaque atome cible, la compilation des données expérimentales [Be.15] nous permet de calculer le rendement de fluorescence moyen pour des éléments de $47 \leq Z \leq 92$. Les résultats obtenus sont en bon accord avec ceux de l'expérience disponibles dans la littérature.

Cette thèse est subdivisée en trois parties :

- Le premier chapitre de ce travail est consacré à présenter le modèle théorique le plus utilisé pour décrire l'ionisation d'un atome par une particule chargée; c'est le modèle PWBA. Ce dernier présente un désaccord surtout à basse énergie du projectile. Ceci nécessite à introduire certains effets négligés dans le modèle PWBA, à savoir

l'effet relativiste, changement de l'énergie de liaison des électrons de l'atome cible, la déflexion coulombienne et de la perte d'énergie des ions dans la cible pour la détermination des sections efficaces d'ionisations, donnant naissance au modèle ECPSSR, qui a été corrigé par la suite en introduisant les bornes d'intégration exactes dans le calcul du facteur de forme (eCPSSR).

- Dans le deuxième chapitre on a calculé les sections efficaces d'ionisation et de production empiriques pour les couches L par des protons d'énergie comprise entre 0.02 et 10 MeV et pour des éléments de $47 \leq Z \leq 92$. Ceci nous permet de calculer le rendement de fluorescence moyen pour chaque élément [Be.15]. Les résultats obtenus sont comparés à ceux de l'expérience.
- Le troisième chapitre est consacré à la détermination des sections efficaces semi-empiriques de production des raies L (L_α , L_β et L_γ) et d'ionisation (L_1 , L_2 et L_3) en adoptant différents procédés; individuel, collective et dépendance du numéro atomique (Z -dépendance). Les résultats obtenus sont comparés à ceux de l'expérience.

Enfin, une conclusion générale est donnée sur les principaux résultats obtenus dans la présente étude.

Références Bibliographiques

- [Be.15] A.Bendjedi,B.Deghfel,A.Kahoul,I.Derradj,F.Khalfallah,Y.Sahnoune,
A.Benthabet,M.Nekab,Radiation Physics and chemistry 117(2015)128-134.
- [Br.81] W. Brandt ,G. Lapicki, Phys. Rev. A23 (1981) 1717.
- [Ch.73] B.H. Choi, E. Merzbacher and G.S. Khandelwal, Atom. Data and Nucl. Data
Tables 5 (1973) 291.
- [Ch.85] M.H. Chen , B. Crasman, Atom. Data and Nucl. Data Tables 33 (1985) 217.
- [Co.85] D.D. Cohen , M. Harrigan, Atom. Data and Nucl. Data Tables 33 (1985) 255.
- [Jo.70] T.B. Johansson, K.R. Axelsson, S.A.E. Johansson, Nucl. Instr. Meth. 84 (1970)
141.
- [Ka.05] A. Kahoul , M. Nekab, Nucl. Instr. and Meth. B 234 (2005) 412.
- [Kh.73] G.S. Khandelwal, B.H. Choi and E. Merzbacher, Atom. Data and Nucl. Data
Tables 1 (1969) 103.
- [La.80] G. Lapicki , F.D. McDaniel, Phys. Rev. A22 (1980) 1896 (Erratum Phys. Rev.
A23 (1981) 975).
- [Me.58] E. Merzbacher, H.W.Lewis Encyclopedia of physics Vol.34 Springer Veslag
Berlin. (1958) 166.
- [Ne.06] M. Nekab ,A. Kahoul. Nucl. Instr. and Meth. B 245 (2006) 395.
- [Pa.84] H. Paul, Nucl. Instr. and Meth. B 3 (1984) 5.
- [Ri.77] R.K. Rice, G. Basbas and F.D. McDaniel, Atom. Data and Nucl. Data Tables 20
(1977) 503.

CHAPITRE I

CHAPITRE I

RAPPELS THEORIQUES

I.1. Introduction

L'interaction du rayonnement avec la matière est un sujet qui recouvre la plupart des domaines de la physique et de la chimie mais aussi de nombreuses autres disciplines. À ce vaste champ d'étude s'ajoutent la variété et le grand domaine des énergies des rayonnements disponibles et l'importance relative que prennent les divers processus d'interaction en fonction du domaine énergétique.

Une telle étude peut se limiter au passage du rayonnement. On est alors concerné par le devenir du faisceau utilisé (absorption, diffusion, ralentissement) et par ses conséquences directes (ionisation, excitation, création de défauts, apparition d'espèces chimiques plus ou moins réactives). Cette approche purement macroscopique est indispensable, en particulier parce qu'elle a conduit aux méthodes de détection de ces rayonnements [Ch.03]. Une description plus détaillée nécessite la compréhension du mécanisme de l'interaction, en particulier avec les électrons puisqu'ils constituent l'essentiel du milieu d'interaction. Le rayonnement est alors une sonde, souvent très bien adaptée à l'observation de la structure de la matière [Ch.03]. Cet aspect est directement lié à la grande variété de spectroscopies.

I.2. Interaction matière-rayons X

L'interaction des photons avec la matière est un phénomène complexe qui fait intervenir de nombreux processus. La plupart du temps, l'importance de ces processus dépend de l'énergie du photon. Le photon existant sur une gamme très étendue de longueur d'onde, il est bien difficile de traiter de manière complète son interaction avec la matière.

Lorsqu'un faisceau de rayons X entre en interaction avec la matière, il est atténué suite aux processus d'ionisation ou d'excitation du rayonnement électromagnétique avec les atomes de la matière traversée [Ch.03]. L'énergie E_0 du rayonnement incident, quelle

que soit sa nature, peut servir à faire passer des atomes de la matière de leur état fondamental à un état excité, par éjection d'un électron. L'état ainsi excité (où ionisé) a une durée de vie très courte (env. 10^{-16} s pour un atome isolé). L'atome revient à son état fondamental par des transitions électroniques en cascade, où à chaque transition correspond l'émission d'une raie caractéristique.

I.2.1. Excitation

C'est le mode d'ionisation utilisé en analyse par fluorescence X (XRF). La cible est bombardée par des photons provenant d'une source radioactive, d'un tube à rayons X ou encore d'un rayonnement synchrotron [St.73]. Dans un atome, les électrons sont répartis dans des couches. Plus la couche est proche du noyau, plus l'énergie de liaison noyau-électron W_x est forte. Du fait de leur énergie importante, les photons X vont arracher des électrons situés au cœur des atomes, près du noyau avec une énergie cinétique initiale E_c et l'atome se retrouve ionisé. On a alors :

$$E_c \leq E_0 - W_x \quad \text{avec} \quad E_0 \geq W_x \quad (\text{I.6})$$

Où E_0 est l'énergie du rayonnement incident.

L'ionisation de la matière par des photons porte le nom «effet photoélectrique», et a été découvert par Heinrich Hertz en 1887 [Be.87].

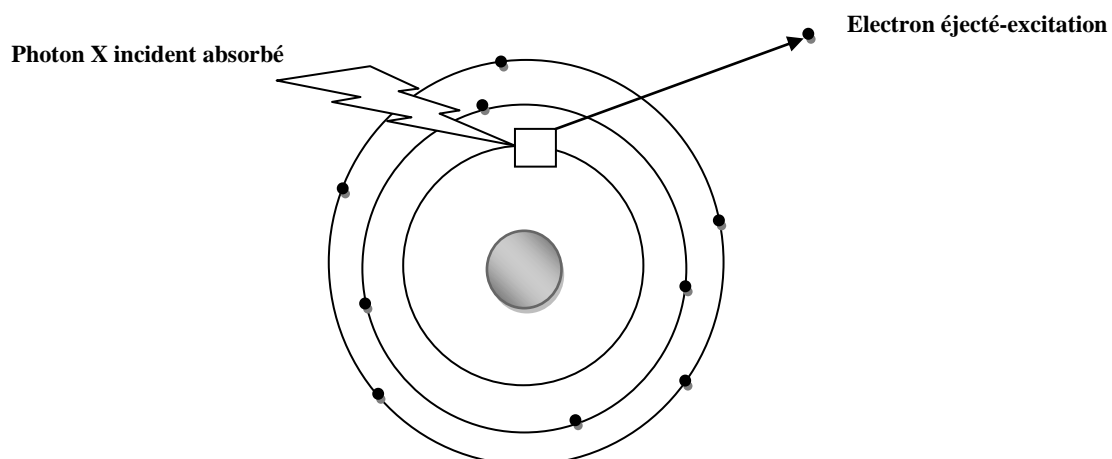


Figure I-1: Ionisation par effet photoélectrique.

I.2.2. Désexcitation

L'état excité est instable et sa durée de vie est très faible, de l'ordre de 10^{-16} s. L'atome tend à revenir à l'état fondamental par des transitions électroniques de type Y-X où un électron sautant d'un niveau Y, plus externe, sur un autre niveau X ; une énergie $\Delta W = W_X - W_Y$ est ainsi libérée. Dans le domaine d'énergie moyenne, étudié ici, l'ionisation a lieu au niveau des couches profondes.

L'énergie libérée ΔW étant émise sous forme de rayonnement caractéristique, [Be.70] suivant deux modes possibles :

- Energie de rayonnement électromagnétique : rayonnement X caractéristique.
- Energie cinétique : électrons Auger.

I.3. Couches électroniques

Pour un atome A_ZX nous utiliserons pour décrire le comportement des électrons considérés, des fonctions semblables à celles obtenues dans le cas de l'atome d'hydrogène (fonctions hydrogénoïdes). A partir de ces fonctions (charge Ze du noyau), on construit par produit tensoriel la fonction d'onde totale de l'atome. Ces fonctions ne sont pas les mêmes puisque les noyaux atomiques diffèrent et qu'il faudra tenir compte de la présence des autres électrons.

Pour distinguer ces fonctions des états de l'atome d'hydrogène, nous les appellerons orbitales atomiques. Chaque orbitale est caractérisée par un ensemble de trois nombres quantiques : le principal n , l'azimutal l et le magnétique m . On lui associe aussi une énergie caractéristique. L'ensemble des orbitales sera utilisé pour décrire les électrons atomiques [Bi.06].

Par définition l'ensemble des électrons d'un atome décrit par le même nombre quantique principal n constitue une couche électronique. La façon dont les électrons d'un atome est répartie dans les différentes couches de l'atome, est appelée configuration électronique. Le nombre maximal d'électrons que la couche n peut contenir est donné par $2n^2$ (Tableau I.1) et le 2 provient du principe de Pauli.

- La couche K , contient deux électrons au maximum, subdivisée à une seule sous-couche K .
- La couche L , contient huit électrons au maximum, subdivisée à trois sous-couches L_1, L_2 et L_3 .
- La couche M , contient dix-huit électrons au maximum, subdivisée à cinq sous-couches M_1, M_2, M_3, M_4 et M_5 .
- La couche N , contient trente-deux électrons au maximum, subdivisée à sept sous-couches $N_1, N_2, N_3, N_4, N_5, N_6$ et N_7 .

Tableau I.1 Configuration électronique et moment angulaire total.

Couche	Sous-couche	Caractéristique de l'électron
K	K	$1s$ ($j=1/2$)
	L_1	$2s$ ($j=1/2$)
L	L_2	$2p$ ($j=1/2$)
	L_3	$2p$ ($j=3/2$)
	M_1	$3s$ ($j=1/2$)
M	M_2	$3p$ ($j=1/2$)
	M_3	$3p$ ($j=3/2$)
	M_4	$3d$ ($j=3/2$)
	M_5	$3d$ ($j=5/2$)
	N	N_1
N_2		$4p$ ($j=1/2$)
N_3		$4p$ ($j=3/2$)
N_4		$4d$ ($j=3/2$)
N_5		$4d$ ($j=5/2$)
N_6		$4f$ ($j=5/2$)
N_7		$4f$ ($j=7/2$)

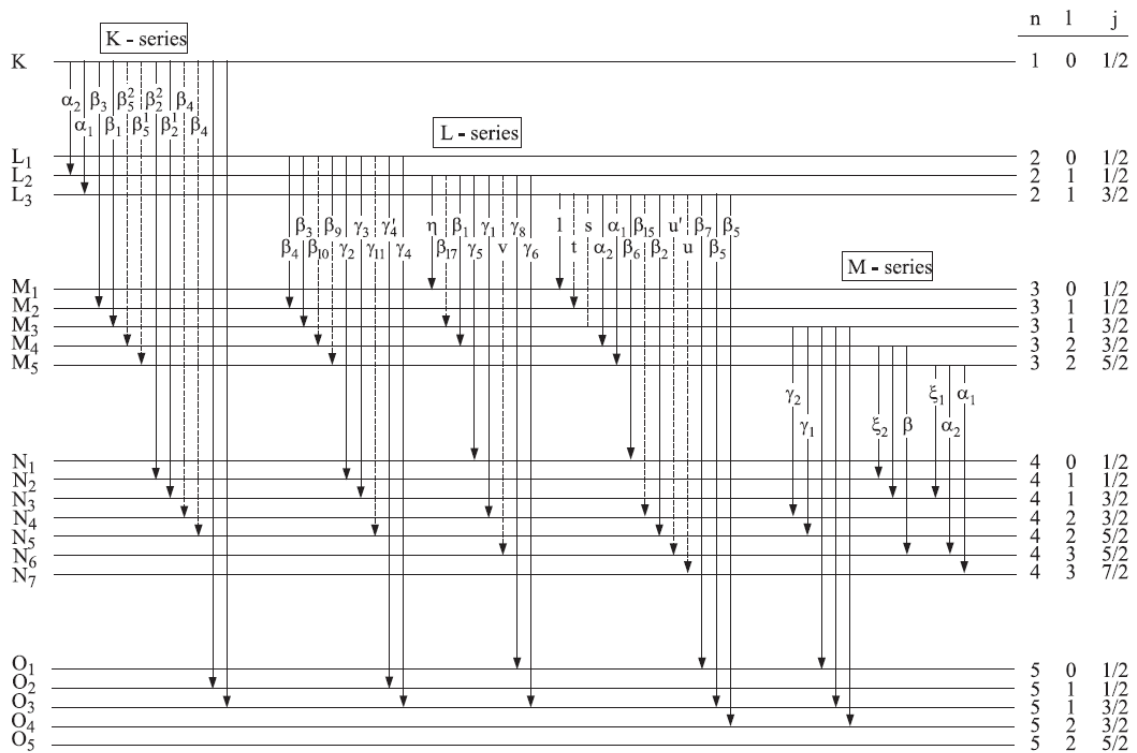


Figure I-2: Transitions permises entre les couches électroniques [Zs.07].

I.4. Règles de sélection

L'ionisation profonde d'un atome, par excitation X, électronique ou même protonique, peut être simple ou multiple. Elle est le plus fréquemment simple dans les deux premiers cas ; les raies de diagramme correspondent à des transitions mono électroniques dans un atome ionisé une fois en couche interne ; elles sont facilement identifiables, sauf cas exceptionnels.

On admet que l'on peut appliquer aux lacunes mono électroniques les calculs de probabilités de transition radiative relatifs aux électrons optiques, ainsi que les règles de sélection bien connues qui les schématisent [Ca.90]. Les transitions mono électroniques radiatives sont donc soumises à ces règles.

Les règles de sélection pour ces transitions sont données par :

$$\Delta n \neq 0$$

$$\Delta l = \pm 1 \quad (\text{I.4.1})$$

$$\Delta j = 0, \pm 1$$

Où l et j sont respectivement les nombres quantiques associés aux moments angulaires orbitaux et totaux de l'électron en transition. La figure (I.2) illustre quelques transitions permises.

I.5. Transitions électroniques

Suite à l'ionisation provoquée dans la couche atomique profonde de l'atome cible, une lacune électronique est créée, et se trouve en un temps très court (de l'ordre de 10^{-15} s) comblée par un électron d'une couche plus externe, L_2 ou autre. La transition de l'électron de sa couche initiale (L_2 sur la figure I.3) vers une couche plus profonde (K) implique un changement de son énergie de liaison qui se traduit par une émission d'un rayonnement X d'énergie $E = E_K - E_{L_2}$; la transition est alors dite radiative. L'énergie E de l'émission X qui accompagne donc toute transition radiative d'un électron entre deux couches de nombres quantiques principaux n_1 et n_2 ($n_1 < n_2$) varie, d'après la loi de Moseley, en fonction du numéro atomique Z de l'atome [Wh.99] :

$$\Delta E = R_y (Z - s)^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (\text{I.4.2})$$

Où R_y est la constante de Rydberg et s est la constante d'écran.

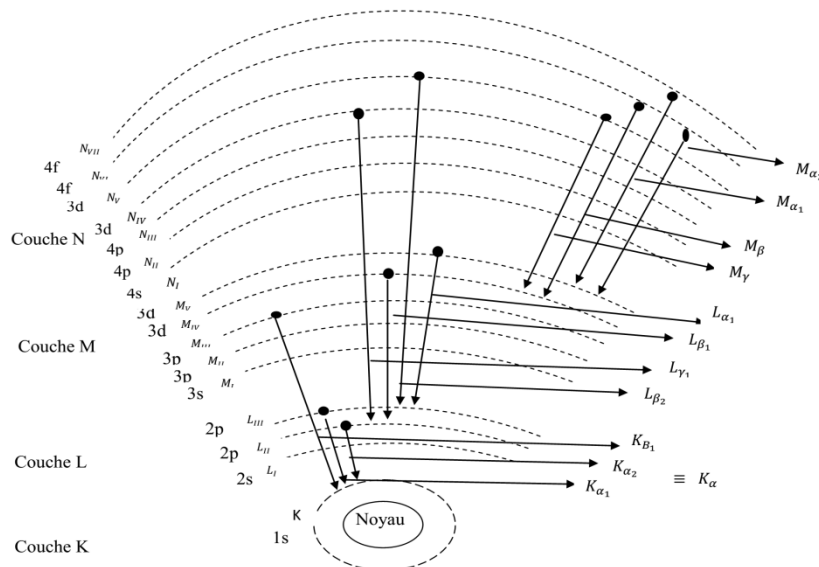


Figure I-3: Niveaux d'énergie et quelques transitions électroniques permises.

Les transitions entre niveaux atomiques correspondent à des énergies discrètes et le réarrangement en cascade se traduit par un spectre en énergie des photons émis constitué par une série de raies discontinue.

Si un électron de la couche K est arraché et remplacé par un électron de la couche L , une raie appelée K_α est émise, et pour l'électron qui arrive sur la couche K provient de la couche M , la raie correspondante est appelée K_β et K_γ et ainsi de suite.

Si la vacance se trouve sur la couche L , les électrons en provenance des couches M, N, O engendreront respectivement des raies $L_\alpha, L_\beta, L_\gamma$. Donc, pour différencier les rayons X provenant de ces sous-couches, les raies sont nommées $K_{\alpha 1}, K_{\alpha 2}, K_{\beta 1}, K_{\beta 2}, L_{\alpha 1}, L_{\alpha 2} \dots$

I.6. Notations spectroscopiques

1.6.1. Introduction

Pour identifier les différentes raies qui correspondent à différentes transitions électroniques vers une même couche, deux notations sont généralement utilisées: la notation de Siegbahn [Be.87] et la notation IUPAC [Th.09].

La notation de Siegbahn est très utilisée en spectrométrie des rayons X. Dans une série donnée, les raies sont notées par des lettres grecques indexées, par ordre d'intensité décroissante pour la série K et avec des exceptions pour les séries L, M...etc.

La notation de Siegbahn consiste à utiliser la lettre correspondante à la raie concernée. Si l'électron qui comble la lacune de la couche K vient de la couche L_3 par exemple, la raie émise est notée K suivie d'un caractère et un numéro en indice $K_{\alpha 1}$.

Dans la notation IUPAC on désigne la raie A par ses deux couches (ou sous couches) mises en jeu. Ainsi, cette même raie, notée $K_{\alpha 1}$ en notation de Siegbahn, s'écrit $K - L_3$ en notation IUPAC.

I.6.2. Loi de Moseley

L'excitation des atomes étant localisée à des niveaux profonds. Les raies d'émissions X sont approximativement indépendantes des liaisons chimiques entre atomes. Moseley [Be.87] a montré que la fréquence d'une raie donnée (par exemple $K_{\alpha 1}$) était proportionnelle au carré du nombre atomique, suivant la relation:

$$\nu = K_1(z - K_2)^2 \quad (\text{I.6.1})$$

où K_1 et K_2 sont des constantes ayant des valeurs définies pour chaque raie.

I.7. Fluorescence X

1.7.1. Introduction

La fluorescence, ou l'émission des rayonnements par un atome, se produit après l'interaction d'une particule avec l'atome, entraînant son excitation. Cela peut avoir lieu lors d'une interaction au cours de laquelle un atome reçoit une quantité d'énergie suffisante pour déplacer un électron de son état fondamental vers un état excité. Dans ce cas, l'atome dans un état excité va ensuite retrouver son état stable en revenant à sa configuration électronique initiale [Ma.09]. Un électron d'une couche supérieure va descendre pour combler la place laissée vide par l'électron éjecté en émettant des radiations électromagnétiques d'une énergie équivalente à la différence d'énergie entre les deux niveaux impliqués dans la transition. Ces rayonnements sont appelés rayons X et leur énergie est $E_X = E_i - E_f$, où E_i et E_f sont respectivement les niveaux d'énergies initiale et finale de la transition (figure I-4). Il y a plusieurs transitions électroniques possibles et pour désigner ces différents types de transition, on utilise la notation engendrée par Siegbahn en 1927 [Ma.09]. Ainsi, on exprime de photon $K_{\alpha 1}, K_{\alpha 2}, K_{\beta 1}, K_{\beta 2}, L_{\alpha 1} \dots$

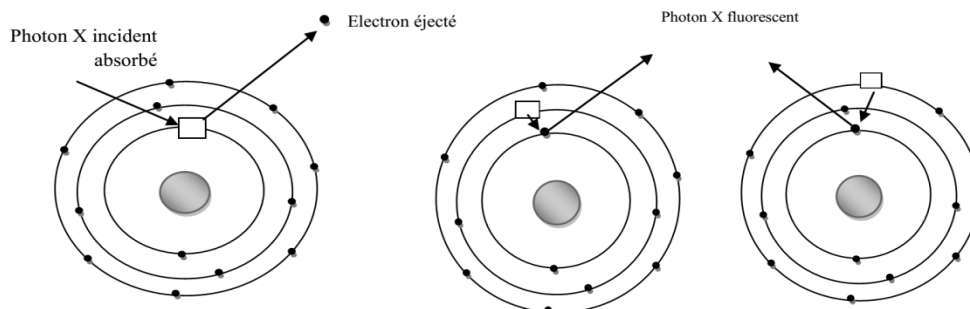


Figure I- 4 : Excitation et désexcitation d'atome.

I.7.2. Principe de la fluorescence X :

Dans un analyseur XRF, l'échantillon est bombardé par des rayons X. Ceci produit l'émission d'électrons, de rayons X et de raies caractéristiques de rayons X. Certains rayons X interfèrent avec les électrons des couches internes Y dans l'échantillon ce qui provoque leur éjection. Les trous créés dans la couche internes Y sont immédiatement remplis par les électrons tombant des couches externes X, où Y est un niveau plus externe que X.

Chaque transition électronique émet un rayon X caractéristique (photon de fluorescence) dont l'énergie est égale à la différence d'énergie entre les deux couches électroniques :

$$\Delta E = E_X - E_Y \quad (\text{I.7.1})$$

Par exemple, la transition de l'électron de sa couche initiale L_2 vers une couche plus profonde K implique un changement de son énergie de liaison qui se traduit par une émission d'un rayonnement X d'énergie égale :

$$\Delta E = E_K - E_{L_2} \quad (\text{I.7.2})$$

La transition est alors dite radiative [Ba.72].

I.8. Effet Auger

L'effet Auger est un processus de désexcitation non radiative d'un atome ionisé dans une couche W. Ce processus se fait en deux temps:

- Remplissage de la lacune en W par un électron d'un niveau moins énergétique X ; ce temps de relaxation est de 10^{-14} à 10^{-17} s.

- Transfert de l'énergie $E_W - E_X$ à un électron d'un niveau Y tel que $E_Y \leq E_W - E_X$, qui sera éjecté dans le continuum. Cet électron, que nous appellerons électron Auger [Bu.76] aura en première approximation une énergie

$$E_A = E_W - E_X - E_Y \quad (\text{I.8.1})$$

L'énergie d'un *état* atomique ionisé dans une couche donnée W est définie par son potentiel d'ionisation B_X ; énergie nécessaire pour extraire cet électron de l'atome. L'énergie des atomes ionisés croît lorsque l'ionisation provient de couches de plus en plus

profondes [Pi.16]. L'électron Auger (représenté dans la figure ci-dessous) émis est désigné par $KL_{II}M_{III}$ et toute émission de la série K est du type général $KXpYq$ où X et Y se rapportent aux différentes couches et p et q se rapportent aux sous couches (Figure 1-5). En pratique, il est courant de ne désigner que les couches atomiques et l'électron émis s'appelle alors KLL , KLM ou plus généralement KXY [Cl.13]. De la même manière, les émissions des séries L et M sont appelées $LiXpYq$ ou $MiXpYq$.

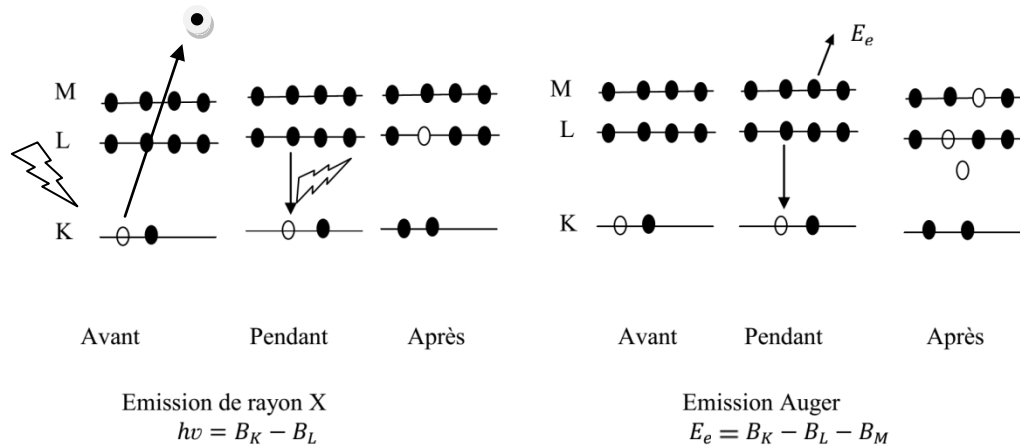


Figure I-5 : Émissions X et Auger [Pi.16] (En noir : états électroniques occupés ; en blanc : états électroniques vides).

Pour les transitions Auger de type LMM et MNN , conséquence d'une ionisation des couches L et M , respectivement, il y a une forte probabilité qu'elles se produisent dans les éléments de numéro atomique élevés. Il existe un cas particulier de transition Auger appelée transition de Coster-Kronig. Elle correspond au remplissage de la lacune initiale par un électron provenant de la même couche atomique (c'est-à-dire de même nombre quantique principal n) mais d'une sous-couche différente. Ce type de transition est désigné par $L_iL_pX_q$ ou $M_iM_pX_q$ et correspond donc à une transition électronique entre deux niveaux L et un niveau X ou entre deux niveaux M et un niveau X , etc. [Cl.13]. De telles transitions ne sont énergétiquement possibles que pour certaines régions de la classification périodique. En effet, une différence d'énergie telle que $E_{LI} - E_{LII}$, par exemple, doit être assez intense pour pouvoir produire une ionisation M_{IVV} .

I.9. Rendement de fluorescence

Les valeurs disponibles précises des rendements de fluorescence sont importantes pour différentes investigations dans les secteurs tels que la physique atomique, physique nucléaire et science des matériaux, aussi bien que pour la physique appliquée [Zs.07]. Cette énergie peut alors soit être dissipée directement par émission X, on parle alors d'émission radiative, soit être transférée à un électron périphérique, qui est éjecté, on parle alors d'émission Auger, qui est un processus non radiatif qui entre en compétition avec l'émission X. La contribution relative des deux phénomènes est généralement caractérisée, pour un élément Z et une couche donnée, par le rendement de fluorescence ω . Ce paramètre représente la probabilité pour qu'une lacune créée sur cette couche donne lieu à l'émission d'un photon X (ou encore le rapport entre le nombre de photons émis sur le nombre de lacunes créées dans cette couche). À titre d'exemple, l'évolution de ω_K , rendement pour la couche K , en fonction du numéro atomique Z est décrite sur la figure I.6 [Mo.03]. Il apparaît nettement que l'émission Auger est prépondérante pour les faibles numéros atomiques alors que l'émission radiative domine pour les atomes lourds.

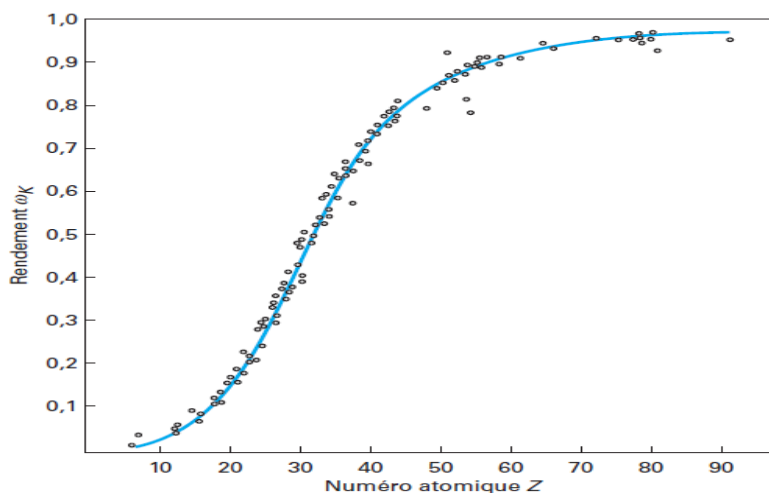


Figure I.6 : Le rendement de fluorescence ω en fonction du numéro atomique Z pour la couche K [Mo.13].

La définition du rendement de fluorescence des couches atomiques plus élevées est plus compliquée, pour les deux raisons suivantes:

1. Les couches au-dessus de la couche K se composent de plus d'une sous couche; le rendement moyen de fluorescence dépend de la façon dont les couches sont ionisées.
2. Les transitions de Coster Kronig qui se produisent; ce sont des transitions non radiatives entre les sous couches d'une couche atomique ayant le même nombre quantique principal [Fi.74, Ba.72].

On définit le rendement de fluorescence ω_K pour la couche X comme étant la probabilité pour qu'une lacune électronique créée dans la couche X soit remplie par un électron en donnant lieu à une transition radiative, il est donné par :

$$\omega_K = \frac{N_X}{N} = \frac{N_X}{N_X + N_A} \quad (\text{I.9.1})$$

où N est le nombre initial de lacunes électroniques, N_X et N_A étant le nombre de transitions radiatives et Auger, respectivement. Cette définition n'est cependant vraie que pour la couche K .

On peut écrire le rendement de fluorescence par d'autre relation qui est relié avec la section efficace sous la forme [Be.15] :

$$\omega_K = \frac{\sigma_K^X}{\sigma_K^I} \quad (\text{I.9.2})$$

Où σ_K^X est la section efficace de production de photons émis et σ_K^I est la section efficace d'ionisation.

En 1955, Burhop [Bu.55] proposa une expression empirique de ce rendement en tenant compte des effets relativistes :

$$\left(\frac{\omega_K}{1 - \omega_K} \right)^{1/4} = A + BZ + CZ^3 = p(Z) \quad (\text{I.9.3})$$

Où Z est le numéro atomique et A, B, C sont constantes.

Une vue d'ensemble des formules possibles d'approximation pour des ajustements semi empiriques du rendement de fluorescence de la couche de K peut être trouvée en Bambynek et al. [Ba.72]:

$$\omega_K = \frac{p^4(Z)}{1 + p^4(Z)} \text{ avec}$$

$$p(Z) = A + BZ + CZ^3 \text{ et } \begin{cases} A = 0.015 \pm 0.01 \\ B = 0.0332 \pm 0.0005 \\ C = -(0.64 \pm 0.07) \cdot 10^{-6} \end{cases} \quad (\text{I.9.4})$$

La formule du rendement de fluorescence pour les orbites supérieures est plus compliquée.

I.9.1. Transitions de Coster-Kronig

Pour les couches L, M, \dots etc, la définition précédente du rendement de fluorescence n'est plus valable [As.91]. Ces couches présentent en effet plusieurs niveaux et une lacune électronique sur les niveaux les plus internes peut être transférée sur un niveau plus externe de la même couche avant qu'une transition radiative. Ces transitions entre deux niveaux d'une même couche sont dites "transitions de Coster-Kronig".

Les transitions Coster-Kronig (inter-niveaux) étant en général plus rapides que les transitions inter-couches (radiatives ou non). Il découle de ce phénomène que les lacunes produites sur les niveaux internes vont se retrouver dans une grande proportion sur le niveau le plus externe d'une couche.

I.9.2. Le rendement de fluorescence en absence et en présence de transitions de Coster-Kronig

Le terme du rendement de fluorescence pour les couches supérieures est plus compliqué, puisque les transitions de Coster-kronig peuvent se présenter. Ces transitions sont non radiatives et se développent entre les sous couches d'une couche ayant le même nombre quantique principal. En effet, les transitions de Coster-Kronig changent la distribution des sous couches ionisées en transférant l'ionisation d'une sous couche à une autre moins énergétique [Ba.72].

Le rendement de fluorescence de la sous couche i de la couche j ($j = K, L, M \dots$) est égal à :

$$\omega_{ji} = \frac{\sigma_{ji}^X}{\sigma_{ji}^I} \quad (\text{I.9.5})$$

Le rendement totale de la couche j est ainsi égal à :

$$\omega_j = \sum_{i=1}^K N_{ji} \omega_{ji} \quad (\text{I.9.6})$$

où les N_{ji} sont les sections efficaces relatives d'ionisation de la sous couche i de la couche j :

$$N_{ji} = \frac{\sigma_{ji}^X}{\sum_i \sigma_{ji}^I} \quad (\text{I.9.7})$$

où $\sum_i N_{ji}$ étant égale à 1. Cependant, en présence de transitions Coster-Kronig, le rendement de fluorescence est donné par:

$$\omega_j = \sum_{i=1}^K V_{ji} \omega_{ji} \quad (\text{I.9.8})$$

où les V_{ji} sont les sections efficaces relatives d'ionisation de la sous couche i de la couche j , en incluant les ionisations provenant des transitions de Coster-Kronig; leur somme pour les sous couche de la couche l est supérieure à 1 et ils sont égaux à :

$$V_{j1} = N_{j1}$$

$$V_{j2} = N_{j2} + f_{12}^j N_{j1} \quad (\text{I.9.9})$$

$$V_{j3} = N_{j3} + f_{23}^j N_{j2} + (f_{13}^j + f_{12}^j f_{23}^j) N_{j1}$$

.....

Où les f_{il}^j sont les probabilités de transitions de Coster-Kronig pour déplacer l'ionisation de la sous -couche i à la sous couche l .

Ainsi pour la couche L comportant les trois niveaux L_1, L_2 et L_3 ; l'ionisation initiale en L_1 par exemple se transfère en L_2 ou L_3 et l'énergie disponible correspondante peut servir à libérer un électron plus faiblement lié. Les transitions entre ces trois niveaux sont appelées transition de Coster-Kronig, et elles sont liées comme suite :

$$V_{L1} = N_{L1}$$

$$V_{L2} = N_{L2} + f_{12}^L N_{L1} \quad (\text{I.9.10})$$

$$V_{L3} = N_{L3} + f_{23}^L N_{L2} + (f_{13}^L + f_{12}^L f_{23}^L) N_{L1}$$

où f_{12}, f_{13} et f_{23} sont respectivement les probabilités des transitions Coster-Kronig entre L_1L_2, L_1L_3 et L_2L_3 , qui sont représentées sur la figure I.7 [St.02].

De plus, la largeur totale Γ_{T_i} d'un niveau d'énergie (l'atome avec une lacune est dans un état excité) est la somme de largeur de rayonnements (radiatifs) Γ_{X_i} , la largeur non-radiative Γ_{a_i} et la largeur de Coster-Kronig Γ_{k_i} . Alors, le rendement de fluorescence est donc donné par :

$$\omega_i = \frac{\Gamma_{X_i}}{\Gamma_{T_i}} \quad (\text{I.9.11})$$

Le rendement d'Auger est:

$$a_i = \frac{\Gamma_{a_i}}{\Gamma_{T_i}} \quad (\text{I.9.12})$$

Et la probabilité de transition Coster-Kronig est donnée par:

$$f_{ik} = \frac{\Gamma_{k_i}}{\Gamma_{T_i}} \quad (\text{I.9.13})$$

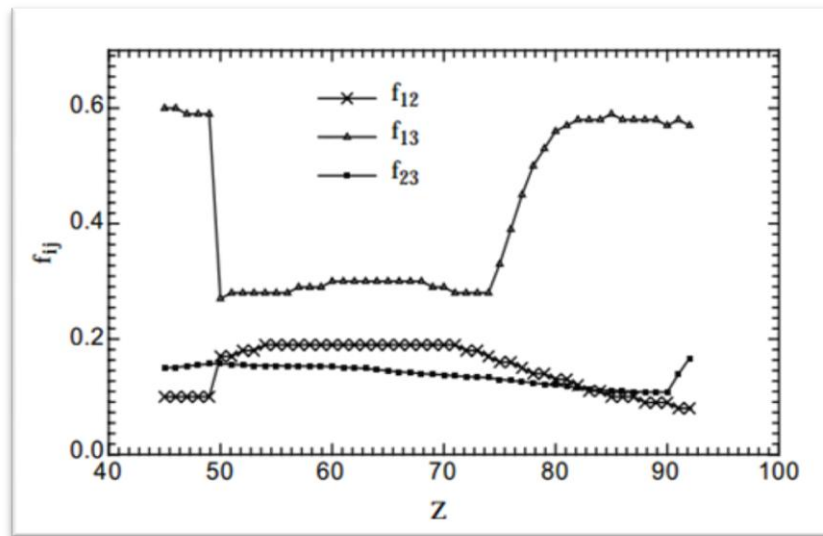


Figure I.7: Transition de Coster-Kronig [St.02].

La probabilité totale ω étant définie comme la relation entre la probabilité de trois paramètres, le rendement de fluorescence, l'effet Auger et les transitions de Coster-Kronig:

$$\omega = \omega_i^k + a_i^k + \sum_{j=i+1}^k f_{ij}^k = 1 \quad (\text{I.9.14})$$

ω_i^k est le rendement de fluorescence, a_i^k est le rendement d'émission Auger et f_{ij}^k est le rendement Coster-Kronig [Ba.72].

1.10. Section efficace d'interaction rayonnement matière

1.10.1. Introduction

Pour l'étude de l'interaction rayonnement-matière, la notion de « section efficace d'interaction » sera très utile. Considérons une particule de matière de rayon d'action r_0 , présentant donc une *section* $s = \pi r_0^2$ dans la direction du rayonnement. En général, chaque rayon passant à l'extérieur de la section s ne produit pas une interaction donnée. Pour un mode d'interaction rayonnement – matière donné on peut définir une section σ équivalente telle que tout rayon passant par cette section subisse cette interaction ; σ est appelé section efficace de l'interaction.

La section efficace est inférieure ou égale à la section réelle s . La section efficace d'un volume de matière est égale à la somme des sections efficaces des particules dans ce volume. Dans le cas particulier de la diffusion, on définit:

La section efficace différentielle de diffusion $\sigma(2\theta)$, ne tenant compte que la diffusion dans les directions faisant l'angle 2θ avec la direction incidente (figure I-8).

La section efficace totale de diffusion σ_{tot} tenant compte de la diffusion dans tout l'espace:

$$\sigma_{tot} = \int_0^\pi \sigma(2\theta) d(2\theta) \quad (\text{I.10.1})$$

Si I_0 est l'intensité du rayonnement incident et $I(2\theta)$ l'intensité du rayonnement diffusé dans une direction 2θ on aura la relation :

$$\frac{I(2\theta)}{I_0} = \frac{\sigma(2\theta)}{s_0} \quad (\text{I.10.2})$$

Ou s_0 est la surface unité. De même, en considérant l'intensité diffusée I_{tot} dans tout l'espace (angle solide 4π):

$$\frac{I_{tot}}{I_0} = \frac{\sigma_{tot}}{s_0} \quad (\text{I.10.3})$$

La section efficace a une dimension d'une surface ; sa mesure est égale au rapport de l'intensité diffusée à l'intensité incidente.

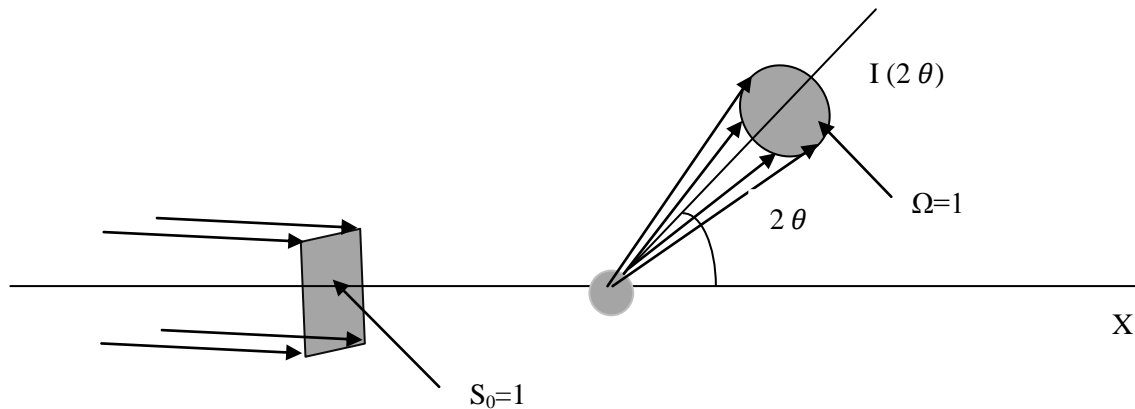


Figure I- 8 : Diffusion à une direction 2θ .

I.10.2. Section efficace d'ionisation par des particules chargées

Des particules chargées légères (proton ou alpha) sont le plus souvent utilisées comme projectiles. Dans la gamme d'énergie considérée, soit de $0,5$ à 5 MeV par nucléon, les modèles théoriques permettant de rendre compte de l'ionisation des couches atomiques profondes, sont basés sur l'interaction coulombienne entre un électron lié à l'atome et le noyau de la particule chargée incidente. On parle alors de collision rapide ou directe et les partenaires de la collision peuvent être considérés comme des charges ponctuelles [Mo.03]. Dans la suite de ce chapitre nous décrivons les modèles les plus couramment employés.

I.11. Modèle quantique PWBA

Ce modèle est une approche développée par Merzbacher et Lewis [Me.58]. Le projectile est assimilé à une onde plane se déplaçant selon une trajectoire rectiligne et les états électroniques sont décrits par des fonctions d'onde hydrogénoïdes.

Un grand nombre d'expériences de physique, notamment en physique des hautes énergies, consiste à diriger un faisceau de particules sur une cible et à étudier les collisions qui en résultent. L'étude d'un système physique consiste essentiellement à résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps. En particulier, cette équation aux valeurs propres intervient directement dans les deux types de problèmes les plus fréquents en physique quantique :

- (i) La détermination des niveaux d'énergie des états liés.
- (ii) Les sections efficaces de collisions.

En mécanique ondulatoire, l'équation de Schrödinger est une équation aux dérivées partielles du second ordre. Pour un système à une dimension, celle-ci se réduit à une équation différentielle où l'étude du problème de valeurs propres dans ce cas est simple. Le problème est en général beaucoup plus difficile lorsque le système possède un plus grand nombre de dimensions. Cependant, les propriétés de symétrie que peut posséder l'Hamiltonien peuvent en faciliter la résolution. C'est ce qui se passe pour une particule dans un potentiel central, c'est-à-dire dans un potentiel qui ne dépend que de la distance r de la particule en collision.

Nous étudierons dans cette étude exclusivement les diffusions élastiques, c'est-à-dire les cas où l'état final est composé des mêmes particules que l'état initial et où l'état interne des particules reste inchangé.

Considérons l'interaction d'une particule incidente de masse M_1 , de charge Z_1 avec une particule de masse M_2 et de charge Z_2 . Soit $V(\vec{r})$ le potentiel coulombien d'interaction entre elles où $\vec{r} = (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ est la distance relative entre les deux particules. On se place dans le système du centre de masse :

$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \quad (\text{I.11.1})$$

Le traitement d'un système quantique de deux particules en interaction coulombienne se ramène donc à celui d'une particule dans le potentiel $V(\vec{r})$.

Au centre de masse, l'Hamiltonien du problème de la collision de deux particules en interaction coulombienne s'écrit [Me.58]:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (\text{I.11.2})$$

D'après la formule (I.3.1), on définit alors la section efficace de diffusion $\sigma(\theta, \varphi)$ comme :

$$dn = F_i \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \quad (\text{I.11.3})$$

Avec dn est le nombre de particules détectées, F_i est le flux de particules incidentes et $d\Omega$ est l'angle solide de détection.

Nous allons maintenant calculer la section efficace de diffusion en résolvant l'équation de Schrödinger. On considère les états stationnaires de cette équation.

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

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (\text{I.11.4})$$

où $\varphi(\vec{r})$ est la solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps (appelée aussi équation aux valeurs propres) [Me.58]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \quad (\text{I.11.5})$$

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

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad (\text{I.11.6})$$

et

$$V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2\mu} U(\vec{r}) \quad (\text{I.11.7})$$

L'équation de Schrödinger devient alors :

$$\left[\Delta + k^2 - U(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = 0 \quad (\text{I.11.8})$$

Cette équation admet une infinité de solutions pour tout k (c'est-à-dire pour tout E). Nous allons donc imposer certaines conditions pour limiter la gamme de solutions possibles.

Nous définissons alors les états stationnaires de diffusion comme étant les états propres de l'Hamiltonien qui vérifient ces conditions et on appelle $v_k^{diff}(\vec{r})$ les fonctions d'onde associées.

Nous allons maintenant déterminer la forme asymptotique des états stationnaires de diffusion. Si on considère des temps très négatifs, la particule peut être considérée comme libre car $V(\vec{r})$ est négligeable. L'état est donc formé d'un paquet d'ondes planes. Si on se place maintenant à des temps très grands, la particule est sortie de la zone d'action de $V(\vec{r})$ et le paquet d'onde décrivant notre système est composé du paquet d'ondes transmises poursuivant leur propagation dans le même sens et du paquet d'ondes diffusées.

La fonction d'onde $v_k^{diff}(\vec{r})$ représentant l'état stationnaire de diffusion associée à une énergie E est donc la superposition d'une onde plane et d'une onde diffusée :

$$v_k^{diff}(\vec{r}) = e^{ikz} + \text{onde diffusée} \quad (\text{I.11.9})$$

L'onde diffusée doit présenter certaines caractéristiques pour des \vec{r} élevés:

(i) Dans une direction (θ, φ) donnée, sa dépendance radiale est en $\frac{e^{ikr}}{r}$. En effet, c'est une onde divergente de même énergie que l'onde incidente [Ka.06]:

$$(\Delta + k^2) \frac{e^{ikr}}{r} = 0 \quad (\text{I.11.10})$$

Pour $\vec{r} \geq \vec{r}_0$ quelconque.

(ii) La diffusion n'est généralement pas isotrope, ce qui entraîne que l'amplitude de diffusion est une fonction de (θ, φ) .

Le comportement asymptotique de la fonction d'onde peut s'écrire :

$$v_k^{diff}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{=} e^{ikz} + f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{I.11.11})$$

où $f_k(\theta, \varphi)$ est l'amplitude de diffusion.

On montre alors facilement que la section efficace différentielle de diffusion soit :

$$\sigma(\theta, \varphi) = |f_k(\theta, \varphi)|^2 \quad (\text{I.11.12})$$

D'autre part, on peut montrer que l'amplitude de diffusion $f_k(\theta, \varphi)$ peut être évaluée par la fonction suivante [Me.58] :

$$f_k(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-k_f r} U(r) v_k^{diff}(r) d^3 r \quad (\text{I.11.13})$$

où k_f est le vecteur d'onde diffusé.

L'approximation de Born consiste à remplacer l'état propre exact dans l'intégrale par une onde plane, dans cette approximation nous avons :

$$\begin{aligned} f_k(\theta, \varphi) &= -\frac{1}{4\pi} \int e^{-k_f r} U(r) e^{ik_i r} d^3 r \\ &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle \end{aligned} \quad (\text{I.11.14})$$

où k_i est le vecteur d'onde incident.

La section efficace différentielle dans l'approximation de Born sera donnée par :

$$d^2\sigma = \frac{k_f}{k_i} \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \langle \psi_f | U | \psi_i \rangle \right|^2 d\Omega \quad (\text{I.11.15})$$

Dans le développement de la théorie PWBA [Me.58, Ba.73a], l'approximation de Born est utilisée dans la théorie de la diffusion pour décrire l'interaction entre la particule chargée incidente (par exemple un proton) et l'atome cible. Pour pouvoir appliquer l'approximation de Born, nous devons proposer quelques hypothèses :

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

Si on utilise l'approximation de Born pour l'ionisation d'un atome par une particule chargée, on obtient la forme suivante pour la section efficace différentielle d'ionisation :

$$d^2\sigma = 8\pi Z_1^2 \left(\frac{e^2}{\hbar V_1} \right)^2 \frac{dq}{q^3} |F_S(q)|^2 d\varepsilon \quad (\text{I.11.16})$$

avec : $\vec{q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f \Rightarrow q^2 = k_f^2 + k_i^2 - 2k_i k_f \cos(\theta)$, V_1 est la vitesse de la particule incidente.

Introduisons maintenant les variables sans dimensions [Be.78]:

$$W Z_{2S} R = \varepsilon = T + I_S$$

$$K = a_S k \quad (\text{I.11.17})$$

$$Q = (a_S q)^2$$

où $a_S = \frac{a_0}{Z_{2S}}$ représente le rayon de la couche atomique considérée,

$T = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ est l'énergie cinétique de l'électron éjecté,

$I_S = \frac{Z_{2S}^2 R}{S^2} \theta_S$ est l'énergie d'ionisation de la couche atomique.

La section efficace d'ionisation peut donc être réécrite sous la forme [Ba.73a]:

$$\sigma_S^{PWBA}(\eta_S, \theta_S) = \frac{\sigma_{0S}}{\eta_S} \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} dW \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} |F_{W,S}(Q)|^2 \frac{dQ}{Q^2} \quad (\text{I.11.18})$$

$$\text{où : } \eta_S = \frac{m_e E}{M_1 Z_{2S}^2 R} = \frac{1}{Z_{2S}^2} \left(\frac{\hbar V_1}{e^2} \right)^2$$

avec

$$\sigma_{0S} = 8\pi\alpha_0^2 \frac{Z_1^2}{Z_{2S}^4}$$

Posons :

$$f_S(\eta_S, \theta_S) = \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} dW \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} |F_{W,S}(Q)|^2 \frac{dQ}{Q^2} \quad (\text{I.11.19})$$

$F_{W,S}(Q)$ est le facteur de forme pour la transition entre les états électroniques de l'atome cible initialement dans l'état S et éjecté avec un transfert d'énergie ε .

Les facteurs de forme pour $S=K, L1, L2$ et $L3$ sont obtenues par Benka et Kropf [Be.78], en utilisant des fonctions d'ondes hydrogénoïdes. Les mêmes fonctions ont été déterminées par Stanislas [St.73] sans introduire le changement de variables précédent.

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

$$\begin{aligned} Q_{\min} &= \left(\frac{M}{m}\right)^2 \eta_S \left[1 - \left(1 - \frac{mW}{M\eta_S}\right)^{\frac{1}{2}} \right]^2 \\ Q_{\max} &= \left(\frac{M}{m}\right)^2 \eta_S \left[1 + \left(1 - \frac{mW}{M\eta_S}\right)^{\frac{1}{2}} \right]^2 \\ W_{\min} &= \left(\frac{M}{m}\right) \eta_S \\ W_{\max} &= \left(\frac{\theta_S}{n^2}\right) \end{aligned} \quad (\text{I.11.20})$$

On peut écrire l'équation (I.11.18) sous la forme :

$$\sigma_S^{PWBA}(\eta_S, \theta_S) = \frac{\sigma_{0S}}{\theta_S} F_S\left(\frac{\eta_S}{\theta_S^2}\right) \quad (\text{I.11.21})$$

où :

$$F_S(y) = \frac{\theta_S}{\eta_S} f_S(\eta_S, \theta_S) \quad (\text{I.11.22})$$

et

$$\theta_S = \frac{\hbar I_{2S}}{Z_{2S}^2 R} \quad (\text{I.11.23})$$

$R = 13.606 \text{ eV}$ est l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène et le paramètre θ_S décrit l'aspect non hydrogénoïde de l'énergie de liaison.

Un des effets les plus importants qui a été négligé est la déviation coulombienne de la particule incidente due au noyau de l'atome cible. En effet, cette interaction empêche toute pénétration profonde de la particule dans les orbites internes, ce qui réduit évidemment d'autant plus la section efficace d'ionisation que la particule incidente est plus lente. De plus, on doit tenir compte notamment des corrections venant de la perturbation des orbites électroniques provoquée par le passage de la particule chargée incidente qui entraîne une augmentation de l'énergie de liaison des électrons. Ces corrections combinées à d'autres corrections ont mené à la théorie ECPSSR, qui corrige la section efficace d'ionisation calculée dans le cadre de l'approximation de Born.

I.12. La théorie ECPSSR

Des études comparatives ont amené l'équipe de Brandt et Lapicki [Br.74, 79] et puis celle de Chen et Crasemann [Ch.85] à appliquer des corrections successives à la section efficace d'ionisation, pour tenir compte d'effets qui n'apparaissent pas dans le cadre de l'approximation de Born [Ab.04]. Tout d'abord, l'effet de la déviation coulombienne de la particule incidente due au noyau de l'atome cible empêche tout pénétration profond de la particule dans les orbites internes, ce qui réduit d'autant plus la section efficace d'ionisation que la particule incident est lente.

D'autres corrections doivent être prises en compte comme celles venant de la perturbation des orbites électronique provoquée par le passage de la particule chargée incidente, qui entraîne une augmentation apparente de l'énergie de liaison des électrons.

Il s'agit au total de quatre facteurs de correction :

- ✓ L'effet de perturbation des états stationnaires de l'électron de l'atome cible (PSS- Perturbed Stationary States).
- ✓ L'effet de la déviation coulombienne par le noyau (C).
- ✓ L'effet dû au caractère relativiste des électrons (R).
- ✓ L'effet de la perte d'énergie de la particule incidente lors de l'ionisation (E).

Donc la probabilité d'ionisation d'une couche atomique est décrite par la section efficace d'ionisation σ_I .

I.12.1. L'augmentation de l'énergie de liaison de l'électron atomique

Les états atomiques sont perturbés par le passage des particules chargées incidentes lors du processus d'ionisation. Dans le régime de basse vitesse, c'est-à-dire pour 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.73b]. L'énergie de liaison des électrons atomiques augmente alors, ce qui a pour conséquence une diminution de la section efficace d'ionisation. La section efficace d'ionisation s'écrit :

$$\sigma_S^{PSS} = \sigma_S^{PWBA}(\eta_S, \zeta_S \theta_S) \quad (\text{I.12.1})$$

où ζ_S est un facteur de correction de l'énergie de liaison de la couche S .

Le facteur ζ_S a été déterminé numériquement par plusieurs auteurs, notamment Basbas et al. [Ba.73a] et Cohen et al. [Co.85].

Nous avons choisi d'utiliser le facteur introduit par Cohen et al. défini par :

$$\zeta_S = 1 + \left(\frac{2Z_1}{Z_{2S}\theta_S} \right) (g_S - h_S) \quad (\text{I.12.2})$$

Les fonctions g_S et h_S de la couche L , sont données par [Ka.06]:

$$g_{L1} = \left(\frac{1 + 9\xi_S + 31\xi_S^2 + 49\xi_S^3 + 162\xi_S^4 + 63\xi_S^5 + 18\xi_S^6 + 1.97\xi_S^7}{(1 + \xi_S)^9} \right) \quad (\text{I.12.3})$$

$$g_{L2,L3} = \left(\frac{1 + 10\xi_S + 45\xi_S^2 + 102\xi_S^3 + 331\xi_S^4 + 6.7\xi_S^5 + 58\xi_S^6 + 7.8\xi_S^7 + 0.888\xi_S^8}{(1 + \xi_S)^{10}} \right) \quad (\text{I.12.4})$$

$$h_S = \frac{2S}{\theta_S \xi_S^3} I\left(\frac{C_S S}{\xi_S}\right) \quad (\text{I.12.5})$$

$\xi_S = 2V_1/\theta_S V_{2S}$ est la vitesse réduite du projectile, $v_{2S} = Z_{2S}/S$ et $C_{L1} = 1.50$ et $C_{L2} = C_{L3} = 1.25$.

$I(x_S)$ est donné par

$$I(x) = \begin{cases} 2 \frac{e^{-2x}}{x^{1.6}} & 3 \leq x < 11. \\ e^{-2x} \left(0.031 + 0.21x^{\frac{1}{2}} + 0.005x - 0.069x^{\frac{3}{2}} + 0.324x^2 \right)^{-1} & 0.035 \leq x < 3. \\ \frac{3}{4} \pi \left[\ln\left(\frac{1}{x^2}\right) - 1 \right] & 0 < x < 0.035. \end{cases} \quad (\text{I.12.6})$$

$$\text{et } x = \frac{C_S S}{\xi_S}.$$

I.12.2. Déflexion coulombienne du projectile

L'approximation de Born donne des sections efficaces qui peuvent différer de plusieurs ordres de grandeur par rapport aux valeurs expérimentales pour des particules lentes. Cette différence énorme à basse énergie provient du fait que l'approximation de Born néglige la répulsion coulombienne entre les noyaux de la particule incidente et de l'atome cible. Cette répulsion a pour conséquences le ralentissement de la particule incidente et une modification de sa trajectoire. Les trajectoires linéaires adoptées jusqu'ici pour les particules incidentes seront remplacées par des trajectoires hyperboliques.

Le coefficient $C(dq_{0s})$ qui représente alors la correction coulombienne [Ba.73a] et [Br.74] est défini comme suit:

$$C_S(dq_{0s}) = vE_{v+1} \left(\frac{2\pi l q_{0s}}{z(1+z)} \right) \quad (\text{I.12.7})$$

$E_m(y)$ est l'intégrale exponentielle d'ordre m définie par :

$$E_m(y) = \frac{e^{-y}}{(y+m)} \left[1 + \frac{m}{(y+m)^2} + \frac{m(m-2y)}{(y+m)^3} + \dots \right] \quad (\text{I.12.8})$$

$q_{0S} = \left(\frac{\omega_{2S}}{V_1} \right)$, est le moment minimal transféré à l'électron durant la collision et μ est la masse réduite du système.

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

Si on prend en considération l'effet de déflexion coulombienne, l'expression (I.11.21) peut s'écrire sous la forme :

$$\sigma_S^{CPWBA} = C_S(d q_{0S}) \sigma_S^{PWBA}(\eta_S, \theta_S) \quad (\text{I.12.9})$$

I.12.3. Effets relativistes

Cet effet tient compte du caractère relativiste des électrons des orbites internes particulièrement pour les atomes lourds. Cette correction est introduite dans l'expression de la masse relativiste de l'électron [Ca.77, Br.79 et La81] selon l'expression suivante:

$$m_S^R(\xi_S) = \left[1 + \beta Y_S^2 \right]^{\frac{1}{2}} + Y_S \quad (\text{I.12.10})$$

β est un paramètre qui varie lentement, ($\beta = 1.1$) [Br.79].

où :

$$Y_{L_1} = \frac{0.4 \left(\frac{Z_{2S}}{C} \right)^2}{S \xi_{L_1}} \quad (\text{I.12.11})$$

$$Y_{L_2, L_3} = \frac{0.15 \left(\frac{Z_{2S}}{C} \right)^2}{\xi_{L_2, L_3}} \quad (\text{I.12.12})$$

Si on introduit cette correction relativiste dans l'expression de la section efficace en remplaçant le paramètre de l'énergie réduite η_S par $m_S^R(\xi_S) \eta_S$, on trouve :

$$\sigma_S^{PWBAR} = \sigma_S^{PWBA} \left(m_S^R(\xi_S) \eta_S, \theta_S \right) \quad (\text{I.12.13})$$

I.12.4. Perte d'énergie de l'ion incident

Le long de son parcours dans la cible, la particule incidente d'énergie E subit des collisions avec les atomes de la cible qui se traduisent par une perte d'énergie donnée. En conséquence, l'ionisation a lieu à une énergie inférieure à l'énergie nominale E dont il est nécessaire d'en tenir compte. Cet effet est introduit sous forme de facteur multiplicatif dans l'expression de la section efficace d'ionisation, qui peut s'écrire sous la forme suivante:

$$\sigma_S^{EPWBA} = f_S(z) \sigma_S^{PWBA} \quad (\text{I.12.14})$$

et :

$$f_S = f_S(z) = 2^{-\nu} (\nu - 1)^{-1} \left[(\nu z - 1)(1 + z)^\nu + (\nu z + 1)(1 - z)^\nu \right] \quad (\text{I.12.15})$$

où

$$z = \sqrt{1 - \frac{4\zeta_S}{\mu \xi_S^2 \theta_S}} \quad (\text{I.12.15})$$

Enfin, si nous prenons en considération les effets correctifs apportés au modèle PWBA, nous aboutissons au modèle ECPSSR dans lequel la section efficace d'ionisation s'écrit sous la forme :

$$\sigma_S^{ECPSSR} = \nu E_{\nu+1} \left(\frac{2\pi d q_0 \xi_S}{z(1+z)} \right) \sigma_S^{PWBA} \left(m_K^R(\xi_S) \eta_S, \zeta_K \theta_K \right) \quad (\text{I.12.16})$$

I.13. La théorie ECPSSR corrigée

L'ensemble des corrections citées auparavant a été introduit sur la théorie PWBA par Brandt et Lapicki [Br.81] pour inclure la perte d'énergie (E), la déflexion coulombienne du projectile (C) la perturbation des états stationnaires atomiques par le projectile (PSS) et les effets relativistes (R) de la couche interne de la cible. Ces effets sont inclus dans la section efficace du modèle PWBA (Liu et Cipolla, 1996; Reis et Jésus, 1996) en le multipliant par le facteur Coulomb de déviation C_S , en changeant θ_S à $\zeta_S \theta_S$, où ζ_S tient compte les

changements dans l'énergie de liaison, en multipliant m par le fonction de correction relativiste $m_S^R(\xi_S)$, où ξ_S est la vitesse du projectile qui distingue les régimes de collisions lentes et rapides.

Comme indiqué par Smit et Lapicki [Sm.14] qu'il serait erroné d'évaluer Q_{min} et Q_{max} en remplaçant η_S dans l'équation I.12.6 par η_S^R donnée comme

$$\eta_S^R = m_S^R \eta_S \quad (\text{I.13.1})$$

Pour remédier à ce problème, le facteur m_S^R devrait multiplier par la masse au repos d'électron m partout où elle se trouve. Ceci conduit aux limites d'intégration correctes comme suit:

$$Q_{min}^{max} = \left(\frac{M}{m_S^R m} \right)^2 \eta_S^R \left(1 \mp \sqrt{1 - \frac{m_S^R m W}{\eta_S^R M}} \right)^2 \quad (\text{I.13.2})$$

En outre, il est intéressant de distinguer la section efficace calculée par la théorie ECPSSR de Brandt et Lapicki [Br.81], qui inclut la fonction f_s pour tenir compte de la perte d'énergie, de celle déduite de la théorie eCPSSR. Cette dernière a été utilisée dans la présente étude avec des limites précises des bornes d'intégration dans le calcul des facteurs de forme. Cette formule a été déjà utilisée par Smit et Lapicki [Sm.14].

I.14. La section efficace de production de rayons X

La section efficace de production d'un rayon X donné est égale au produit de la section efficace d'ionisation de la couche considérée σ_I par le rendement de fluorescence ω de la manière suivante [Du.12] :

$$\sigma_X = \sigma_I \omega \quad (\text{I-14.1})$$

Les sections efficaces de production des raies L , et les sections efficaces d'ionisation sont liées par une relation simple faisant intervenir les rendements de fluorescence de sous couches L_1, L_2, L_3 , les probabilités de Coster-Kronig et les taux d'émission de rayons X pour les différentes transitions [Ka.06].

La section efficace de production des raies principales $L_\alpha, L_\beta, L_\gamma$ sera calculée à partir de des expression suivantes :

$$\begin{aligned}\sigma_{L\alpha} &= [(f_{13} + f_{12}f_{23})\sigma_{L1} + f_{23}\sigma_{L2} + \sigma_{L3}]\omega_3 F_{3\alpha} \\ \sigma_{L\beta} &= [\omega_1 F_{1\beta} + f_{12}\omega_2 F_{2\beta}(f_{13} + f_{12}f_{23})\omega_3 F_{3\alpha}]\sigma_{L1} + (\omega_2 F_{2\beta} + f_{23}\omega_3 F_{3\beta})\sigma_{L2} \\ &\quad + \omega_3 F_{3\alpha}\sigma_{L3} \\ \sigma_{L\gamma} &= (\omega_1 F_{1\gamma} + f_{12}\omega_2 F_{2\gamma})\sigma_{L1} + \omega_2 F_{2\gamma}\sigma_{L2}\end{aligned}\tag{I.14.2}$$

Avec : f_{ij} ($i = 1,2$ et $j = 2,3$) sont les probabilités de transition de Coster-Kronig.

F_{iy} ($y = \alpha, \beta, \gamma$) est le taux d'émission de rayons X:

$$F_{iy} = \frac{\Gamma_{iy}}{\Gamma_i}\tag{I.14.3}$$

Où Γ_i est la probabilité d'une transition électronique vers le niveau L_i et Γ_{iy} est la probabilité de l'émission d'un rayon L_y ($y = \alpha, \beta, \gamma$) : pour $F_{3\alpha} = \frac{\Gamma_{3\alpha}}{\Gamma_3}$, Γ_3 est la probabilité d'une transition électronique vers le niveau L_3 conduisant à l'émission d'un rayon X et $\Gamma_{3\alpha}$ est la probabilité de l'émission d'un rayon $X_{L\alpha}$, c'est-à-dire des transitions $L_3 \rightarrow M_5$ et $L_3 \rightarrow M_4$, conduisant à l'émission des raies $L_{\alpha1}$ et $L_{\alpha2}$ respectivement [Ka.06].

On aura aussi:

$$\begin{aligned}\Gamma_{1\beta} &= \Gamma_1(M_2, M_3 \rightarrow L_1) + \Gamma_1(M_4, M_5 \rightarrow L_1) \\ \Gamma_{1\gamma} &= \Gamma_1(N_2, N_3 \rightarrow L_1) + \Gamma_1(O_2, O_3 \rightarrow L_1) \\ \Gamma_{2\beta} &= \Gamma_2(M_4 \rightarrow L_2) + \Gamma_2(M_3 \rightarrow L_2) \\ \Gamma_{2\gamma} &= \Gamma_2(N_1 \rightarrow L_2) + \Gamma_2(N_4 \rightarrow L_2) + \Gamma_2(O_1, O_4 \rightarrow L_2) \\ \Gamma_{3\alpha} &= \Gamma_3(M_4 \rightarrow L_3) + \Gamma_3(M_5 \rightarrow L_3) \\ \Gamma_{3\beta} &= \Gamma_3(N_1 \rightarrow L_3) + \Gamma_3(N_4 \rightarrow L_3) + \Gamma_3(N_5 \rightarrow L_3) + \Gamma_3(O_1 \rightarrow L_3) + \Gamma_3(O_4, O_5 \rightarrow L_3)\end{aligned}\tag{I.14.4}$$

Avec :

$\Gamma_{1\beta}$ et $\Gamma_{1\gamma}$ sont les probabilités de l'émission X pour (M_2, M_3, M_4, M_5) , (N_2, N_3) et (O_2, O_3) vers L_1 .

$\Gamma_{2\beta}$ et $\Gamma_{2\gamma}$ sont les probabilités de l'émission X pour (M_3, M_4) , (N_1, N_4) et (O_1, O_4) vers L_2 .

$\Gamma_{3\alpha}$ et $\Gamma_{3\beta}$ sont les probabilités de l'émission X pour (M_4, M_5) , (N_1, N_4, N_5) et (O_1, O_4, O_5) vers L_3 .

I.15. Approches semi-empiriques

Les approximations (approches) semi-empiriques consistent à construire une courbe que l'on nomme "universelle" en s'inspirant de celle de l'ajustement des valeurs expérimentales par des fonctions ([Pa.84, 86], [Kr.98]), qui ont été choisies de sorte qu'elles puissent ajuster la majorité des données expérimentales tout en restant en accord global avec les prédictions théoriques. Certaines d'entre elles se trouvent limitées à l'ionisation des couches K par protons [Pa.89] et d'autres à celle des sous-couches L_i par les protons [Or.94].

I.15.1. Modèle de Paul

Ce modèle est une analyse statistique de données expérimentales des sections efficaces d'ionisation par protons des couches K (7800 données expérimentales d'éléments dont Z_2 est situé entre 4 et 92), qui ont été collectées à partir de plusieurs sources. Tout d'abord, le modèle consiste à normaliser les données expérimentales de sections efficaces par celles de la théorie la plus élaborée par Brandt et Lapicki -ECPSSR- [Br.81]. Puis, il exige à diviser la plage d'éléments à étudier en un nombre fixe n d'intervalles réguliers et de calculer pour chaque intervalle une moyenne pondérée \bar{S}_i telle que:

$$\bar{S}_i = \frac{\sum_j \left(\frac{S_j}{\varepsilon_j^r} \right)}{\sum_j \left(\frac{1}{\varepsilon_j^r} \right)} \quad (\text{I.15.1})$$

où ε_j^r est l'erreur relative sur la valeur S_j , et l'indice j parcourt toutes les données qui se trouvent dans le même intervalle i . Ensuite, ces moyennes pondérées \bar{S}_i sont regroupées sur rangées [Ab.04] suivant le numéro atomique Z_2 de l'atome cible. Enfin, ce processus analytique se termine par ajuster les données sur chaque rangée, suivant des fonctions pour déduire les fonctions universelles.

I.15.2. Modèle d'Orlic

Une procédure s'appuyant sur le modèle de Paul est difficile à réaliser dans le cas du manque de données expérimentales. Dans le modèle d'Orlic [Or.94], les données expérimentales collectées sont d'abord séparées en groupes suivant le numéro atomique Z_2 de l'atome cible. Ensuite, dans chaque groupe, les données sont

divisées en sous-groupes suivant la couche L étudiée. Mais dans le cas du manque ou la non disponibilité de données expérimentales, l'étude de ce sous-groupe sera ramené dans le groupe. Par la suite, diverses études ont été faites [Mi.88], [Reis 96] et [Or.94] . Cette dernière étude est la plus riche en données expérimentales (plus de 5000 données); cette particularité a conduit à des résultats relativement satisfaisants.

Références bibliographiques

[Ab.04] H. Ben Abdelouahed, Etude de la fluorescence X: Développement dans Geant4 de nouveaux modèles de sections efficaces pour la simulation PIXE. Applications biologiques et archéologiques, Thèse de Doctorat de l'université de Tunis El Manar,(2004).

[As.91] J.Aspiazu, Mise au point d'un programme informatique pour l'analyse quantitative par la méthode PIXE, Thèse de Doctorat de l'université Louis Pasteur de Strasbourg, (1991).

[Ba.72] W.Bambyenk, B.Carsemann, W.Fink, H.U.Freund, H.Mark, C.D. Swift, Rev. Mod, Phys 445(1972)716.

[Ba.73a] G. Basbas, W. Brandt, R. Laubert, Phys. Rev. A7 (1973) 983.

[Be.70] E.Bertin,Principles practice of X-ray spectrometric analysis, New York,(1970).

[Be.78] O. Benka , A.Kropf, Atom. Data Nucl. Data Tables 22 (1978) 219.

[Be.87] D.Benoit, F.Grillon, F.Maurice, N.Roinel, J.Ruste, R.Tixier, Microanalyse par sonde électronique spectrométrie de rayons x, Paris,(1987).

[Be.15] B.Beladel, Etude du taux de sélénium dans la ration alimentaire Algérienne au moyen des techniques nucléaire de micro-analyse, Thèse de Doctorat d' Ouargla, (2015).

[Bi.06] E. Biémont, Spectre atomique, Edition de boeck (2006).

[Bu.55] E.S.H. Burhop, J. Physique et le Radium 16 (1955) 625–629.

[Bu.76] C.Burggraf, B.Carrière, S.Goldsztaub, Revue de physique Appliquée,(1976).

[Br.79] W. Brandt, G. Lapicki, Phys.Rev. A20 (1979) 465.

[Br.74] W. Brandt, G. Lapicki, Phys.Rev. A10 (1974) 474.

[Br.81] W. Brandt, G. Lapicki, Phys. Rev. A **23** (1981) 1717-1729.

[Ca.77] E. Caruso, A. Cesati, Phys.Rev. A15 (1977) 432.

[Ca.90] Y.Cauchois, J.Despujols, Constantes des spectres d'émission x, Paris,(1990).

- [Ch.85] M.H. Chen , B. Crasman, Atom. Data and Nucl. Data Tables 33 (1985) 217.
- [Ch.03] P.Chevalier, Techniques de l'ingénieur, Marie Curie,(2003).
- [Co.85] D.D. Cohen, M. Harrigan, Atom. Data Nucl. Data Tables. 33 (1985) 255.
- [Cl.13] Claude le Gressus,Spectroscopie des électrons Auger,(2013).
- [Du.12] T. Dupuis, Développement d'un dispositif d'analyses par faisceaux d'ions de haute énergie et applications en archéométrie, Thèse de Doctorat, (2012).
- [Ma.09] J.Marie Mussisi, Mesures experimentales et simulation Monte Carlo de la fonction de reponse d'un détecteurSi,Physique Nucléaire Theorique,Strasbourg, (2009).
- [Me.58] E. Merzbacher and H.W.Lewis Encyclopedia of physics Vol.34 Springer Verlag Berlin. (1958) 166.
- [Mi.88] Y. Miyagawa, S. Nakamura, S. Miyagawa, Nucl. Instr. Meth. **B30** (1988) 115.
- [Mo.03] Philippe Moretto, Lucile Beck, Techniques de l'ingénieur, (21/12/2003).
- [Ka.06] A. Kahoul, Sections efficaces de production des raies L des éléments lourds en vue des applications analytiques, thèse de doctorat de l'université Ferhat Abbas -Sétif- (2006).
- [Kr.98] C.M.Romo-Kroger, Nucl. Instr. Meth. **B136** (1998) 196-199.
- [La.81] G. Lapicki and A.R.Zander, Phys.Rev. A23 (1981) 2072.
- [Or.94] I. Orlic, C.H. Sow, S.M. Tang, International Journal of PIXE **4** (1994) 217-230.
- [Pa. 84] H. Paul, Nucl. Instr. Meth **B3** (1984) 5.
- [Pa.86] H. Paul, J. Muhr, Physics Reports, Review Section of Physics Letters **135**,No2 (1986) 47-97.
- [Pa.89] H. Paul, J. Sacher, At. Data Nucl. DataTables **42** (1989) 105-156.
- [Pi.16] J.Pierre Briand, Pierre Auger et la physique atomique, France,2016.
- [Re.96] M.A. Reis, A.P. Jesus, At. Data Nucl. Data Tables **63** (1996) 49.
- [Sm.14] Z.Smith, G.Lapicki, Phys, Rev47 (2014)055203.

[St.73] W. Stanislas, Thèse doctorat de 3^{ème} cycle Grenoble (1973).

[Th.09] S.T.Thornton, A.Rex, Physique moderne, De Boeck Supérieur Edition, Paris, (2009).

[Zs.07] G. Zschornack, handbook of X-Ray Data, Spronger Edition, New York, (2007).

CHAPITRE II

CHAPITRE II

SECTIONS EFFICACES EMPIRIQUES ET RENDEMENTS DE FLUORESCENCE DE LA COUCHE *L*

II.1. Introduction

En 1976, Hardt et Watson [Ha.76] ont présenté la première compilation des sections efficaces expérimentales de la couche *L*. Ils ont présenté une collection de sections efficaces d'ionisation induite par des ions allant du proton jusqu'au Xe. Leur tabulation, comportant approximativement 650 valeurs pour les protons où la majorité d'entre elles sont des sections efficaces totales, a repris toutes les données expérimentales disponibles jusqu'en 1975[Ka.06].

Orlic et al. [Or.94], en 1994, ont repris toutes les sections efficaces expérimentales d'ionisation et de production de rayons X de la couche *L* par des protons durant la période 1983 à 1992. La compilation compte pas moins de 4879 valeurs de sections efficaces de production de rayons X de la couche *L* et plus de 1160 valeurs de sections efficaces d'ionisation des couches *L*.

En 2014, Miranda et Lapicki [Mi.14] ont présenté une nouvelle tabulation de données expérimentales pour les sections efficaces de production et d'ionisation des couches *L* publiées durant la période de 1954 à 2012 pour des éléments de $_{10}\text{Ne}$ à $_{95}\text{Am}$ par des protons.

Dans la première partie de ce chapitre, les données expérimentales disponibles sont utilisées pour déduire des sections efficaces empirique d'ionisation et de production de rayons X. Ces sections sont ensuite exploitées, dans la deuxième partie, pour dériver de nouvelles valeurs de rendement de fluorescence moyen de la couche *L*. Enfin, les résultats obtenus sont comparés à d'autres valeurs théoriques et expérimentales.

II.2. Distribution des données expérimentales

Dans ce travail, la majorité des valeurs expérimentales utilisées sont tirées des compilations de Miranda et Lapicki [Mi.14] (Table regroupant les données reprises dans

la littérature entre 1954 et 2012). En plus, d'autres valeurs sont extraites des courbes présentées dans ces références [Mi.13], [Zh.13], [Ba.14] et [Mo.14]. La base de données recueillies comporte 991 et 5266 points expérimentaux pour les sections efficaces totales d'ionisation et de production de rayons x, respectivement, pour une large gamme d'éléments ($40 \leq Z \leq 92$) par des protons d'énergie de 0.02 à 10.0 MeV.

La figure II.1 montre la distribution des valeurs expérimentales des sections efficaces totales d'ionisation et de production de la couche L utilisées dans ce travail en fonction du numéro atomique Z de la cible.

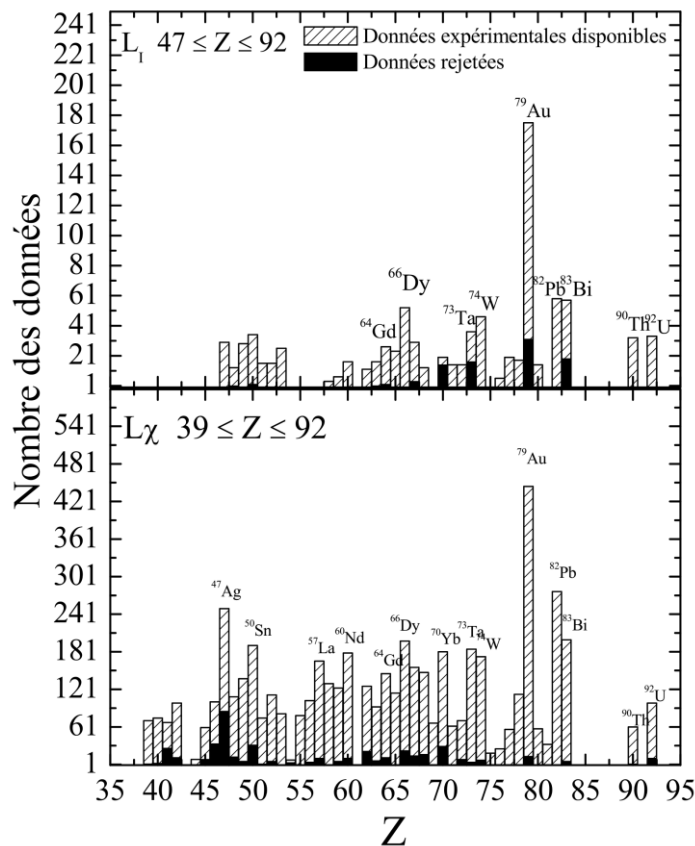


Figure II.1 : Distribution des valeurs expérimentales de la section efficace totale de production et d'ionisation en fonction du numéro atomique Z des éléments entre Zr ($Z=40$) et U ($Z=92$).

Pour produire un ensemble cohérent et fiable des rendements de fluorescence moyen de la couche L et d'améliorer la qualité de l'interpolation dans la partie consacrée au calcul du rendement de fluorescence, nous introduisons un critère de dispersion, fixé sur

l'intervalle [0.5-1.5], des données expérimentales existantes des sections efficaces d'ionisation et de production de rayons X par rapport à leurs correspondantes calculées en utilisant le modèle ECPSSR [Br.8, Li.96 et De.13b] avec des limites d'intégration exactes [Sm.14]. Ce critère a été appliqué par plusieurs auteurs [Pa.82, Pa.86, Ro.93, Or.94 et De.13a] et n'a pas beaucoup d'influence sur le présent calcul de la section efficace ; 121 (448) données expérimentales sont rejetées pour la section efficace d'ionisation (production), ce qui représente environ 12.21% (08.50%) du nombre total des données expérimentales de la section efficace d'ionisation et de production, respectivement.

Pour la section efficace totale d'ionisation, il apparaît que la majorité des éléments entre l'argent (Z=47) et l'uranium (Z=92) sont couverts, à l'exception de Re (Z=75) et Os (Z=76) et des éléments gazeux ou hautement radioactifs lesquels sont difficile à manipuler et ne sont pas facilement disponibles. Pour certains éléments, nous disposons d'un nombre appréciable de valeurs, notamment : $_{50}\text{Sn}$ (33), $_{74}\text{W}$ (47), $_{47}\text{Ag}$ (30) et $_{66}\text{Dy}$ (57) où l'Or ($_{79}\text{Au}$) paraît l'élément le plus intensivement étudié (144valeurs expérimentales).

Pour la section efficace du production il apparaît que la majorité des éléments entre Zirconium (Z=40) et l'uranium (Z=92) sont couverts où l'Or ($_{79}\text{Au}$) possède le plus grand nombre des valeurs expérimentales (431). En plus, les valeurs expérimentales de quelques éléments sont inexistantes pour les raisons citées dans le paragraphe précédent.

Nous disposons donc d'un total de 991 et 5266 valeurs expérimentales de section efficace d'ionisation et de production, respectivement.

II.3. Sections efficaces totales d'ionisation et de production de rayons X

Les sections efficaces totales d'ionisation et de production de rayons X sont rapportées de la compilation de Miranda et Lapicki [Mi.14] et d'autres données sont extraites à partir des courbes dans ces références [Mi.13, Zh.13, Ba.14, Be.14 et Mo.14]. Elles présentent une forme universelle lorsqu'elles sont tracées dans une échelle logarithmique en fonction de la vitesse réduite moyenne ξ_L (figures II.2):

$$\xi_L = (\xi_{L_1} + \xi_{L_2} + 2\xi_{L_3})/4. \quad (\text{II.3.1})$$

où, $\xi_s = 2v_1/\theta_s v_s$ ($s=L_1, L_2$ et L_3).

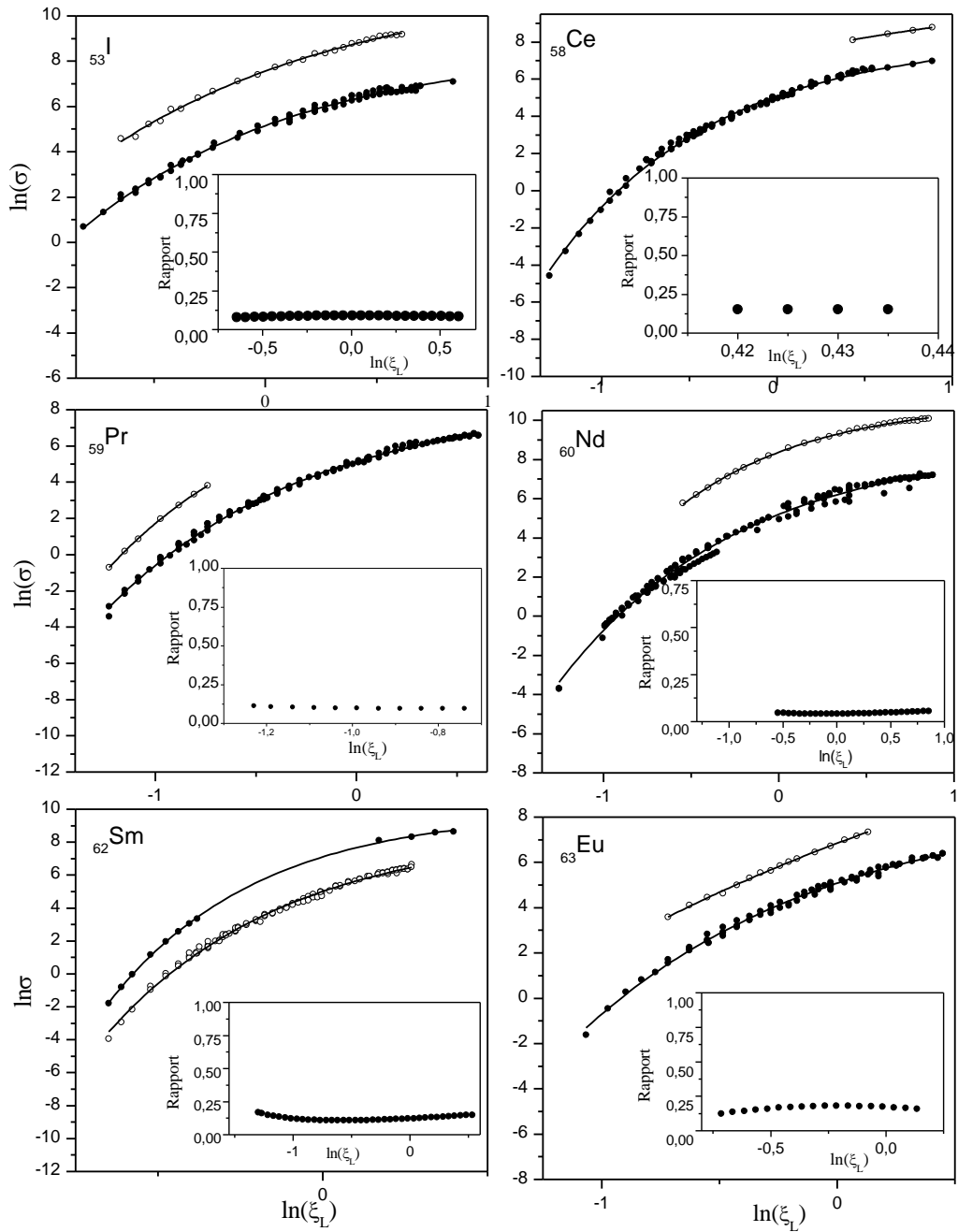
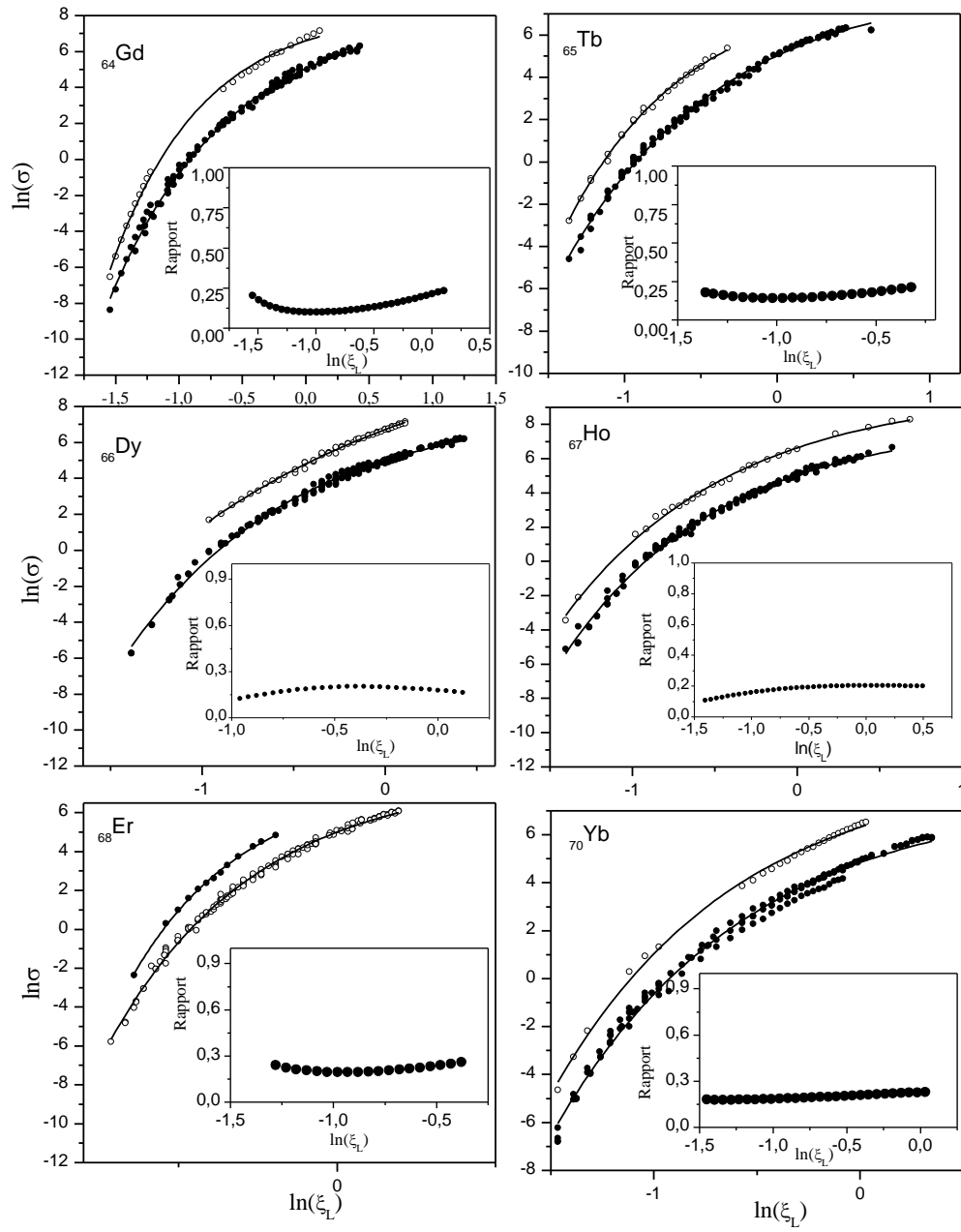
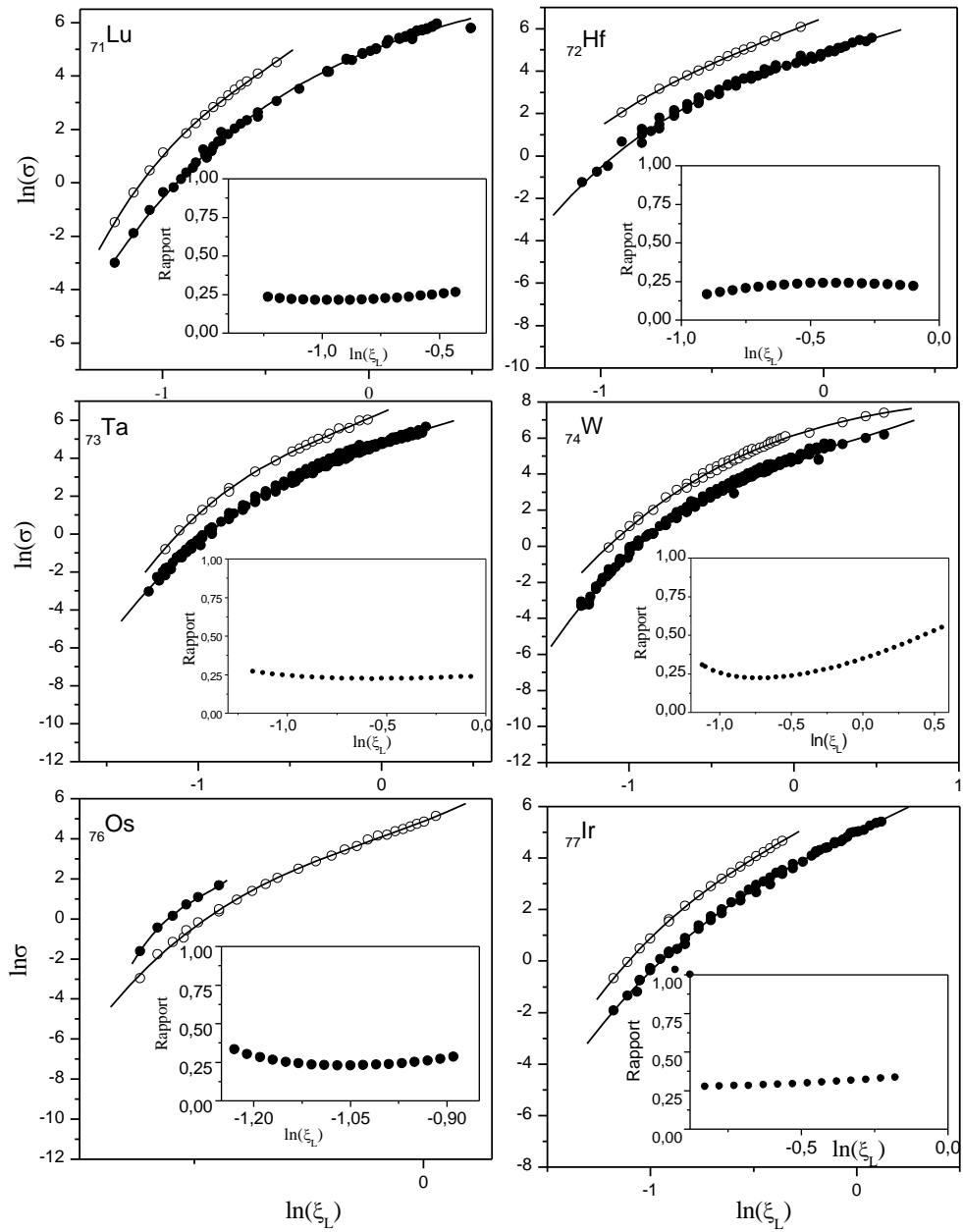


Figure.II.2 : Section efficace expérimentale en fonction de la vitesse réduite des protons ξ_L pour quelques éléments comme échantillon de présentation. Le fit est représenté en trait plein.

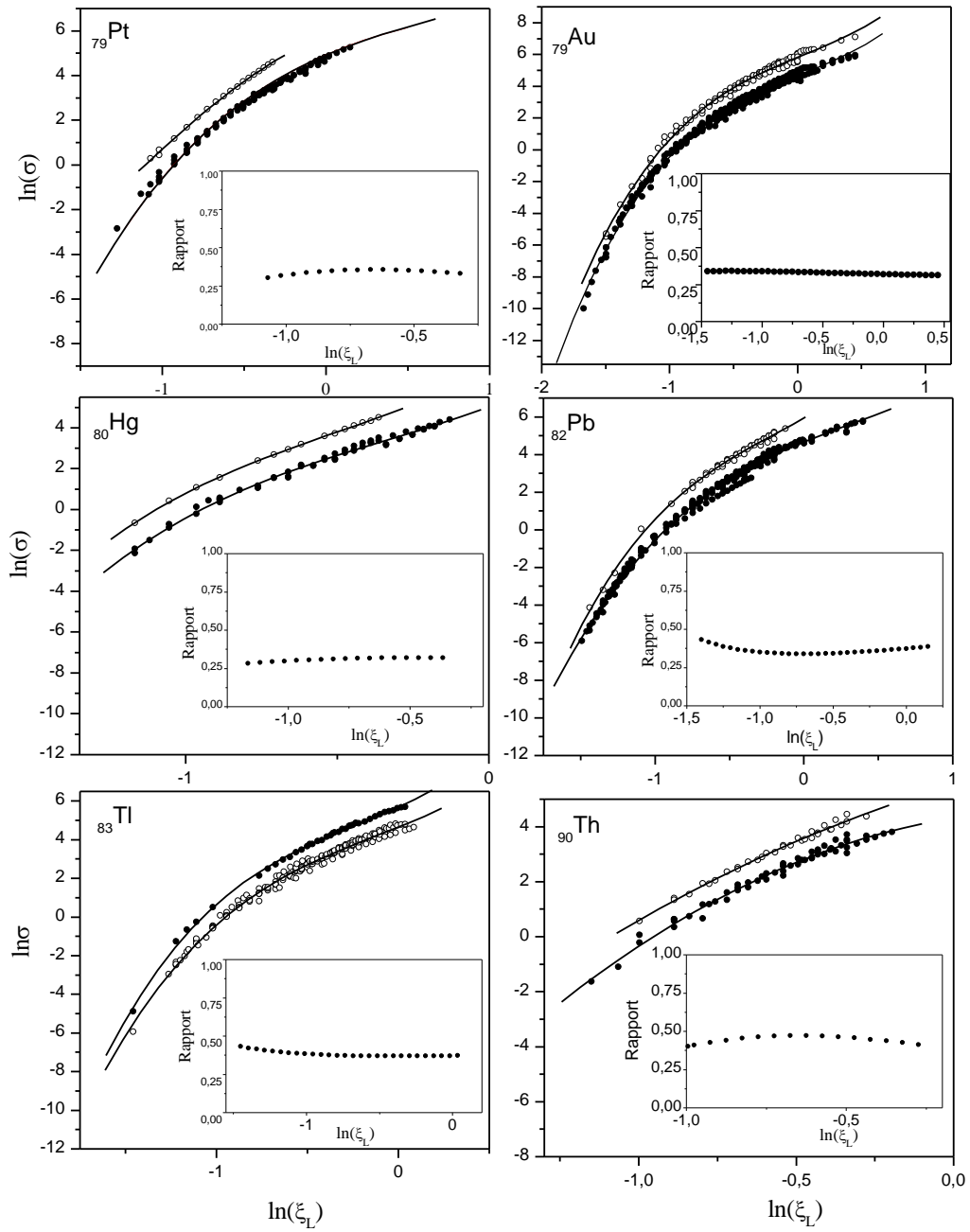
Suite de la Figure.II.2



Suite de la Figure.II.2



Suite de la Figure.II.2



Le caractère universel de ces sections efficaces mesurées de la couche L nous permet de dériver des sections efficaces empiriques. L'ensemble des données expérimentales, suite à son évolution, est interpolé par une fonction exponentielle décroissance du premier ordre:

$$\ln \sigma_{emp} = r_0 + r_1 \exp(-r \ln \xi_L) \quad (\text{II.3.2})$$

où r_0 , r_1 et r sont des constantes.

L'erreur quadratique moyenne (ε_{rms}) est considérée comme un critère de la qualité de la section empirique calculée [De.13a]. Cette erreur est exprimée comme la déviation totale des sections expérimentales (σ_{exp}) à leurs valeurs empiriques correspondantes (σ_{emp}):

$$\varepsilon_{rms} = \left[\sum \frac{1}{N} \left(\frac{\sigma_{exp} - \sigma_{emp}}{\sigma_{emp}} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (\text{II.3.3})$$

où N est le nombre de données expérimentales.

Les valeurs de ε_{rms} avec les coefficients r_0 , r_1 et r de section efficace empirique d'ionisation et de production selon l'équation (II.3.2), sont regroupés dans le tableau II.1 pour des éléments de $40 \leq Z \leq 92$.

Tableau II.1 : Valeurs des ε_{rms} , r_0 , r_1 et r pour les sections efficaces de production et d'ionisation.

Section efficace de production									
Z	r_0	r_1	r	ε_{rms}	Z	r_0	r_1	r	ε_{rms}
40	9.02081	-3.66585	0.99487	3.45	64	8.14491	-3.1032	0.9462	2.88
41	8.12921	-0.94431	0.94775	1.72	65	8.48955	-3.472	1.03673	1.95
42	8.08279	-3.00797	0.91544	4.87	66	8.00676	-3.01228	0.93021	2.34
44	105555.24	-105550.08	23972.7	0.37	67	8.14514	-3.10271	0.95461	2.41
45	8.88927	-3.69029	1.04954	3.61	68	7.93495	-2.93433	0.92957	1.92
46	10.01608	-5.12278	1.41753	6.70	69	7.65246	-2.6421	0.87131	1.60
47	8.87953	-3.68271	1.04256	5.82	70	7.70602	-2.87152	0.9364	2.81
48	9.15261	-3.99187	1.07036	4.74	71	7.99634	-3.07118	0.97312	0.85
49	8.9351	-3.71151	1.03506	3.70	72	7.48343	-2.61877	0.89487	1.00
50	8.70562	-3.43526	0.9945	2.10	73	7.99602	-3.2154	1.04259	1.44
51	9.57593	-4.41725	1.23571	1.92	74	7.85676	-2.98585	0.97918	1.63
52	9.09436	-3.92709	1.08695	2.71	75	7.99218	-3.15228	1.00727	0.23
53	8.68467	-3.53129	0.99067	1.54	76	7.95159	-3.17153	1.02337	0.46
54	4.97191	0.78676	-0.57815	0.05	77	9.68979	-4.71231	1.31337	0.57
55	8.41844	-3.3258	0.97127	2.95	78	8.86982	-4.12143	1.22898	0.83
56	9.2297	-4.20771	1.20205	1.92	79	7.18089	-2.50234	0.8929	3.15
57	10.42211	-5.53335	1.51242	3.78	80	8.10928	-3.44057	1.09707	0.89
58	8.19577	-3.10984	0.93414	2.19	81	9.28312	-4.31197	1.2122	0.69
59	8.60761	-3.46959	1.02591	1.50	82	7.91838	-3.231	1.03653	2.19
60	8.56443	-3.50094	1.02185	2.25	83	7.04683	-2.49919	0.91112	1.79
62	8.75538	-3.75095	1.09515	1.55	90	7.20063	-2.70441	0.97536	0.91
63	8.78888	-3.70315	1.06287	1.23	92	7.6067	-3.0655	1.04792	0.96
Section efficace d'ionisation									
40	10.09	-0.07322	$1.0683 \cdot 10^{-5}$	3.10	67	9.94163	-3.30506	1.02135	2.03
41	10.37844	-3.86845	0.4081	0.60	68	7.6815	-1.65295	0.71336	0.75
47	11.01748	-2.64373	0.78201	1.22	70	8.86412	-2.55233	0.89277	2.15
48	12.15725	-3.97066	1.0634	1.12	71	7.89291	-1.92792	0.78109	0.52
49	10.78228	-2.62572	0.76433	2.23	72	12.14821	-5.71356	1.59867	0.28
50	11.00119	-2.97715	0.85337	1.76	73	8.83628	-2.63703	0.91962	0.85
51	13.92258	-6.33173	1.7217	0.92	74	7.396	-1.46498	0.67331	3.90
52	21.76221	-14.36475	3.61382	1.84	76	3.21586	-0.08937	0.31021	0.28
53	11.60219	-4.04011	1.1342	1.39	77	9.37225	-3.38875	1.08793	0.26
58	11.37961	-4.05205	1.98459	0.10	78	13.42445	-7.38921	1.84268	0.43
59	9.82464	-2.57458	0.87303	0.08	79	8.41193	-2.59343	0.90628	3.91
60	14.1901	-7.12786	1.88901	0.54	80	9.71589	-3.87392	1.19259	0.31
62	9.90274	-2.80067	0.91131	0.78	82	8.38695	-2.71599	0.93682	1.55
63	17.09922	-10.25302	2.60789	0.58	83	7.94707	-2.40889	0.8879	1.48
64	8.26489	-1.6735	0.71749	3.14	90	11.53568	-5.94973	1.63783	0.94
65	8.15031	-1.88242	0.77728	1.56	92	9.75192	-4.45313	1.36444	0.31
66	12.62418	-5.90625	1.54466	1.55					

Malgré la même forme de la fonction d'ajustement (fonction exponentielle décroissance du premier ordre) utilisée pour déduire les sections efficaces empiriques d'ionisation et de production, la dispersion des valeurs n'est pas la même dans les deux cas (en considérant que la précision des sections efficaces déduites dépend de la valeur de l'erreur quadratique moyenne): de 0,08 % à 3,91 % pour la section efficace de production et de 0,05% à 6,70 % pour la section efficace d'ionisation. Ceci dépend plus fortement de la dispersion des données expérimentales qui sont prises de diverses sources et par conséquent mesurées dans différentes conditions expérimentales. On peut dire que la section efficace empirique de production donne la meilleure représentation des données expérimentales. En général, les sections efficaces empiriques déduites sont sensées être plus fiables. Ceci nous permet de les utiliser dans le calcul des nouvelles valeurs de rendement de fluorescence moyen de la couche L , qui seront calculées par la suite.

De plus, il faut noter que les coefficients associés à l'équations (II.3.2) sont valables seulement dans la gamme d'énergie spécifiée dans cette étude. Leur extension en dehors de cette gamme peut conduire à des valeurs erronées.

En outre, nos valeurs empiriques des sections efficaces de production et d'ionisation sont comparées avec les résultats semi empiriques de production de Reis et Jésus [Re.96] et les résultats empiriques d'ionisation déduits des coefficients de fit de Sow et Orlic [So.93] en fonction de l'énergie des protons pour quelques éléments comme échantillon de présentation.

Nos résultats empiriques pour la section efficace d'ionisation sont en accord avec ceux de Sow et al. [So.93] sauf pour $_{40}\text{Zr}$ où une certaine divergence est observée. Pour la section efficace empirique de production de rayons X l'accord est moins satisfaisant à basse énergie du proton entre nos résultats et ceux de Reis et Jésus [Re.96]. Ceci peut être attribué aux coefficients obtenus par Reis et Jésus et Sow et al. où les données expérimentales sont ajustées globalement.

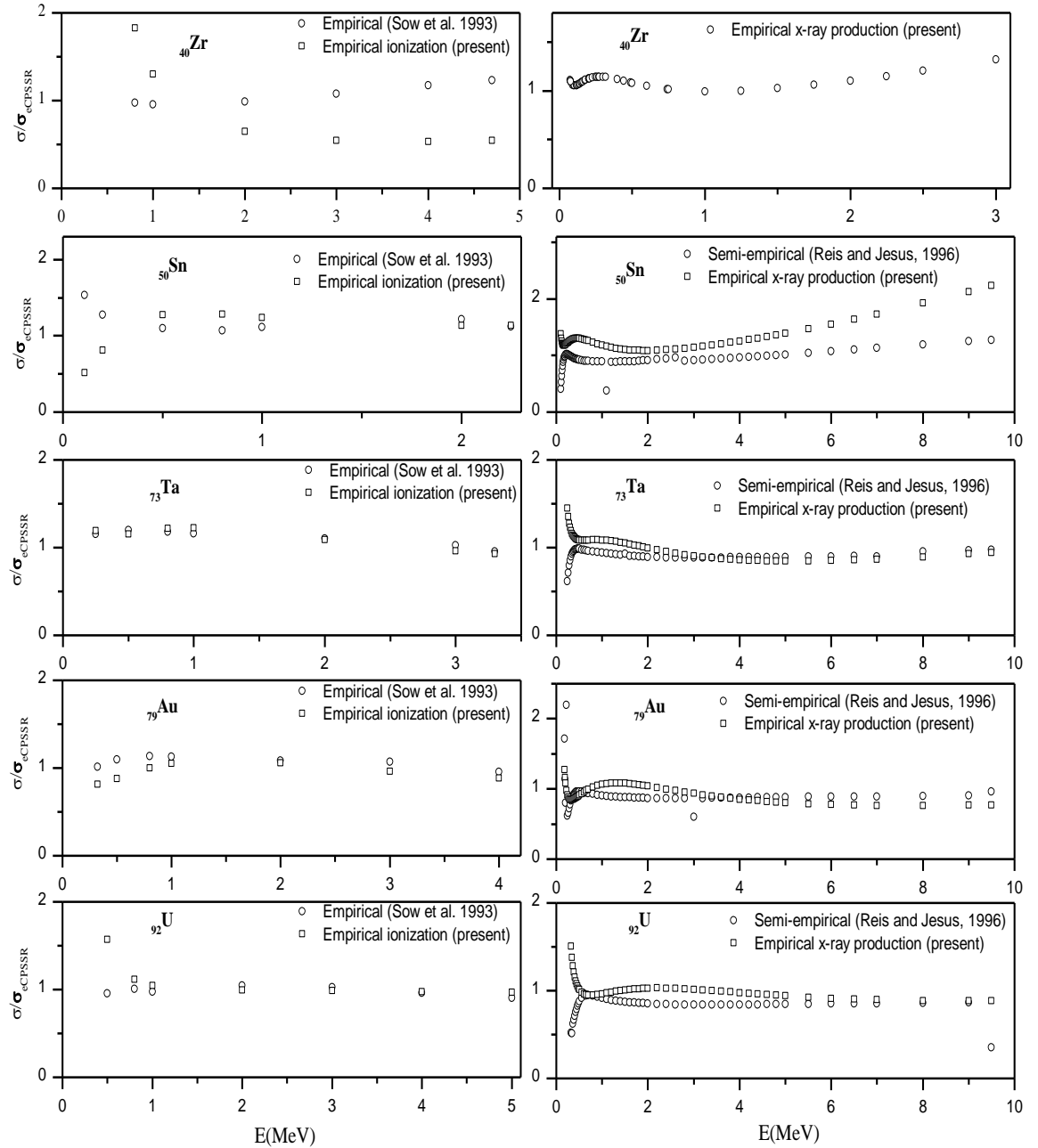


Figure II.3 : Rapport des sections efficaces empiriques et celles calculées dans le cadre du modèle eCPSSR en fonction d'énergie des protons pour ^{40}Zr , ^{50}Sn , ^{75}Ta , ^{79}Au et ^{92}U .

II.4. Rendements de fluorescence de la couche L

La section efficace totale d'ionisation de la couche L est liée à la section efficace totale de production par la relation :

$$\sigma_L^x = \bar{\omega}_L \sigma_L^I \quad (\text{II.4.1})$$

où $\bar{\omega}_L$ est le rendement de fluorescence moyen de la couche L.

Cette formule peut être exploitée pour déduire les valeurs empiriques de rendement de fluorescence moyen pour les éléments avec $40 \leq Z \leq 92$ Comme suit :

- σ_{Emp}^x et σ_{Emp}^I sont tracées en fonction de la vitesse réduite ξ_L (voir les figures II.2), où σ_{Emp}^x est la section efficace totale empirique de production et σ_{Emp}^I est la section efficace totale empirique d'ionisation, tous deux déduits de la section précédente (équation II.3.2) en utilisant les paramètres d'interpolation résumés dans le tableau II.1.

- Le rapport $\sigma_{Emp}^x / \sigma_{Emp}^I$ est représenté dans la même figure. On peut voir que ce rapport présente, environ, une valeur constante pour chaque élément sur toute la gamme de la vitesse réduite ξ_L . Ce rapport est indépendant de la vitesse réduite ξ_L et nous permet de prendre la valeur moyenne de ce rapport pour chaque élément.

- La valeur obtenue est affectée au rendement de fluorescence moyen de la couche L pour chaque élément.

- Les valeurs empirique de rendement de fluorescence moyenne $\bar{\omega}_L$ ainsi trouvées seront interpolées (figure II.4), en fonction du numéro atomique Z, par la formule fréquemment utilisée [Kh.15]:

$$(\bar{\omega}_L / (1 - \bar{\omega}_L))^{1/4} = a + bZ \quad (\text{II.4.2})$$

avec $a = -0.02177$ et $b = 0.01073$ sont déduites de la présente étude.

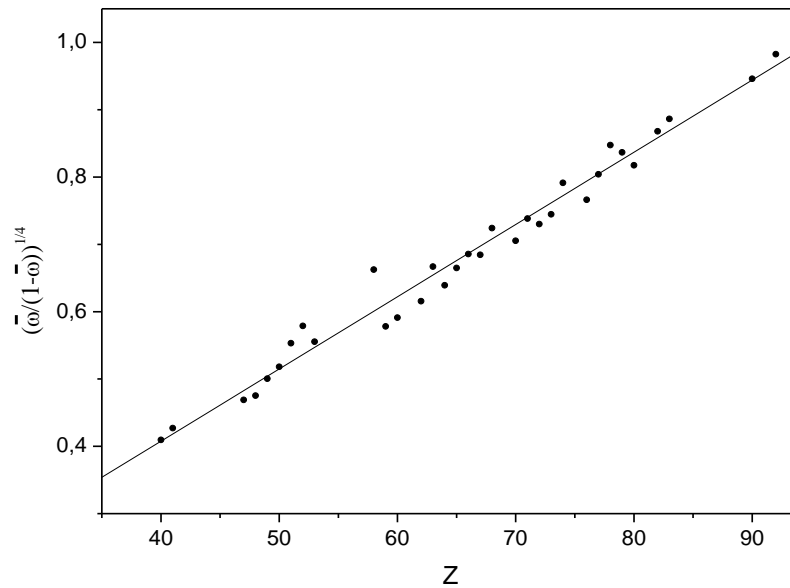


Figure III.4 : La distribution des valeurs de rendement de fluorescence moyen de la couche L en fonction du numéro atomique Z .

-Le rendement de fluorescence empirique de la couche L est ainsi déduit en utilisant la formule analytique (II.4.2) pour tous les éléments dans la gamme $40 \leq Z \leq 92$. Ce procédé nous permet de calculer le rendement de fluorescence empirique de la couche L des éléments pour lesquels nous ne disposons pas de sections efficaces d'ionisation ou de production expérimentales.

Enfin, les valeurs trouvées de rendement de fluorescence moyen empirique de la couche L sont présentées dans le tableau II.2 à côté d'autres données théoriques [Co.87, Mi.81, Hu.94 et Oz.99] et expérimentales ([Si.90, Ga.92, Er.02 et Ap.12]).

Tableau II.2. Valeurs du rendement de fluorescence moyen $\bar{\omega}_L$ pour $40 \leq Z \leq 92$.

Z	Ce travail	[Co.87]	[Mi.81]	[Hu.94]-fit	[Hu.94]	[Oz.99]	[Si.90]	Autre calculs	
40	0.0268	0.0313	0.033	0.0310	0.0319	0.031	-	-	0.026 ^c
41	0.0297	0.0334	0.036	0.0342	0.0335	0.035	-	0.037 ^b	0.032 ^c
42	0.0327	0.0374	0.040	0.0376	0.0363	0.038	-	0.038 ^b	0.035 ^c
43	0.0360	0.0406	0.043	-	-	0.042	-	-	-
44	0.0395	0.0438	0.047	-	-	0.046	-	-	-
45	0.0432	0.0471	0.052	0.0499	0.0459	0.049	-	0.051 ^b	-
46	0.0472	0.0503	0.056	0.0547	0.0495	0.053	-	0.054 ^b	0.049 ^c
47	0.0514	0.0544	0.061	0.0599	0.0534	0.058	-	0.057 ^b	0.051 ^c
48	0.0559	0.0584	0.066	0.0656	0.0575	0.063	-	0.066 ^b	0.056 ^c
49	0.0606	0.0629	0.071	0.0717	0.0618	0.068	-	0.075 ^b	0.065 ^c
50	0.0656	0.0673	0.077	0.0782	0.0665	0.073	-	0.079 ^b	0.069 ^c
51	0.0708	0.0724	0.082	0.0852	0.0714	0.079	-	0.083 ^b	0.075 ^c
52	0.0763	0.0775	0.089	0.0934	0.0765	0.081	-	0.093 ^b	0.078 ^c
53	0.0821	0.0828	0.096	0.096	0.082	0.091	-	-	0.086 ^c
54	0.0882	0.0882	0.102	-	-	0.097	-	-	-
55	0.0945	0.102	0.110	-	-	0.104	-	-	0.090 ^c
56	0.1011	0.101	0.117	0.110	0.100	0.111	0.110	0.112 ^a	-
57	0.1080	0.108	0.125	0.116	0.107	0.119	0.118	0.135 ^a	-
58	0.1151	0.115	0.133	0.123	0.114	0.127	0.121	0.141 ^a	-
59	0.1225	0.123	0.141	0.130	0.121	0.127	0.132	0.145 ^a	-
60	0.1302	0.130	0.150	0.138	0.129	0.140	0.143	0.161 ^a	-
61	0.1382	0.138	0.158	-	-	0.156	-	-	-
62	0.1464	0.145	0.168	0.155	0.145	0.162	0.161	0.174 ^a	-
63	0.1548	0.154	0.177	0.165	0.153	0.171	0.164	-	-
64	0.1635	0.162	0.187	0.174	0.163	0.181	0.184	0.170 ^a	-
65	0.1725	0.172	0.197	0.184	0.172	0.191	0.192	-	-
66	0.1817	0.181	0.207	0.194	0.182	0.201	0.199	-	-
67	0.1911	0.191	0.217	0.205	0.192	0.212	0.217	-	-
68	0.2007	0.201	0.228	0.215	0.202	0.222	0.223	-	-
69	0.2105	0.210	0.239	0.226	0.212	0.232	0.228	-	-
70	0.2205	0.220	0.250	0.236	0.223	0.243	0.239	-	-
71	0.2307	0.231	0.261	0.247	0.234	0.255	0.246	-	-
72	0.2411	0.242	0.272	0.258	0.245	0.266	0.255	-	-
73	0.2517	0.255	0.284	0.269	0.257	0.277	0.274	-	-
74	0.2624	0.267	0.296	0.280	0.269	0.289	0.285	-	-
75	0.2732	0.280	0.308	0.292	0.281	0.296	0.286	0.235 ^d	-
76	0.2841	0.293	0.320	-	-	0.309	-	0.252 ^d	-
77	0.2952	0.305	0.332	0.314	0.305	0.320	0.326	0.255 ^d	-
78	0.3063	0.318	0.344	0.326	0.318	0.331	0.328	0.258 ^d	-
79	0.3175	0.332	0.356	0.337	0.331	0.342	0.330	0.272 ^d	-
80	0.3288	0.345	0.369	0.348	0.343	0.354	-	0.292 ^d	-
81	0.3402	0.359	0.381	0.360	0.356	0.365	0.354	0.314 ^d	-
82	0.3516	0.372	0.393	0.371	0.369	0.377	0.374	0.345 ^d	-
83	0.3630	0.385	0.406	0.383	0.382	0.389	0.374	0.369 ^d	-
84	0.3744	0.398	-	-	-	0.401	-	-	-
85	0.3858	0.411	-	-	-	0.414	-	-	-
86	0.3972	0.423	-	-	-	0.424	-	-	-
87	0.4086	0.436	-	-	-	0.437	-	-	-
88	0.4200	0.448	-	-	-	0.448	-	-	-
89	0.4313	0.461	-	-	-	0.460	-	-	-
90	0.4426	0.475	-	0.468	0.474	0.472	0.473	0.451 ^d	-
91	0.4537	0.487	-	-	-	0.482	-	-	-
92	0.4648	0.499	0.515	0.495	0.499	0.493	0.489	0.481 ^d	-

^a [Er.02], ^b [Ga.02], ^c [Si.99], ^d [Ap.12].

Pour bien comparer nos valeurs empiriques de rendement de fluorescence moyen avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux, les rapports de ces derniers à notre calcul de $\bar{\omega}_L$ sont représentés sur la figure II.5 en fonction du nombre atomique. La comparaison permet de dire que nos résultats sont proches de ceux de Ertugrul [Er.02] et Apaydin et Tirasoglu [Ap.12] alors qu'une légère surestimation est observée pour ceux de Singh, et al. [Si.90], Simsek et al. [Si.99] et Garg et al. [Ga.92] où une dispersion remarquable des données expérimentales est observée pour la région à faible numéro atomique. De plus, nos valeurs de $\bar{\omega}_L$ ne diffèrent que de quelques pourcents de celles de Cohen [Co.87] et de Hubbell et al. [Hu.94] sur toute la gamme du numéro atomique. Généralement, les résultats déduits de cette procédure présentent un bon compromis entre la théorie et l'expérience.

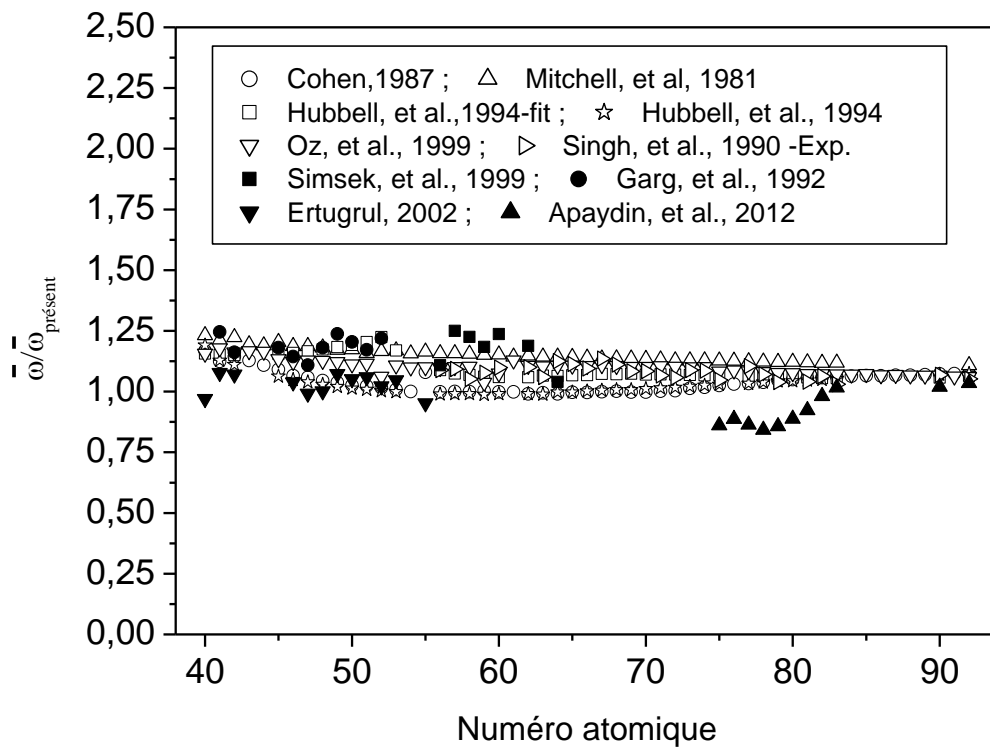


Figure II.5 : Résultats théoriques et expérimentaux de $\bar{\omega}_L$ sont présentés par rapport à nos valeurs en fonction du numéro atomique Z.

Références Bibliographiques

- [Ap.12] G. Apaydin, E. Tirasoglu, Radiat. Phys. Chem. 81(2012) 1593.
- [Ba.14] E.Batyrbekov, I.Gorlachev, I.Ivanov, A.Platov, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 325(2014) 84-88.
- [Br.81] W. Brandt ; G. Lapicki, Phys. Rev. A23 (1981) 1717.
- [Co.87] D.D.Cohen, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 22(1987) 55.
- [De.13a] B.Deghfel, A.Kahoul, S.Heraiz, N.Belouadah, M.Nekkab, Radiation Physics and Chemistry 85(2013a) 89.
- [De.13b] B.Deghfel, A.Kahoul, S.Kerai, M.Saadaoui, S.Dechoucha, M.Nekkab, Radiation Physics and Chemistry 92(2013b) 32.
- [Er.02] M. Ertugrul, Physica Scripta. Vol. 65(2002)323.
- [Ga.92] R.R.Garg, S.Puri, S.Singh, D.Mehta, J.S.Shahi, M.L.Garg, N.Singh, P.C.Mangal, P.N.Trehan, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B72(1992) 147.
- [Ha.76] T.L.Hardt , R.L.Watson, Atom. Data and Nucl. Data Tables 17 (1976) 107.
- [Hu.94] J.H.Hubbel, P.N.Trehan, N.Singh, B.Chand, D.Mehta, M.L.Garg, R.R.Garg, S. Singh, S. Puri. J. Phys. Chem. Ref. Data 23(1994) 339.
- [Ka.06] A. Kahoul, Sections efficaces de production des raies L des éléments lourds en vue des applications analytiques, Thèse de Doctorat, Université de Sétif (2006).
- [Li.96] Z.Liu, S.J.Cipolla, Comp. Phys. Commun. 97(1996) 315.
- [Mi.81] I.V.Mitchell, K.Barfoot, Nucl. Sci. App. 1(1981) 99.
- [Mi.13] J. Miranda, G. Murillo, B.Mendez, J.Lopez-Monroy, J.Aspiazu, P.Villasenor, J.C.Pineda, J.Reyes-Herrera, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 316(2013)113.
- [Mi.14] J. Miranda , G.Lapicki, Atomic Data Nucl. Data Tables 100 (2014) 651.
- [Mo.14] H.Mohan, A.K.Jain, M. Kaur, P.S.Singh, S.Sharma, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 332(2014)103-105.
- [Or.94] I. Orlic, C. H. Sow and S. M. Tang, Atom. Data and Nucl. Data Tables 56 (1994) 159.
- [Oz.99] E. Ôz, H. Erdogan and M.Ertugrul, J. Radio. Nucl. Chem. 242 (1999) 219.
- [Pa.82] H.Paul, Nuclear Instruments and Methods 192(1982)11.
- [Pa.86] H.Paul, J. Muhr, Phys. Rep. 135(1986) 47.

- [Re.96] M.A.Reis, A.P.Jesus, Atomic Data and Nuclear Data Tables 63(1996) 1.
- [Ro.93] L. Rodriguez-Fernandez, J. Miranda, A. Oliver, F. Cruz and J. R. Pegueros, Nucl. Instr. and Meth. B 75 (1993) 49.
- [Si.90] S. Singh, D. Mehta, R.R.Garg, S.Kumar, M.L.Garg, N.Singh, P.C.Mangal, J.H.Hubbell, P.N.Trehan, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 51(1990)5.
- [Sm.14] Z. Smit, G.Lapicki, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 47(2014) 055203.
- [So.93] C. H. Sow, I. Orlic, K. K. Loh and S. M. Tang, , Nucl. Instr. and Meth. B75 (1993) 58.
- [Zh.13] X.Zhou, Y.Zhao, R.Cheng, Y.Wanga, Y.Lei, X.Wang, Y.Sun, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 299(2013)61-67.

CHAPITRE III

Plusieurs théories ont été proposées pour décrire le processus d'ionisation directe. Une des théories les plus utilisées est l'approximation de Born en ondes planes (PWBA) [Me.58], qui est étendue pour décrire l'ionisation directe des couches L et M [Kh.66, Ch.73]. Bien que les améliorations successives aient été incorporées dans la théorie PWBA pour donner naissance au modèle ECPSSR [Br.79, Br.81 et Li.96], des déviations sont encore observées entre les données expérimentales et les prévisions théoriques surtout à basse énergie des protons, où les valeurs théoriques s'écartent de plus en plus des valeurs expérimentales. En 2014, Šmit and Lapicki [Sm.14] ont proposé le modèle eCPSSR, dans lequel les limites exactes pour le moment transféré sont utilisés pour calculer les sections efficaces.

La première contribution qui modélise les sections efficaces d'ionisation des trois sous-couches L est celle de Miyagawa et al. [Mi.88], qui ont utilisé seulement 669 points de données expérimentales pour l'ajustement. Sow et al.[So.93] ont rapporté de nouveaux paramètres pour le calcul des sections efficaces d'ionisation des sous-couches L . De plus, Orlic et al.[Or.94a et Or.94b] du même groupe de recherche ont proposé des formules empiriques pour calculer des sections efficaces empiriques d'ionisation par des protons. Une autre contribution majeure est celle rapportée par Reis et Jésus [Re.96]. Plus récemment, Strivay et Weber[St.02] ont rapporté des formules empiriques basées sur l'ajustement direct des sections efficaces expérimentales de production de rayon X. Cette méthode a permis d'obtenir des sections efficaces de production de rayons X de raie L d'éléments de Ag à U par des protons d'énergie inférieure à 3,5 MeV. Kahoul and Nekab [Ka.05, Ne.06] ont proposé des formules semi-empiriques et empiriques pour calculer les sections efficaces d'ionisation de sous-couches L_1 , L_2 et L_3 pour les éléments avec $71 \leq Z \leq 80$ et les sections efficaces de production pour les éléments avec $50 \leq Z \leq 92$ par des protons d'énergie allant de 0.5 MeV à 3.0 MeV. Gregory Lapicki[La.09] a évalué les sections efficaces de production de rayons X L_α par des protons allant jusqu'à 4 MeV dans des éléments représentatifs de l'argent à l'uranium.

Dans cette contribution, nous rapportons les sections efficaces semi-empiriques d'ionisation et de production de rayons X par des proton sur les éléments de numéro atomique allant de 39 à 92. A cet effet, nous proposons des formules analytiques pour calculer les sections efficaces semi-empiriques d'ionisation et de production de rayons X des éléments avec $39 \leq Z \leq 92$ pour L_α et L_β , $40 \leq Z \leq 92$ pour L_γ et $47 \leq Z \leq 92$ pour L_1 , L_2 et L_3 par des protons d'énergie allant de 0,02 à 10,0 MeV. Ce procédé est noté ' Collectif '.

Dans la deuxième partie, nous proposons une autre formule en introduisant la dépendance sur le numéro atomique de la cible, noté "Z-dépendance". Enfin, les données sont également analysées séparément, noté "Individuel ". Nous concluons notre étude en effectuant une comparaison entre les trois formules semi-empiriques présentées dans ce travail.

III.2. Distribution des données expérimentales

Nous présentons de nouveaux paramètres pour le calcul semi-empirique des sections efficaces de production L_α , L_β et L_γ et d'ionisation L_1 , L_2 et L_3 des cibles avec $39 \leq Z \leq 92$ pour L_α et L_β , $40 \leq Z \leq 92$ pour L_γ et $47 \leq Z \leq 92$ pour L_1 , L_2 et L_3 par des protons d'énergie allant de 0,02 à 10,0 MeV. La base de données utilisée dans ce travail s'appuie principalement sur des compilations récentes de Miranda et Lapicki [Mi.14]. En plus, nous avons ajouté des données, qui sont extraites à partir d'autres travaux [Mi.13, Zh.13 et Mo.14]. Ces données expérimentales ne sont pas rapportées dans la compilation de Miranda et Lapicki [Mi.14]. Cela nous fournit une base de données expérimentales des sections efficaces composée de 12821 valeurs pour la section efficace de production de rayons X (4584 pour L_α , 4223 pour L_β et 4043 pour L_γ) et 2236 d'ionisation (880 pour L_1 , 878 pour L_2 et 878 pour L_3) de la couche L.

Pour obtenir des sections efficaces semi-empiriques homogènes et fiables de production et d'ionisation de la couche L et améliorer la qualité d'interpolation, nous introduisons un critère de dispersion sur les données expérimentales existantes. Ce critère consiste à adopter les données expérimentales pour lesquelles le rapport $S = \sigma_{\text{exp}} / \sigma_{\text{ECPSSR}}$ varie dans l'intervalle [0.5-1.5]. Ce critère est utilisé par plusieurs auteurs pour rejeter les données expérimentales qui s'inscrivent loin des calculs ECPSSR [Ka.05, Ro.93, Pa.82 et Ab.12].

Le tableau III.1 indique le nombre de données expérimentales disponibles et rejetées des sections efficaces d'ionisation et de production de la couche L par des protons d'énergie allant de 0.02MeV à 10.0MeV. Par conséquence, un certain nombre de données est supprimé, à savoir 322, 595 et 504 pour les raies L_α , L_β et L_γ et 242,162 et 91 pour L_1 , L_2 et L_3 , respectivement. Les données rejetées représentent 7.02%, 14.09%, 12.46%, 27.5%, 18.45% et 10.36% de données totales de L_α , L_β , L_γ , L_1 , L_2 et L_3 , respectivement. La distribution de ces données, disponibles et rejetées, en fonction du numéro atomique de la cible est présentée sur la Figure. III.2.

Tableau III.1 Nombre de données expérimentales des sections efficaces disponibles (rejetées) d'ionisation, N^I (N_R^I), et de production de rayons X, N^X (N_R^X), des éléments avec $47 \leq Z \leq 92$ pour L_1 , L_2 et L_3 , $39 \leq Z \leq 92$ pour L_α et L_β , et $40 \leq Z \leq 92$ pour L_γ par des protons d'énergie allant de 0,02 à 10,0 MeV.

Z	Les sections efficaces d'ionisation						Les sections efficaces de production de rayonX					
	L_1		L_2		L_3		L_α		L_β		L_γ	
	N^I	N_R^I	N^I	N_R^I	N^I	N_R^I	N^X	N_R^X	N^X	N_R^X	N^X	N_R^X
Z=39, Y	-	-	-	-	-	-	40	02	40	03	-	-
Z=40, Zr	-	-	-	-	-	-	52	00	52	01	11	00
Z=41, Nb	-	-	-	-	-	-	21	29	50	34	27	00
Z=42, Mo	-	-	-	-	-	-	50	02	50	20	41	00
Z=43, Tc	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Z=44, Ru	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Z=45, Rh	-	-	-	-	-	-	47	08	47	18	40	00
Z=46, Pd	-	-	-	-	-	-	58	19	51	43	18	00
Z=47, Ag	30	11	30	25	30	00	121	06	117	68	59	00
Z=48, Cd	13	13	13	02	13	00	49	04	45	27	45	06
Z=49, In	29	22	29	06	29	00	100	02	100	60	75	25
Z=50, Sn	30	01	30	00	30	00	131	25	128	05	119	09
Z=51, Sb	16	00	16	00	16	00	72	02	66	02	62	04
Z=52, Te	16	00	16	00	16	00	82	06	82	20	74	08
Z=53, I	29	01	29	03	29	03	49	00	49	00	49	00
Z=54, Xe	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Z=55, Cs	-	-	-	-	-	-	48	00	43	00	40	03
Z=56, Ba	-	-	-	-	-	-	79	00	79	00	79	00
Z=57, La	-	-	-	-	-	-	138	02	138	04	138	02

Suite du Tableau III.1

Z	Les sections efficaces d'ionisation						Les sections efficaces de production de rayonX					
	L_1		L_2		L_3		L_α		L_β		L_γ	
	N^I	N^I_{R}	N^I	N^I_{R}	N^I	N^I_{R}	N^X	N^I_{R}	N^X	N^I_{R}	N^X	N^I_{R}
Z=58, Ce	-	--	-	-	-	-	114	00	105	00	105	03
Z=59, Pr	7	00	07	00	07	00	116	20	116	07	116	10
Z=60, Nd	17	00	17	00	17	00	179	21	179	24	162	16
Z=61, Pm	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Z=62, Sm	10	02	08	02	08	00	129	06	100	06	100	10
Z=63, Eu	17	00	17	02	17	01	96	09	79	08	90	08
Z=64, Gd	27	02	27	12	27	01	137	11	125	09	137	15
Z=65, Tb	24	01	24	10	24	00	121	14	121	15	121	106
Z=66, Dy	53	01	53	00	53	00	172	09	169	13	160	10
Z=67, Ho	26	08	26	08	26	04	128	08	128	19	120	17
Z=68, Er	13	00	13	00	13	01	157	24	154	31	145	28
Z=69, Tm	-	-	-	-	-	-	67	00	64	07	64	01
Z=70, Yb	29	02	29	05	29	06	185	12	138	18	202	43
Z=71, Lu	15	00	15	00	15	00	80	16	80	17	71	13
Z=72, Hf	15	12	15	01	15	00	70	07	67	10	67	12
Z=73, Ta	37	23	37	20	37	17	154	01	147	04	154	08
Z=74, W	43	18	43	01	43	00	195	14	154	16	154	16
Z=75, Re	-	-	-	-	-	-	18	00	18	01	18	00
Z=76, Os	6	00	6	00	06	00	25	00	25	00	25	00
Z=77, Ir	20	15	20	01	20	00	56	00	56	00	56	01
Z=78, Pt	18	00	18	01	18	00	93	00	93	05	93	06
Z=79, Au	156	59	156	31	156	32	349	09	322	11	322	13
Z=80, Hg	15	7	15	00	15	00	57	00	56	01	56	04
Z=81, Tl	-	-	-	-	-	-	33	00	33	01	33	03
Z=82, Pb	59	17	59	02	59	01	288	18	229	29	267	34
Z=83, Bi	37	21	37	21	37	19	190	03	179	27	179	38
Z=84, Po	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Z=85, At	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Z=86, Rn	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Z=87, Fr	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Z=88, Ra	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Z=89, Ac	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Z=90, Th	33	00	33	03	33	00	97	02	58	01	58	08
Z=91, Pa	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Z=92, U	40	06	40	06	40	06	112	11	91	10	91	24

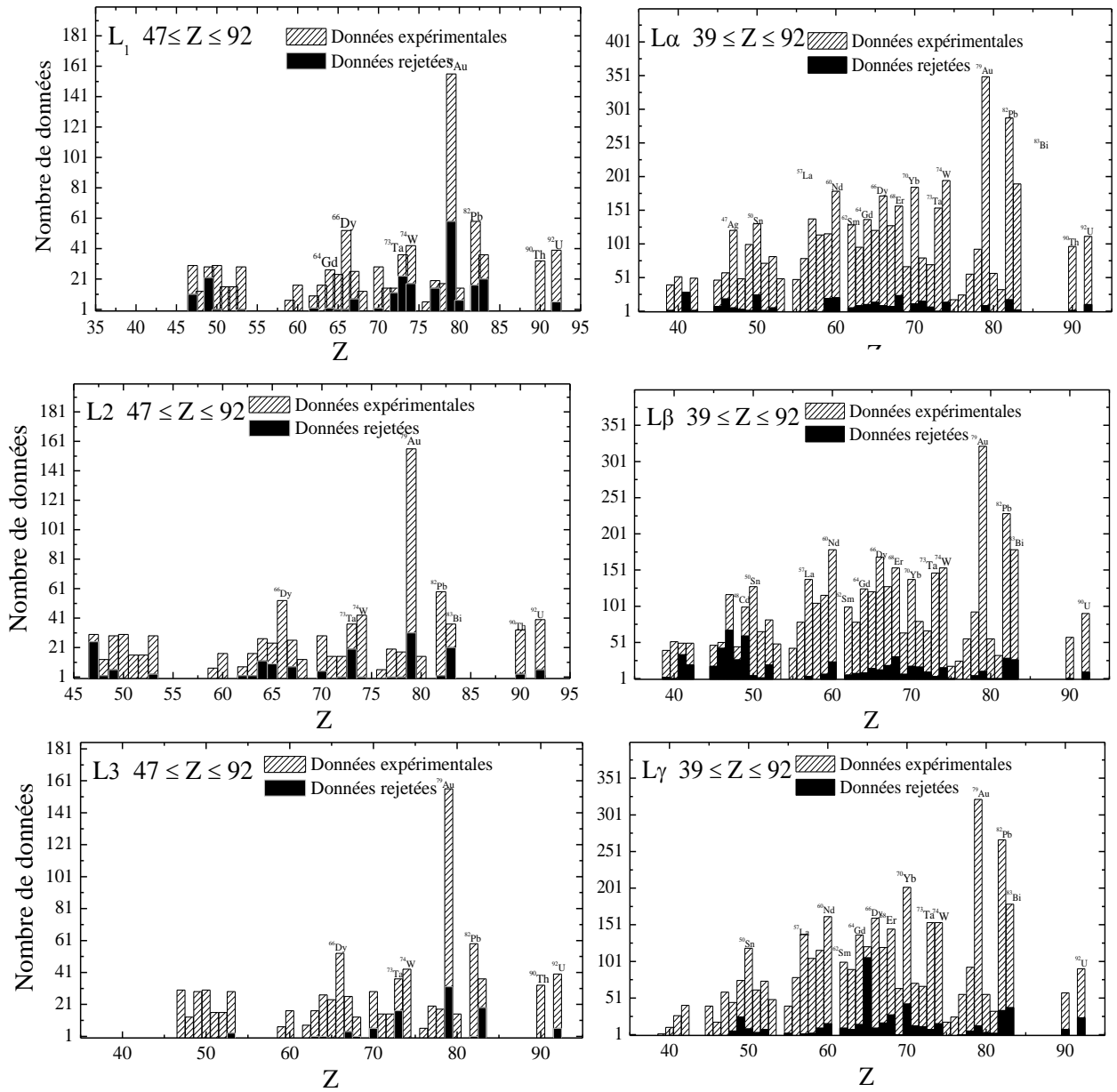


Figure III.2 : Distribution des valeurs expérimentales de la section efficace de production L_α , L_β et L_γ et d'ionisation L_1 , L_2 et L_3 en fonction du numéro atomique Z.

III.3. Sections efficaces semi-empiriques

III.3.1 Procédé Collectif

Pour déduire la section efficace semi-empirique, nous définissons d'abord le facteur de normalisation des sections efficaces expérimentales par la formule :

$$S = \sigma_{\text{exp}} / \sigma_{\text{eCPSSR}} \quad (\text{III.3.1})$$

avec : σ_{eCPSSR} est la section efficace théorique de production des trois raies $L\alpha, L\beta$ et $L\gamma$ ou d'ionisation des trois lignes L_1, L_2 et L_3 , calculée en utilisant les formules (I.14.2) du chapitre I. C'est une manière simple de présenter toutes les données expérimentales par comparaison aux valeurs théoriques. En utilisant un programme numérique, développé par notre groupe de recherche, basé sur le modèle ECPSSR de Brandt et Lapicki [Br.81] et en incluant les bornes exactes d'intégration de Šmit et Lapicki [Sm.14].

Nous avons tracé le facteur de normalisation S en fonction du paramètre x pour les trois raies $L\alpha, L\beta$ et $L\gamma$ et les trois lignes L_1, L_2 et L_3 de tous les éléments à étudier. Le paramètre X est défini comme suit :

$$x = \log_{10}(\xi_L^R) \quad (\text{III.2.2})$$

où : ξ_L^R est la vitesse relativiste réduite de la couche L définie par Rodriguez-Fernandez [Ro.93] comme :

$$\xi_L^R = [m_L^R(\xi_L/\zeta_L)]^{\frac{1}{2}} \xi_L \quad (\text{III.2.3})$$

où $m_L^R(\xi_{Li})$ est le rapport entre la masse relativiste est la masse au repos de l'électron et $\xi_L = 2V_1/V_{2L}\theta_L$ est la vitesse réduite du projectile.

Ce procédé a été adopté en raison du manque des données expérimentales pour chaque groupe d'éléments.

Les figures III.3 et III.4 et montrent l'évolution de S en fonction du paramètre de la vitesse relativiste réduite dans une échelle logarithmique (ξ_L^R) des trois raies $L\alpha, L\beta$ et $L\gamma$ et des trois lignes L_1, L_2 et L_3 pour chaque groupe d'éléments.

Définissant maintenant les sections efficaces semi-empiriques de production de rayons X et d'ionisation par la formule suivante :

$$\sigma_{s-emp} = \sigma_{eCPSSR} \bar{S}_C \tag{III.2.4}$$

Le rapport \bar{S}_C (le facteur de normalisation de production ou d'ionisation) sera ajusté par un polynôme d'ordre trois :

$$\bar{S}_C = \sum_{i=0}^3 r_i \text{Log}_{10} \left(\frac{\xi^R}{L} \right)^i \tag{III.2.5}$$

L'ajustement est représenté en trait plein dans les mêmes figures III.3 et III.4. Les coefficients d'ajustement $(r_j, j = 0, 3)$ de la section efficace semi-empirique sont résumés dans le tableau III.2 .

Tableau III.2 Coefficients d'ajustement pour déduire les sections efficaces semi-empiriques $L_1, L_2, L_3, L_\alpha, L_\beta$ et L_γ des éléments avec $47 \leq Z \leq 92$ pour L_1, L_2 et $L_3, 39 \leq Z \leq 92$ pour L_α et L_β et $40 \leq Z \leq 92$ pour L_γ en utilisant le procédé collectif.

Line	r_0	r_1	r_2	r_3
L_1	1.00726	0.09703	1.69759	2.12686
L_2	1.06797	-0.21331	1.75954	3.71492
L_3	0.99783	-0.06113	0.85959	1.44369
L_α	1.01495	0.07598	1.85009	3.46794
L_β	1.06464	-0.09375	1.63553	3.77564
L_γ	1.10239	-0.09988	1.15819	3.09114

En outre, la déviation totale des sections efficaces expérimentales (σ_{exp}) avec les valeurs semi-empiriques correspondantes (σ_{s-emp}), est exprimée en termes des écarts quadratiques moyens (ε_{rms}) suivant l'expression :

$$\varepsilon_{rms-s-emp} = \left[\sum \frac{1}{N} \left(\frac{\sigma_{exp} - \sigma_{s-emp}}{\sigma_{s-emp}} \right)^2 \right]^{1/2} \tag{III.2.6}$$

où N est le nombre de données expérimentales.

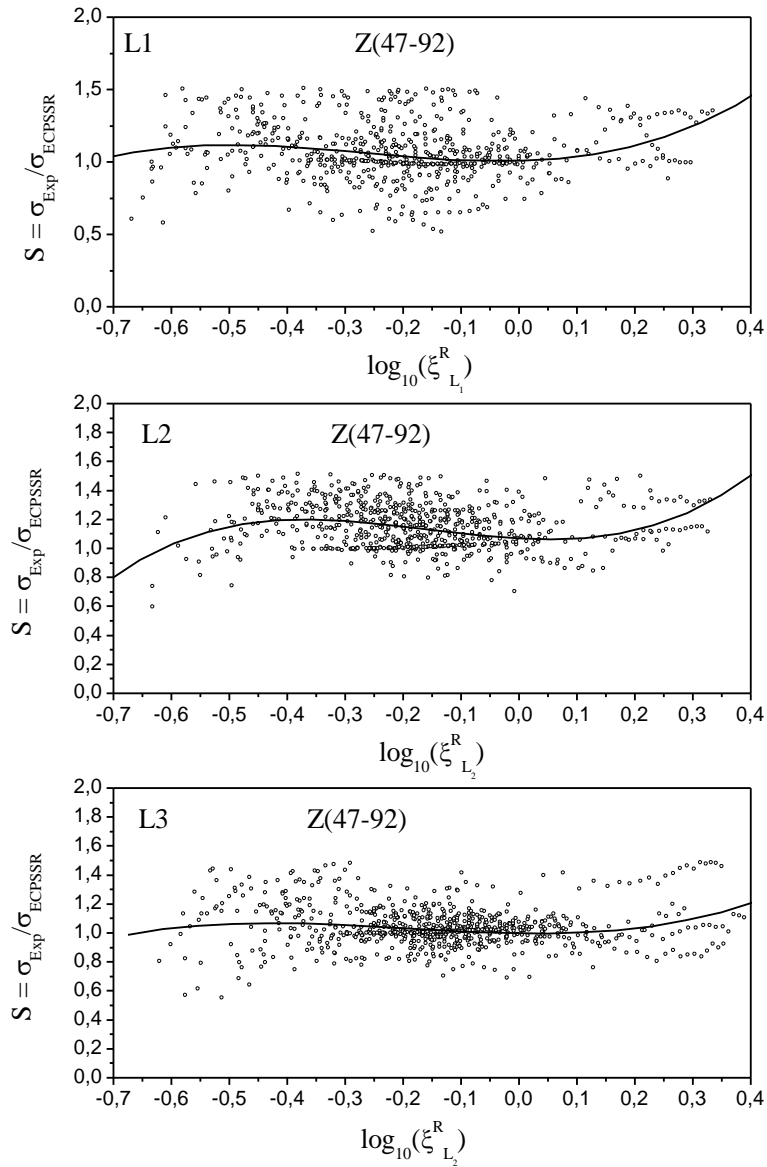


Figure III.3 : Evolution des sections efficaces expérimentales normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{ECPSSR}}$ pour L_1 , L_2 et L_3 en fonction de la vitesse relativiste réduite $\text{Log}_{10}(\xi_{L_i}^R)$ ($i=1, 2, 3$). L'ajustement collectif \bar{S}_C est représenté en trait plein.

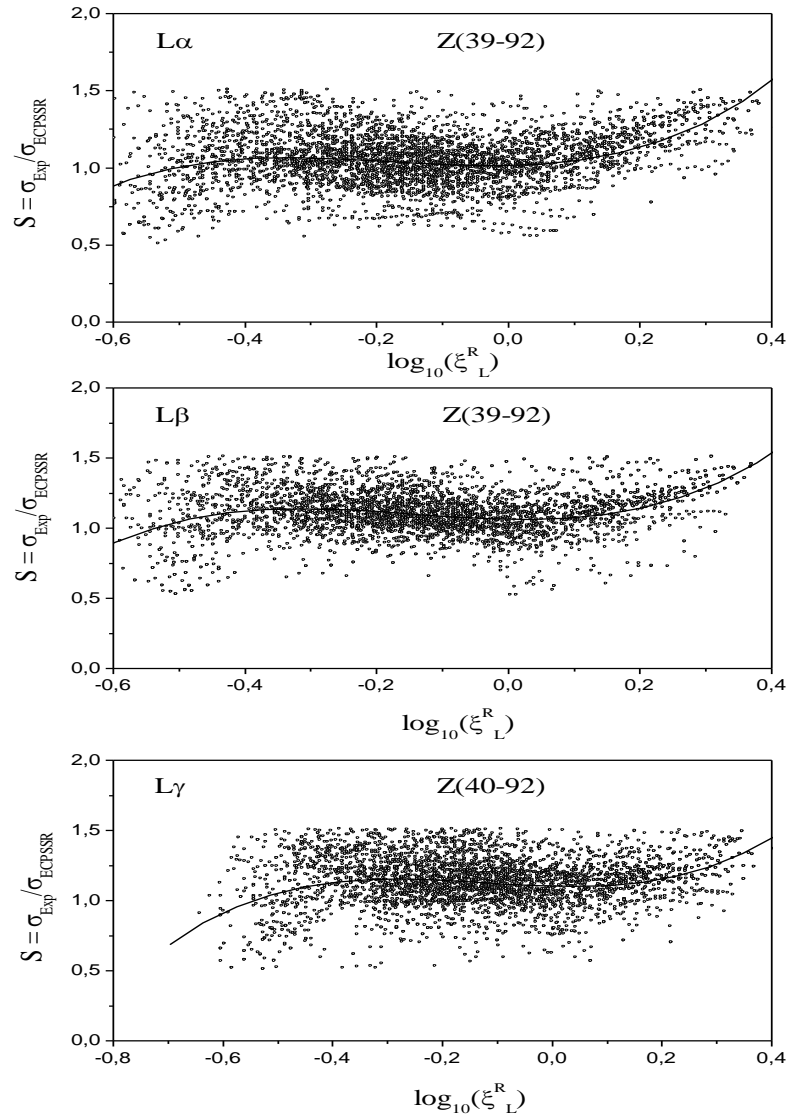


Figure III.4 : Evolution des sections efficaces expérimentales normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ pour L_{α} , L_{β} et L_{γ} en fonction de la vitesse relativiste réduite $\text{Log}_{10}(\xi_{\text{SL}}^{\text{R}})$. L'ajustement collectif \bar{S}_{C} est représenté en trait plein.

III.2.2 Procédé Z-Dépendance

Dans ses travaux [De.13 et De.15], des chercheurs de notre groupe ont déduit une nouvelle section efficace semi-empirique en introduisant la dépendance des rapports $S = \sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{ECPSSR}}$ sur le numéro atomique de l'atome cible, noté "Z-dépendance".

Dans ce travail, on adopte le même procédé pour $L_1, L_2, L_3, L_\alpha, L_\beta$ et L_γ . Afin de présenter la dispersion des données expérimentales (le même nombre de données expérimentales utilisées dans le traitement collectif), l'évolution de leur rapports S par rapport aux résultats théoriques correspondants est présentée sur les figures III.5 et III.6 en fonction de la vitesse réduite relativiste ($\log_{10}(\xi_L^R)$) et le numéro atomique de la cible (Z) pour le trois raies L_α, L_β et L_γ et les trois lignes L_1, L_2 et L_3 , respectivement.

Nous suggérons la dépendance linéaire sur le numéro atomique du facteur de normalisation. Ce choix est basé sur l'évolution des données expérimentales. Par conséquent, la fonction analytique utilisée pour cet ajustement est définie comme suit :

$$\bar{S}_Z = (r_4 + r_5 Z) \sum_{i=0}^3 r_i \text{Log}_{10}(\xi_L^i) \quad (\text{III.2.6})$$

Les figures III.5 et III.6 montrent la distribution de tous les points ($S, \log_{10}(\xi_L^R), Z$) pour $L_1, L_2, L_3, L_\alpha, L_\beta$ et L_γ des éléments avec $39 \leq Z \leq 92$ pour L_α et L_β , $40 \leq Z \leq 92$ pour L_γ et $47 \leq Z \leq 92$ pour L_1, L_2 et L_3 .

Le tableau III.3 montre tous les coefficients r_i issus de cet ajustement pour les trois raies L_α, L_β et L_γ et les trois lignes L_1, L_2 et L_3 .

Nous définissons ainsi les sections efficaces semi-empiriques de production et d'ionisation en adoptant le procédé Z dépendance comme:

$$\sigma_{\text{s-emp}} = \sigma_{\text{eCPSSR}} \bar{S} \quad (\text{III.2.7})$$

Tableau III.3 Coefficients pour déduire les sections efficaces semi-empiriques $L_1, L_2, L_3, L_\alpha, L_\beta$ et L_γ des éléments avec $47 \leq Z \leq 92$ pour L_1, L_2 et L_3 , $39 \leq Z \leq 92$ pour L_α et L_β et $40 \leq Z \leq 92$ pour L_γ en utilisant le procédé Z-dépendance.

Couche	r_0	r_1	r_2	r_3	r_4	r_5
L_1	0.720581	-0.00244085	1.13963	1.57442	1.54655	-0.00229564
L_2	0.579578	-0.115053	0.955432	2.01533	1.84031	3.62851E-5
L_3	0.956351	-0.206268	0.623413	1.48782	1.25977	-0.00319824
L_α	-0.475922	0.00740202	-0.429538	-0.867927	-2.73948	0.00872574
L_β	-0.406722	0.0513717	-0.553097	-1.34665	-2.9166	0.004411
L_γ	-0.392374	0.0341799	-0.418301	-1.10789	-2.78213	-0.404465E-3

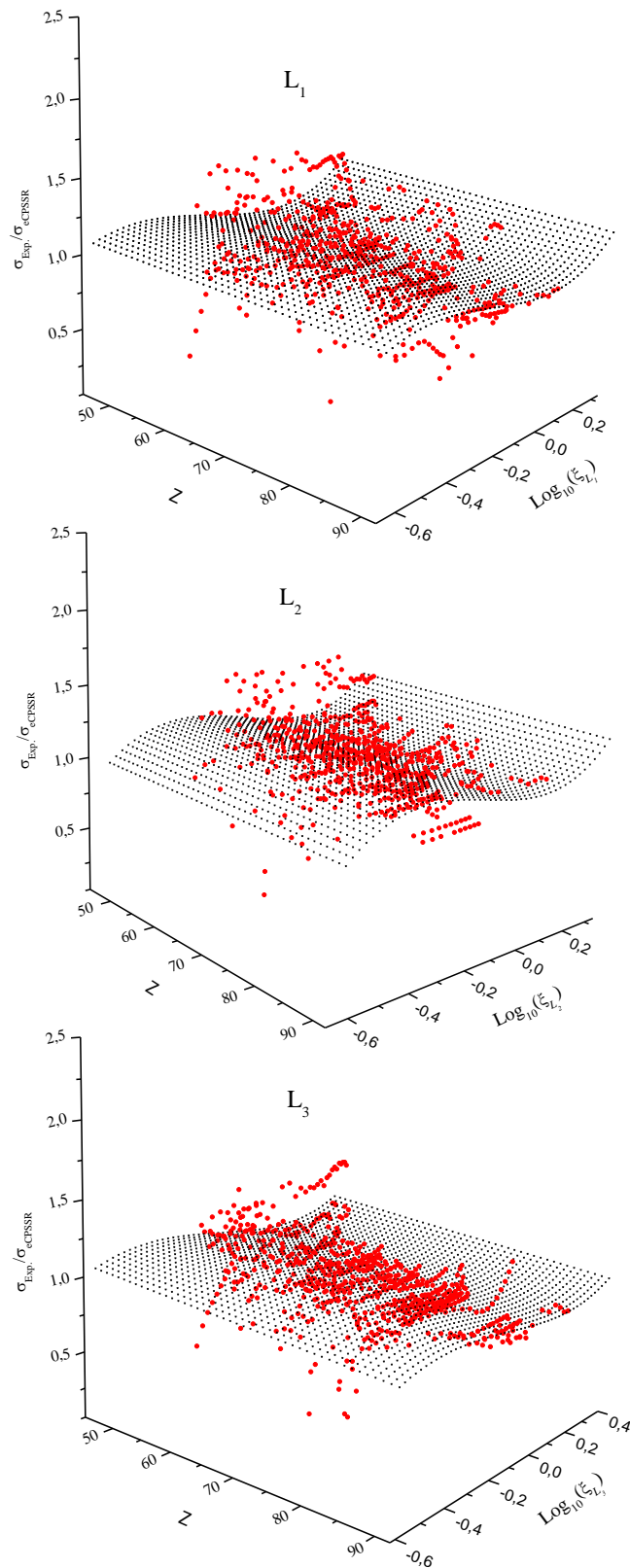


Figure III.5 : Evolution des sections efficaces de production normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ pour L_1 , L_2 et L_3 en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10}(\xi_{L_i}^R)$ ($i=1, 2, 3$). L'ajustement est représenté par une surface.

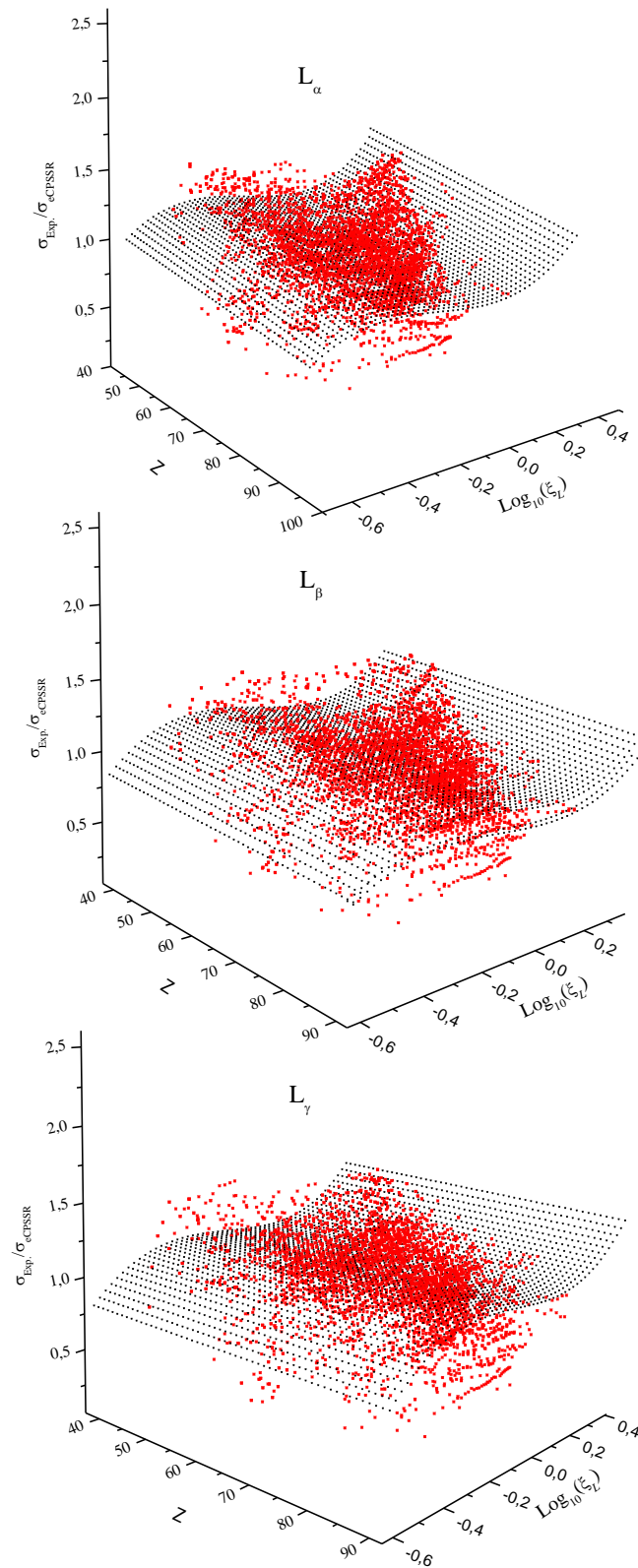


Figure III.6 : Evolution des sections efficaces de production normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ pour L_α , L_β et L_γ en fonction de la vitesse relativiste réduite $\text{Log}_{10}(\xi_L^R)$. L'ajustement est représenté par une surface.

III.2.3 Procédé Individuel

Dans cette partie, nous proposons que les données peuvent être traitées séparément, en adoptant la même procédure décrite dans la première partie. Nous avons ajusté par un polynôme d'ordre trois, les données expérimentales pour chaque élément séparément pour déduire les sections efficaces semi-empiriques des raies L_α , L_β et L_γ et des lignes L_1 , L_2 et L_3 .

Nous signalons qu'il n'existe pas de données expérimentales des éléments ^{43}Tc , ^{44}Ru , ^{54}Xe , ^{61}Pm , ^{84}Po , ^{85}At , ^{86}Rn , ^{87}Fr , ^{88}Ra , ^{89}Ac , ^{91}Pa pour L_α , L_β et L_γ et des éléments ^{39}Y , ^{40}Zr , ^{41}Nb , ^{42}Mo , ^{43}Tc , ^{44}Ru , ^{45}Rh , ^{46}Pd , ^{54}Xe , ^{55}Cs , ^{56}Ba , ^{57}La , ^{58}Ce , ^{61}Pm , ^{69}Tm , ^{75}Re , ^{81}Tl , ^{84}Po , ^{85}At , ^{86}Rn , ^{87}Fr , ^{88}Ra , ^{89}Ac pour L_1 , L_2 et L_3 . Ceci nous empêche d'adopter ce procédé pour ces éléments.

Comme précédemment, on adopte le critère de rejet des données expérimentales pour lesquelles le rapport $S = \sigma_{\text{exp}} / \sigma_{\text{eCPSSR}}$ varie en dehors de l'intervalle 0,5-1,5.

Les tableaux III.4-9 montrent tous les coefficients $r_i (i = 0, 1, 2, 3)$ issus de cet ajustement pour les trois raies L_α , L_β et L_γ et les trois lignes L_1 , L_2 et L_3 en utilisant le procédé individuel.

Les figures III.5 et III.6 montrent la distribution des points $(S, \log_{10}(\frac{\xi_L^R}{\xi_L^L}))$ pour L_1 , L_2 , L_3 , L_α , L_β et L_γ pour quelques éléments comme échantillon de présentation. L'ajustement est aussi représenté en trait plein.

Tableau III.4 Coefficients pour déduire les sections efficaces semi-empiriques L_{α} pour les éléments avec $39 \leq Z \leq 92$ en utilisant le procédé individuel.

Z	r_0	r_1	r_2	r_3
Z=39, Y	1.59348	7.98074	28.72512	30.07243
	2.62697	22.05288	95.64576	124.4541
Z=40, Zr	4.31964	41.07273	165.6203	198.7551
Z=41, Nb	3.81036	30.44728	104.3418	108.99175
Z=42, Mo	1.02284	0.08131	2.38559	-2.99901
Z=45, Rh	0.9473	-3.87283	-22.42569	-43.22731
Z=46, Pd	1.183	-0.27731	0.5966	1.49248
Z=47, Ag	1.15462	-0.25999	1.07992	2.23693
Z=48, Cd	1.12889	-0.1039	0.87322	1.95822
Z=49, In	1.21342	0.21989	1.09841	0.20253
Z=50, Sn	1.0629	0.37666	3.53026	-3.61825
Z=51, Sb	1.05635	0.83336	3.24528	-7.9672
Z=52, Te	1.02033	-0.10674	1.46189	4.79264
Z=53, I	0.99845	0.33211	2.4383	3.1312
Z=55, Cs	0.97948	0.06119	2.46225	-0.21779
Z=56, Ba	1.01815	-0.11841	3.13	6.82019
Z=57, La	0.98229	-0.27359	4.31289	12.4023
Z=58, Ce	1.12165	-0.38304	1.95596	5.23435
Z=59, Pr	1.07369	-0.06494	1.36183	4.55604
Z=60, Nd	0.91173	-0.19546	4.43997	7.89217
Z=62, Sm	1.08619	0.51764	1.97123	2.11787
Z=63, Eu	1.06398	0.18776	1.09419	1.97061
Z=64, Gd	1.07686	0.05379	0.38818	0.89208
Z=65, Tb	0.99909	0.09422	2.72616	6.50358
Z=66, Dy	1.07529	-0.664422	1.49211	4.5896
Z=67, Ho	1.03565	-0.02856	1.81929	4.75753
Z=68, Er	0.99357	0.03697	2.87549	6.43992
Z=69, Tm	0.99442	-0.13471	2.75634	5.5699
Z=70, Yb	1.01605	-0.14767	0.84754	3.62436
Z=71, Lu	0.91477	-0.73075	5.35934	16.19713
Z=72, Hf	0.90691	-0.97504	-1.36268	-1.03359
Z=73, Ta	0.97217	-0.07422	2.93956	5.92749
Z=74, W	1.04349	1.99151	15.14796	26.11066
Z=75, Re	0.998	1.61878	10.19319	13.88353
Z=76, Os	1.16193	1.16045	1.75458	-1.71001
Z=77, Ir	0.94438	0.33446	1.34836	-0.49296
Z=78, Pt	0.91916	-0.63355	-1.17519	-0.75593
Z=79, Au	0.99992	1.91172	11.55465	17.08924
Z=80, Hg	1.36842	4.29694	13.38436	13.11111
Z=81, Tl	0.95231	-0.09524	-0.42144	-0.29023
Z=82, Pb	0.75816	-1.11353	1.26384	6.77319
Z=83, Bi	0.73452	-1.4871	-3.18215	-2.12039
Z=90, Th	0.95846	0.30987	1.56536	1.60416
Z=92, U	0.95848	0.30985	1.56230	1.600420

Tableau III.5 Coefficients pour déduire les sections efficaces semi-empiriques L_{β} pour les éléments avec $39 \leq Z \leq 92$ en utilisant le procédé individuel.

Z	r_0	r_1	r_2	r_3
Z=39, Y	1.27752	4.5024	12.45966	7.67689
Z=40, Zr	2.40595	17.16835	72.74564	94.68616
Z=41, Nb	9.00582	110.18532	519.2925	794.52283
Z=42, Mo	2.27074	14.38733	53.43626	57.3684
Z=45, Rh	1.21535	-0.46645	1.05703	4.28625
Z=46, Pd	1.01146	-10.13844	-70.96265	-135.29993
Z=47, Ag	1.39277	0.22145	-0.56762	-1.21994
Z=48, Cd	1.35257	-0.30286	1.49207	3.23033
Z=49, In	1.4246	1.36394	-4.11281	-14.8667
Z=50, Sn	1.07485	-0.19515	1.51332	2.21276
Z=51, Sb	1.07362	0.44192	2.78009	-4.84534
Z=52, Te	1.16692	0.10123	1.09723	1.86782
Z=53, I	1.03577	-0.12391	2.28309	1.07274
Z=55, Cs	1.39277	0.22145	-0.56762	-1.21994
Z=56, Ba	0.99531	-0.13487	1.40425	-2.63463
Z=57, La	0.96372	-0.52774	-2.63463	9.0353
Z=58, Ce	1.01658	-0.59061	2.8104	10.40457
Z=59, Pr	1.12421	-0.35912	2.2379	5.79493
Z=60, Nd	1.04538	-0.2711	1.75857	5.68839
Z=62, Sm	0.98102	-0.2853	4.19139	8.6526
Z=63, Eu	1.06931	0.10669	3.31041	8.90383
Z=64, Gd	1.09741	0.17969	0.90824	1.42023
Z=65, Tb	1.15428	-0.05641	-0.16698	0.26341
Z=66, Dy	1.03943	-0.18233	0.86821	4.47807
Z=67, Ho	1.11887	-0.23195	0.81526	4.82647
Z=68, Er	1.12703	-0.51804	-0.51235	3.33922
Z=69, Tm	1.073	-0.33053	3.29934	10.58981
Z=70, Yb	1.04294	-0.1809	1.89856	4.81245
Z=71, Lu	1.08457	-0.58663	-2.02561	-0.98704
Z=72, Hf	0.96065	-1.07015	8.83159	35.17242
Z=73, Ta	0.98732	-0.98327	-0.65532	-0.07818
Z=74, W	1.07512	-0.6425	0.51406	3.73722
Z=75, Re	0.99547	-2.7165	-18.23455	-34.1464
Z=76, Os	0.97126	0.60613	6.77451	11.66988
Z=77, Ir	1.10736	-0.23629	-1.51278	-2.02115
Z=78, Pt	0.96163	-1.13581	-3.5108	-2.96065
Z=79, Au	1.05699	-0.07426	1.56323	2.91428
Z=80, Hg	1.31193	2.5507	6.67855	3.88729
Z=81, Tl	1.08729	-0.10736	2.18168	4.38395
Z=82, Pb	1.08482	-0.33435	-1.22492	-0.95882
Z=83, Bi	1.00392	-0.37389	0.84256	3.1215
Z=90, Th	0.60893	-6.28471	-27.5479	-36.22848
Z=92, U	0.96136	0.02593	2.78103	4.64422

Tableau III.6 Coefficients pour déduire les sections efficaces semi-empiriques L_γ pour les éléments avec $40 \leq Z \leq 92$ en utilisant le procédé individuel.

Z	r_0	r_1	r_2	r_3
Z=40, Zr	1.00028	-7.75519	-36.49951	-45.74647
Z=41, Nb	1.7708	9.76115	35.75082	27.78148
Z=42, Mo	4.14033	34.43001	115.49323	118.63182
Z=45, Rh	1.0289	0.15756	1.82159	-2.61976
Z=46, Pd	0.87256	-11.80771	-79.01378	-138.09143
Z=47, Ag	1.17939	0.58759	-0.18296	-4.31533
Z=48, Cd	1.28488	0.09549	-0.13648	0.9656
Z=49, In	1.30915	0.54385	0.64116	-4.51594
Z=50, Sn	1.07232	-0.11659	0.69608	1.78183
Z=51, Sb	1.12387	0.50803	1.90431	-4.0813
Z=52, Te	1.0329	0.34367	3.26679	-4.66565
Z=53, I	1.05842	-0.15164	2.46439	-0.91441
Z=55, Cs	1.17939	0.58759	-0.18296	-4.31533
Z=56, Ba	0.98019	4.80999E-4	1.01349	-2.90251
Z=57, La	1.01172	-0.30034	3.17522	7.39073
Z=58, Ce	1.07503	-0.32338	1.70141	7.13898
Z=59, Pr	1.13275	-0.49238	1.75361	6.03204
Z=60, Nd	1.10186	-0.29061	1.68217	6.55921
Z=62, Sm	1.04305	0.07104	3.50444	6.93221
Z=63, Eu	1.08267	0.43319	1.85382	1.06674
Z=64, Gd	1.17175	0.28313	0.28795	0.51603
Z=65, Tb	1.18085	0.06678	-0.09093	0.10888
Z=66, Dy	1.03619	0.15145	3.58355	8.01378
Z=67, Ho	1.15781	-0.07732	1.41987	5.09674
Z=68, Er	1.19577	-0.33872	0.13821	4.25036
Z=69, Tm	1.10348	-0.1303	3.42844	8.53542
Z=70, Yb	1.12554	-0.4909	0.91374	3.7302
Z=71, Lu	1.20202	-0.70478	-3.73528	-3.13739
Z=72, Hf	0.98729	-0.97843	10.98288	39.9137
Z=73, Ta	1.00404	-0.49625	1.16646	3.04864
Z=74, W	1.08203	-0.54379	0.1033	2.59539
Z=75, Re	0.83025	-4.34728	-18.63181	-26.42585
Z=76, Os	1.04479	0.57913	6.3467	11.76443
Z=77, Ir	1.12205	-1.03857	-2.38785	-0.24274
Z=78, Pt	1.04317	-1.64203	-11.74459	-19.74719
Z=79, Au	1.15806	0.9585	5.92317	8.50944
Z=80, Hg	1.12126	0.44066	-3.32223	-10.38893
Z=81, Tl	1.07104	-0.32028	2.83677	6.49864
Z=82, Pb	1.07481	-0.91894	-2.82588	-1.8815
Z=83, Bi	1.2218	1.62664	4.91265	4.33411
Z=90, Th	1.28241	0.52615	-3.90918	-12.1963
Z=92, U	1.16175	-0.52021	0.30125	2.34507

Tableau III.7 Coefficients pour déduire les sections efficace semi-empiriques L_1 pour les éléments avec $47 \leq Z \leq 92$ en utilisant le procédé individuel.

Z	r_0	r_1	r_2	r_3
Z=47, Ag	-1.19495	2.93902	-17.5052	29.75498
Z=48, Cd	1.61174	0.72398	-4.30376	-69.08706
Z=49, In	1.44323	0.1437	-0.1192	-2.32049
Z=50, Sn	1.11381	-0.60557	-0.67599	4.07469
Z=51, Sb	0.75591	0.08656	9.56737	26.98288
Z=52, Te	0.92721	0.28432	-9.90131	-34.48858
Z=53, I	1.17627	-0.22338	0.64394	-2.57772
Z=59, Pr	-2.76159	-31.6645	-79.0064	-64.19107
Z=60, Nd	1.00996	-0.52442	-2.63232	-4.84997
Z=62, Sm	-0.19104	-3.93125	-2.57093	0.94252
Z=63, Eu	0.89496	0.93199	5.7442	0.42505
Z=64, Gd	0.98532	1.49557	12.73915	16.81583
Z=65, Tb	2.2641	8.53927	20.31279	15.51218
Z=66, Dy	0.99246	-3.18264	-24.65632	-45.31364
Z=67, Ho	1.00885	0.8765	5.06322	4.51398
Z=68, Er	2.53468	13.12968	39.42441	38.18373
Z=70, Yb	1.10367	2.38382	13.12624	14.98593
Z=71, Lu	3.96849	23.21854	59.11301	48.96563
Z=73, Ta	0.84467	-3.68529	-9.40129	-6.88051
Z=74, W	0.88258	1.81886	9.97022	9.82569
Z=76, Os	29.93258	225.99602	566.2726	457.45315
Z=77, Ir	402.39066	2590.51538	5550.32695	3946.51004
Z=78, Pt	3.17566	23.34386	75.0876	73.95037
Z=79, Au	1.14002	2.11355	8.83143	9.24689
Z=80, Hg	-18.0649	-234.01976	-924.06642	-1185.6502
Z=82, Pb	1.63802	7.90457	25.72061	22.9974
Z=83, Bi	1.54178	6.15412	23.56011	26.27598
Z=90, Th	-2.05925	-38.86788	-147.9876	-174.03284
Z=92, U	0.99462	-0.94905	-7.00589	-12.67041

Tableau III.8 Coefficients pour déduire les sections efficaces semi-empiriques L_2 pour les éléments avec $47 \leq Z \leq 92$ en utilisant le procédé individuel.

Z	r_0	r_1	r_2	r_3
Z=47, Ag	6.60456	-94.9495	568.5812	-1106.2428
Z=48, Cd	1.33534	1.04743	0.05809	-52.48904
Z=49, In	1.39168	-0.44599	-0.11953	2.26448
Z=50, Sn	1.0059	0.32261	0.48287	-1.03248
Z=51, Sb	0.91292	-0.17426	6.07956	16.24015
Z=52, Te	0.84445	0.48699	-1.294	-33.48422
Z=53, I	1.17627	-0.22338	0.64394	-2.57772
Z=59, Pr	-0.92537	-19.70677	-51.29754	-39.42286
Z=60, Nd	0.99583	0.77773	17.42562	41.51355
Z=62, Sm	-7.7708	-60.64273	-130.0439	-91.28515
Z=63, Eu	1.02082	0.14917	-5.29622	-35.64485
Z=64, Gd	1.06578	-0.65169	-4.35897	-22.39062
Z=65, Tb	1.93826	7.99671	30.49356	36.29774
Z=66, Dy	1.09804	0.00479	-3.24882	-8.11746
Z=67, Ho	0.9265	-3.20806	-20.98525	-40.92843
Z=68, Er	2.39653	13.14093	47.10426	51.71089
Z=70, Yb	1.06787	0.77338	5.5217	6.71195
Z=71, Lu	2.13561	10.01131	36.05581	40.37832
Z=72, Hf	1.3793	4.2572	20.8576	23.13972
Z=73, Ta	0.97613	-2.40397	-0.83086	6.14659
Z=74, W	1.27048	2.6137	14.86794	21.13912
Z=76, Os	34.6391	219.0386	478.4566	348.2775
Z=77, Ir	1.14832	-0.42677	1.83156	5.85769
Z=78, Pt	0.69601	-4.51125	-18.19327	-23.33076
Z=79, Au	1.20548	2.13214	11.29568	14.773
Z=80, Hg	1.3793	4.2572	20.8576	23.13972
Z=82, Pb	1.16641	0.36256	0.76495	0.71237
Z=83, Bi	1.08873	0.72189	1.64124	0.21964
Z=90, Th	1.42102	-1.16448	-17.42183	-34.01275
Z=92, U	1.20661	-0.62262	-6.49957	-13.83045

Tableau III.9 Coefficients pour déduire les sections efficaces semi-empiriques L_3 pour les éléments avec $47 \leq Z \leq 92$ en utilisant le procédé individuel.

Z	r_0	r_1	r_2	r_3
Z=47, Ag	1.06532	-0.63527	-0.50391	6.12252
Z=48, Cd	1.09315	-0.51133	8.69663	-52.9004
Z=49, In	1.08151	-0.94398	-2.44489	9.92385
Z=50, Sn	1.30106	0.13343	0.43888	1.67962
Z=51, Sb	0.85511	-0.47871	5.15021	8.79436
Z=52, Te	0.79784	0.48592	-0.14886	-32.48673
Z=53, I	0.97352	-0.46304	0.83883	10.84194
Z=59, Pr	-2.07049	-30.85475	-87.40128	-79.47139
Z=60, Nd	1.02348	0.29933	-1.05657	-20.12084
Z=62, Sm	-4.74802	-45.74752	-112.5388	-90.57708
Z=63, Eu	1.00104	0.6531	3.7743	-5.51765
Z=64, Gd	0.94001	0.0518	7.66258	12.8798
Z=65, Tb	0.80513	-0.74385	1.85308	4.18433
Z=66, Dy	1.05193	0.12965	-4.36759	-14.6172
Z=67, Ho	1.00491	0.77808	6.89368	7.89078
Z=68, Er	-0.01368	-11.28523	-42.31529	-48.28783
Z=70, Yb	0.96632	0.93846	7.46656	9.3271
Z=71, Lu	1.39946	4.89445	19.77491	25.45068
Z=72, Hf	1.07976	-0.05042	2.6481	-0.49655
Z=73, Ta	1.0554	0.80425	8.45904	15.61573
Z=74, W	1.03785	0.00256	1.18101	0.48932
Z=76, Os	34.21072	273.2048	741.9049	663.11475
Z=77, Ir	0.90878	-1.03585	-6.11129	-11.62077
Z=78, Pt	0.57685	-5.19648	-29.64811	-48.22803
Z=79, Au	0.97935	0.00595	1.69219	3.86258
Z=80, Hg	1.40142	4.5802	16.89235	22.09373
Z=82, Pb	1.00318	0.57682	4.13976	8.00876
Z=83, Bi	1.10783	2.44987	13.19867	18.71107
Z=90, Th	1.07035	0.03071	-2.25107	-6.81565
Z=92, U	0.95699	0.061	-0.61421	-4.37752

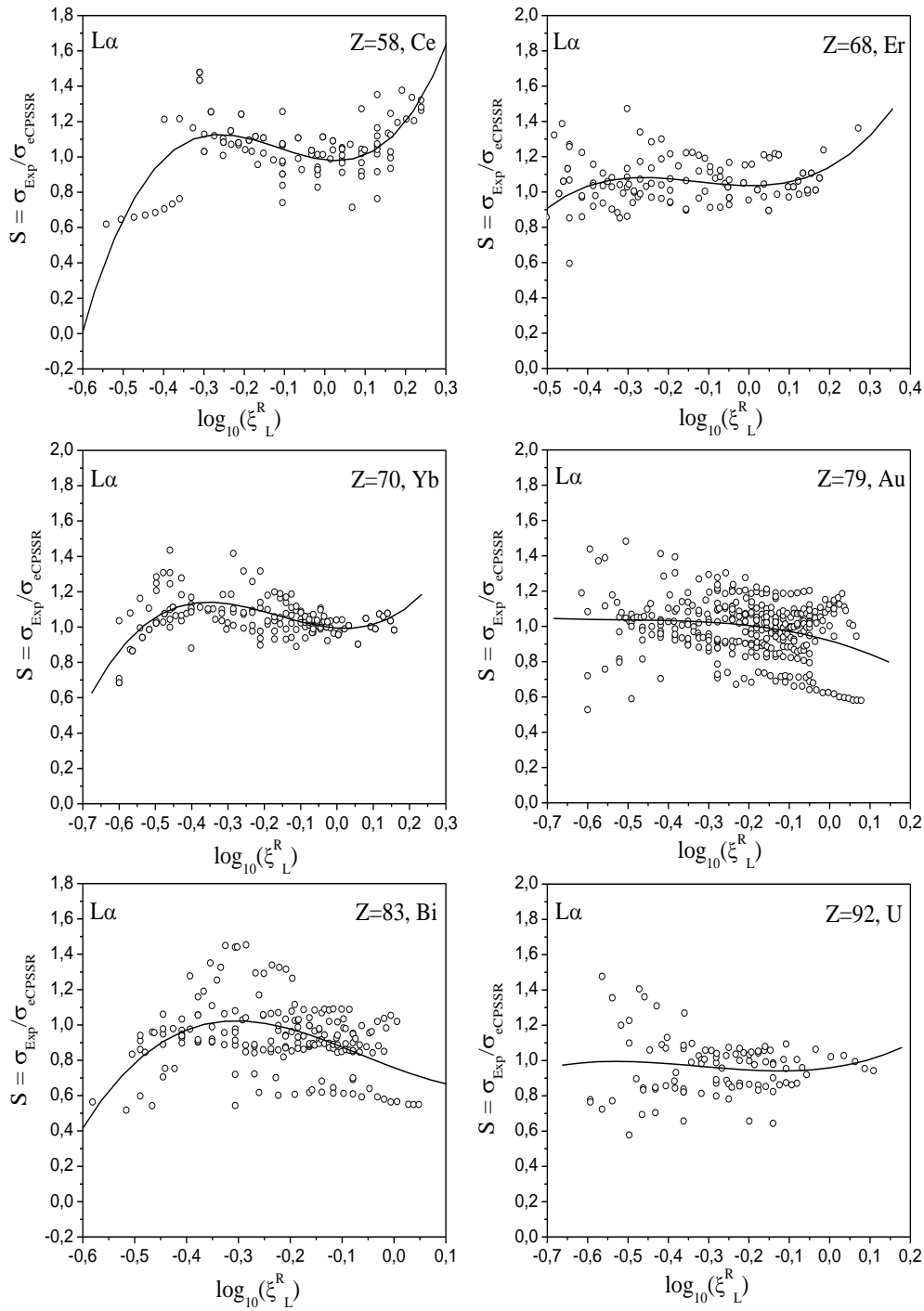


Figure III.7 : Evolution des sections efficaces de production L_α normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10}(\xi_L^R)$ pour des éléments qui possèdent le plus grand nombre de données expérimentales ; $_{58}\text{Ce}$, $_{68}\text{Er}$, $_{70}\text{Yb}$, $_{79}\text{Au}$, $_{83}\text{Bi}$ et $_{92}\text{U}$. Les différents ajustements \bar{S}_1 sont représentés en trait plein.

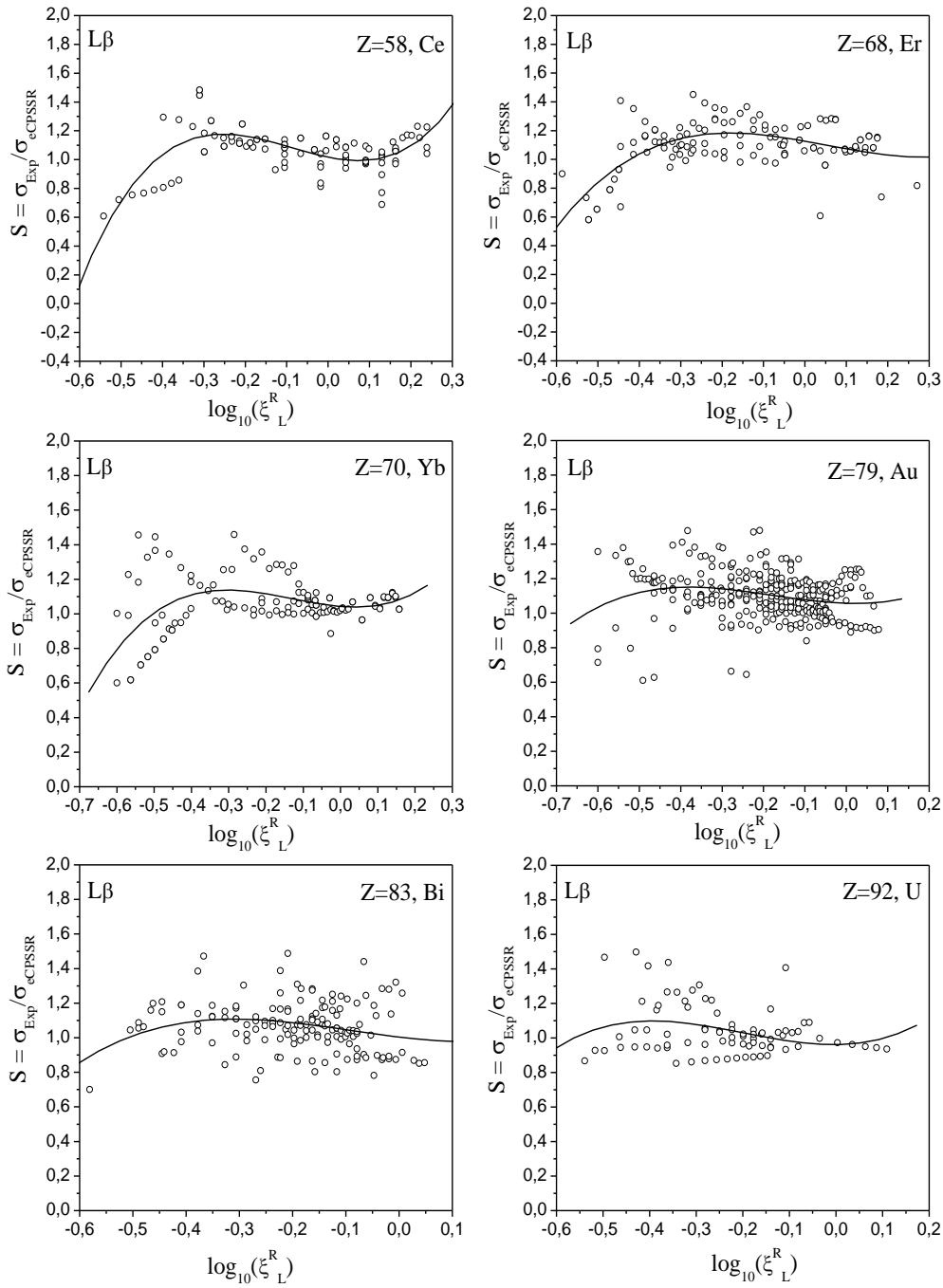


Figure III.8 : Evolution des sections efficaces de production $L\beta$ normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10}(\xi_L^R)$ pour des éléments qui possèdent le plus grand nombre de données expérimentales; $_{58}\text{Ce}$, $_{68}\text{Er}$, $_{70}\text{Yb}$, $_{79}\text{Au}$, $_{83}\text{Bi}$ et $_{92}\text{U}$. Les différents ajustements \bar{S}_1 sont représentés en trait plein.

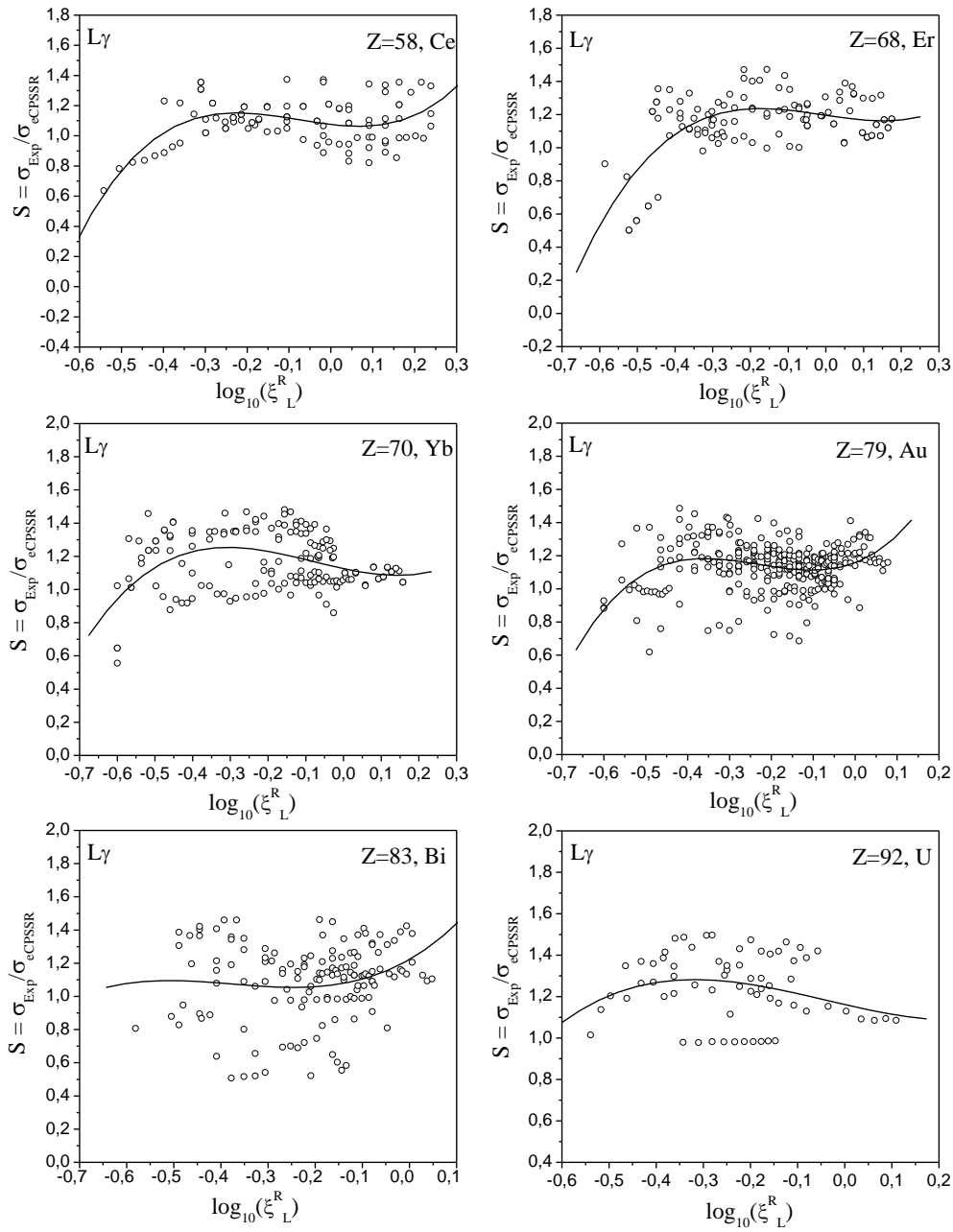


Figure III.9 : Evolution des sections efficaces de production de rayons X L_γ normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ en fonction de la vitesse réduite $\log_{10}(\xi_L^R)$ pour des éléments qui possèdent le plus grand nombre de données expérimentales; $_{58}\text{Ce}$, $_{68}\text{Er}$, $_{70}\text{Yb}$, $_{79}\text{Au}$, $_{83}\text{Bi}$ et $_{92}\text{U}$. Les différents ajustements \bar{S}_1 sont représentés en trait plein.

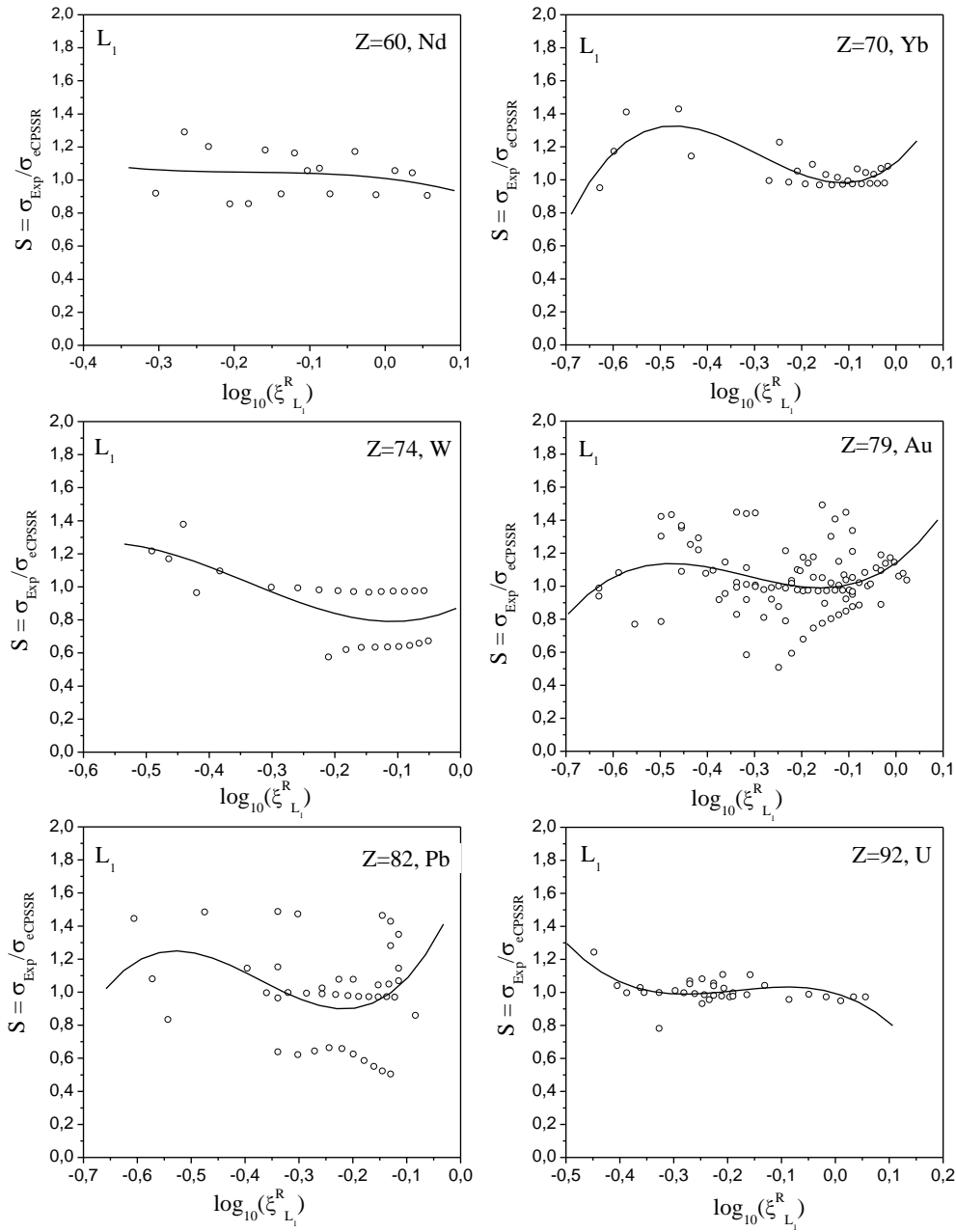


Figure III.10 : Evolution des sections efficaces d'ionisation normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ pour L_1 en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10}(\xi_{L_1}^R)$ pour des éléments qui possèdent le plus grand nombre de données expérimentales; ${}_{92}\text{U}$, ${}_{79}\text{Au}$, ${}_{82}\text{Pb}$, ${}_{74}\text{W}$, ${}_{70}\text{Yb}$ et ${}_{60}\text{Nd}$. Les différents ajustements \bar{S}_1 sont représentés en trait plein.

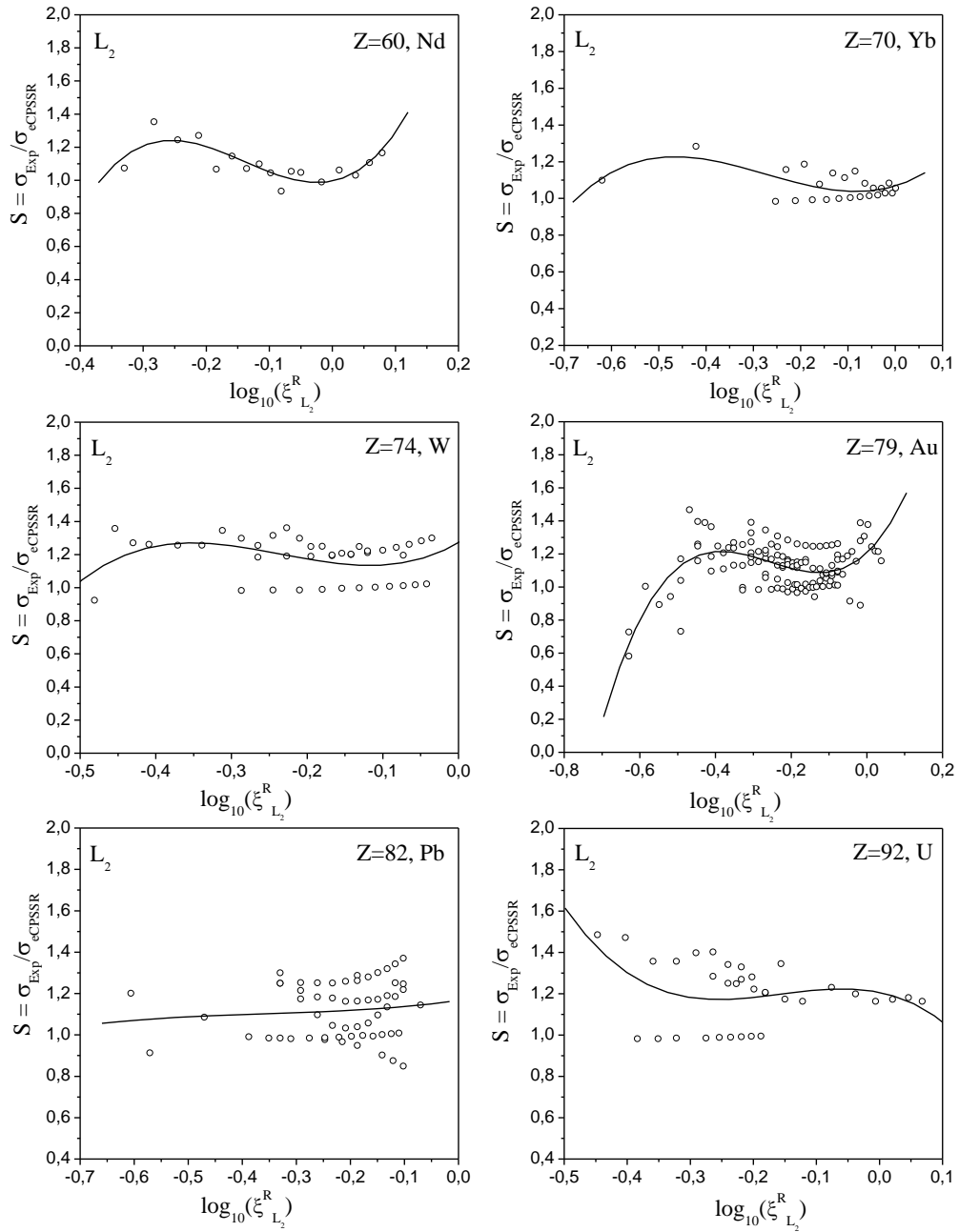


Figure III.11 : Evolution des sections efficaces d'ionisation normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ pour L_2 en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10}(\xi_{L_2}^R)$ pour des éléments qui possèdent le plus grand nombre de données expérimentales; ${}_{92}\text{U}$, ${}_{79}\text{Au}$, ${}_{82}\text{Pb}$, ${}_{74}\text{W}$, ${}_{70}\text{Yb}$ et ${}_{60}\text{Nd}$. Les différents ajustements \bar{S}_1 sont représentés en trait plein.

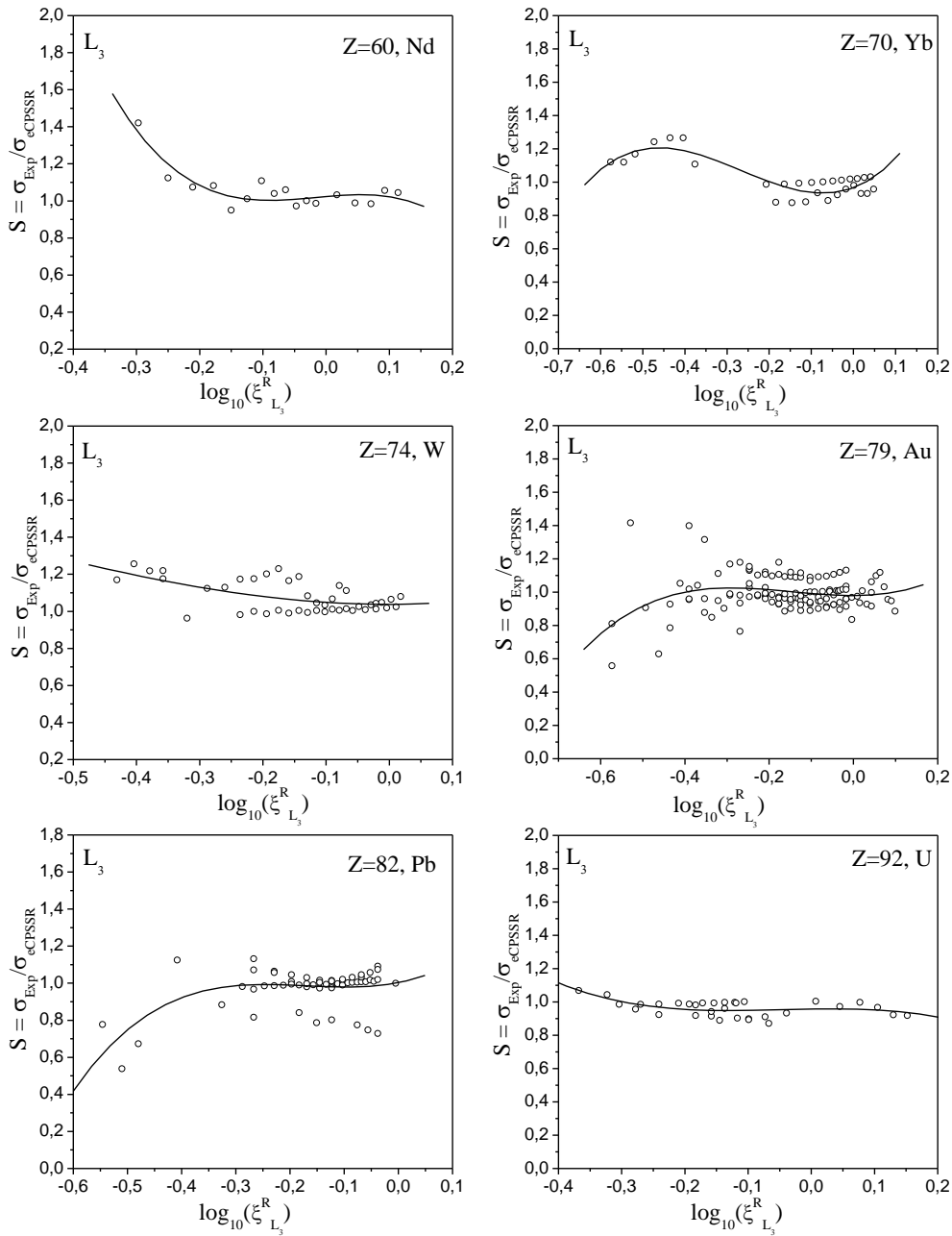


Figure III.12 : Evolution des sections efficaces d'ionisation normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ pour L_3 en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10}(\xi_{L_3}^R)$ pour des éléments qui possèdent le plus grand nombre de données expérimentales; ${}_{92}\text{U}$, ${}_{79}\text{Au}$, ${}_{82}\text{Pb}$, ${}_{74}\text{W}$, ${}_{70}\text{Yb}$ et ${}_{60}\text{Nd}$. Les différents ajustements \bar{S}_1 sont représentés en trait plein.

III.3 Discussion des résultats

III.3.1 Erreur quadratique moyenne

Tout d'abord, il faut souligner que toutes les équations utilisées dans les différents procédés adoptés dans ce travail et leurs coefficients associés ne sont valables que dans la région d'énergie du proton allant de 0,02 à 10,0 MeV et pour les éléments de numéro atomique considéré pour chaque raie ou ligne. Toute extension en dehors des gammes correspondantes pourraient donner des sections efficaces erronées.

Les valeurs de l'erreur quadratique moyenne (ϵ_{RMS}) sont rapportées dans les tableaux III.10 et III.11 en utilisant les procédés collectif (C), Z-dépendance (Z) et individuel (I) pour les trois raies L_α , L_β et L_γ et les trois lignes L_1 , L_2 et L_3 , respectivement.

De plus, les variations des valeurs de l'erreur quadratique moyenne (ϵ_{RMS}) des trois procédés (C, Z et I) sont présentées sur les figures III.13-III.14 en fonction du numéro atomique Z pour les trois raies L_α , L_β et L_γ et les trois lignes L_1 , L_2 et L_3 , respectivement.

L'examen des figures et des valeurs rapportées dans les tableaux nécessite quelques commentaires, à savoir :

- La qualité d'ajustement dépend plus fortement sur la dispersion des données expérimentales que sur le nombre de données utilisées. Généralement, Il est observé que l'erreur quadratique moyenne (ϵ_{RMS}) diminue avec l'augmentation du nombre atomique Z pour les trois raies L_α , L_β et L_γ et les trois lignes L_1 , L_2 et L_3 des trois procédés.
- La comparaison entre les trois procédés (C, Z et I), nous permet de dire que les sections efficaces semi-empiriques décrites par le procédé individuel donne la meilleure représentation des données expérimentales comparativement aux autres procédés (C et Z), en considérant que la précision des sections efficaces déduites dépend de la valeur de l'erreur quadratique moyenne.
- Malgré le même nombre de données expérimentales utilisées pour chaque procédé, la dispersion des valeurs n'est pas la même (exprimées par différentes erreurs quadratiques moyennes) :

1- Pour le traitement collectif : de 0.25% à 6.91% pour L_α , de 0.49% à 7.61% pour L_β , de 0.42% à 5.72% pour L_γ , de 0.83% à 9.08% pour L_1 , de 0.39% à 8.89% pour L_2 et de 0.78% à 7.41% pour L_3 .

2- Pour le traitement Z-dépendance: de 0.28% à 6.05% pour L_{α} , de 0.41% à 7.53% pour L_{β} , de 0.44% à 4.60% pour L_{γ} , de 0.74% à 7.88% pour L_1 , de 0.98% à 8.90% pour L_2 et de 0.50% à 6.50% pour L_3 .

3- Pour le traitement individuel: de 0.37% à 5.17% pour L_{α} , de 0.38% à 6.45% pour L_{β} , de 0.16% à 4.44% pour L_{γ} , de 0.10% à 4.04% pour L_1 , de 0.05% à 3.62% pour L_2 et de 0.11% à 2.22% pour L_3 .

- Généralement, le procédé Z-dépendance donne meilleure représentation des données expérimentales que le procédé collectif. Ceci est dû à l'absence de la dépendance du numéro atomique du procédé collectif, qui ajoute une source supplémentaire d'erreurs pour déduire les sections efficaces semi-empiriques.
- En effet, malgré que les valeurs de l'erreur quadratique moyenne pour le procédé individuel sont meilleures que celles du procédé Z -dépendance, ce dernier nous permet de trouver les sections efficaces semi-empiriques pour tous les éléments en utilisant une formule unique.

Tableau III.10 Erreurs quadratiques moyennes ε_{RMS} (%) des sections efficaces semi-empiriques L_α , L_β et L_γ en utilisant différents procédés ; collectif (C), Z-dépendance (Z) individuel (I).

Z	L_α			L_β			L_γ		
	C	Z	I	C	Z	I	C	Z	I
Z=39, Y	6.648	5.9879	5.1713	7.6060	7.5344	6.4520	-	-	-
Z=40, Zr	6.5292	6.0498	3.4946	4.2879	4.1196	2.9570	4.5073	4.6036	0.1581
Z=41, Nb	4.1480	2.1143	1.5491	5.2763	4.0975	0.0185	3.6692	3.6845	1.3060
Z=42, Mo	5.6231	4.5692	3.3057	2.6363	2.2704	0.6959	5.7201	5.7009	4.4424
Z=45, Rh	4.0233	3.0893	1.6976	2.4877	1.8832	0.6779	3.2226	3.2402	2.3929
Z=46, Pd	5.1114	3.5886	2.9856	2.4268	2.0059	0.3589	2.0354	2.6459	1.9735
Z=47, Ag	6.9079	4.8465	3.5647	4.9702	4.3060	1.2755	3.9340	3.9612	3.1477
Z=48, Cd	2.9878	2.0512	1.5858	2.0334	4.3090	0.2094	2.2902	2.3230	1.0919
Z=49, In	4.0645	3.2848	3.0993	4.3622	4.0303	2.0350	3.6930	3.7342	1.4253
Z=50, Sn	4.3169	2.8897	1.3935	2.5524	2.3044	1.6279	2.8141	2.8126	1.5556
Z=51, Sb	2.5380	2.0565	1.7061	1.9934	1.8838	1.6280	2.2229	2.2352	1.8282
Z=52, Te	2.7421	2.5349	2.3303	1.5976	1.4143	1.0200	2.3221	2.3219	2.2859
Z=53, I	1.1122	1.2025	1.0716	1.2190	1.2398	1.1762	1.2572	1.2676	1.1807
Z=55, Cs	1.2763	1.4414	2.0799	1.2225	1.3114	2.4051	1.7387	1.7305	1.8307
Z=56, Ba	1.8221	1.8577	1.6561	2.1077	2.1501	1.8929	2.6365	2.6293	2.3962
Z=57, La	2.3562	2.2335	2.0998	2.9127	2.9360	2.7600	2.5237	2.5213	2.3923
Z=58, Ce	2.4245	2.4474	2.1531	1.9895	2.0165	1.6648	1.9314	1.9292	1.7502
Z=59, Pr	2.5255	2.0828	1.4438	1.8010	1.6602	1.2404	1.7222	1.7326	1.4010
Z=60, Nd	2.3877	2.2887	1.1851	1.8711	1.8921	1.8512	2.0084	2.0095	1.9152
Z=62, Sm	2.0335	2.0331	1.6976	1.4819	1.4752	1.3160	1.3778	1.3756	1.2691
Z=63, Eu	1.2782	1.2644	0.9442	1.4379	1.4451	1.2997	1.3631	1.3614	1.2344
Z=64, Gd	2.1931	2.1574	2.1462	2.3974	2.3745	2.3043	2.3219	2.3234	2.1657
Z=65, Tb	1.6498	1.6166	1.5774	1.7291	1.7089	1.5777	1.7314	1.7324	1.5992
Z=66, Dy	1.7730	1.8361	1.6132	2.0031	2.0154	1.9573	1.9008	1.8988	1.7519
Z=67, Ho	2.1305	2.1412	2.1320	2.1633	2.1624	2.3489	2.0241	2.0237	2.0425
Z=68, Er	1.6497	1.6743	1.6074	1.7486	1.7476	1.5836	1.8275	1.8272	1.6772
Z=69, Tm	1.1603	1.1959	1.0506	1.1866	1.1935	0.9957	1.1655	1.1643	0.9368
Z=70, Yb	1.3136	1.3217	1.1566	1.5752	1.5725	1.6134	2.0128	2.0124	1.7396
Z=71, Lu	0.8494	0.8427	0.8100	1.0934	1.0685	0.9243	0.9423	0.9429	0.7766
Z=72, Hf	1.2091	1.2309	0.9316	1.0872	1.0888	0.9025	1.2186	1.2182	1.0259
Z=73, Ta	1.8589	1.8438	1.5244	1.6704	1.6783	1.2424	1.8699	1.8706	1.6821
Z=74, W	1.8809	1.9339	1.8703	1.5531	1.5938	1.4301	1.7006	1.6993	1.6862
Z=75, Re	0.2491	0.2844	0.1995	0.4185	0.4157	0.3754	0.5573	0.5586	0.2363
Z=76, Os	0.4451	0.4373	0.3698	0.4547	0.4154	0.2438	0.4231	0.4257	0.2984
Z=77, Ir	0.8073	0.9927	0.5209	0.5975	0.6184	0.5651	0.8776	0.8739	0.7453
Z=78, Pt	1.0314	0.8619	0.7097	0.9362	0.8811	0.8055	1.2856	1.2880	1.2009
Z=79, Au	2.6893	2.7004	2.6031	1.8813	1.9334	1.8018	1.6522	1.8470	1.7603
Z=80, Hg	1.0388	0.9466	0.9307	0.9138	0.9201	0.8951	1.6369	1.6377	1.6293
Z=81, Tl	1.1398	1.2895	0.7519	0.4862	0.5425	0.4151	0.4894	0.4865	0.4004
Z=82, Pb	2.0287	1.8241	1.8074	1.3256	1.3804	1.2504	1.9976	1.9947	1.9073
Z=83, Bi	2.2960	2.1500	2.0161	1.3169	1.3080	1.3171	1.9847	1.9833	1.9803
Z=90, Th	1.8629	1.7944	1.8107	0.9609	0.9118	0.8782	0.9119	0.9086	0.8516
Z=92, U	1.3938	1.4415	1.2909	1.0191	0.5754	0.9397	1.0861	1.0403	0.7824

Tableau III.11 Erreurs quadratiques moyennes ε_{RMS} (%) des sections efficaces semi-empiriques L_1 , L_2 et L_3 en utilisant différents procédés ; collectif (C), Z-dépendance (Z) individuel (I).

Z	L_1			L_2			L_3		
	Eq. 10	Eq.12	Eq.14	Eq. 10	Eq.12	Eq.14	Eq. 10	Eq.12	Eq.14
Z=47, Ag	7.5210	6.4544	2.4210	8.8883	8.8961	0.0527	6.2940	5.2606	1.7877
Z=48, Cd	-	-	-	7.7682	7.7806	1.6873	5.7282	3.9020	1.7269
Z=49, In	9.0833	7.8855	0.4912	7.5367	7.5481	0.9974	6.6541	6.3861	1.5485
Z=50, Sn	4.6290	4.2014	1.2680	3.5296	3.5243	0.9333	7.4157	6.5004	0.8813
Z=51, Sb	4.1545	4.6085	1.6211	2.4847	2.4793	1.1733	2.2708	2.8547	1.1751
Z=52, Te	4.4091	4.8045	2.1521	4.2700	4.2661	1.8855	3.9893	4.4844	2.2166
Z=53, I	4.3870	3.9485	2.4320	2.9806	2.9805	3.6250	1.8512	2.1355	1.6767
Z=59, Pr	2.6744	2.3465	0.0726	1.3068	1.3083	0.2124	3.6245	2.9857	0.1114
Z=60, Nd	2.0953	2.0528	2.0492	1.2627	1.2326	0.8305	1.5589	1.3136	0.7396
Z=62, Sm	1.6710	1.8359	0.1021	2.3008	2.3039	0.0550	2.6821	2.2205	0.1061
Z=63, Eu	2.8744	2.8911	2.1611	1.3930	1.3921	0.7726	1.1131	1.0672	0.7233
Z=64, Gd	2.8223	2.7826	1.8674	1.1085	1.1099	0.7017	1.8658	1.7002	0.6859
Z=65, Tb	2.0090	1.9092	1.4125	1.5338	1.5360	0.8193	2.2194	2.1701	1.9696
Z=66, Dy	3.2533	3.2168	2.6090	2.7757	2.7745	2.4121	1.8280	1.8897	1.5730
Z=67, Ho	2.0332	2.0083	1.7332	1.3137	1.3134	2.8641	2.0280	1.8925	1.1897
Z=68, Er	1.1407	1.1006	0.6683	1.6225	1.6236	2.9463	1.7431	1.8891	0.4613
Z=70, Yb	1.3631	1.3517	0.9706	1.0143	1.0142	0.7738	1.2714	1.2681	0.7774
Z=71, Lu	1.1206	1.1479	0.6713	1.0286	1.0293	0.4884	0.9786	1.0247	0.4530
Z=72, Hf	-	-	-	1.0026	1.0031	0.3670	1.8049	1.7443	0.2332
Z=73, Ta	2.3290	2.3286	1.6058	2.1544	2.1546	1.3276	0.8916	0.8948	0.5828
Z=74, W	2.9633	2.9377	2.3330	1.7893	1.7291	1.5951	1.3903	1.4426	1.0051
Z=76, Os	0.9695	0.9824	0.3378	0.3870	0.3870	0.1631	0.8365	0.8376	0.1936
Z=77, Ir	1.1953	1.2167	0.4907	1.0527	1.0523	0.6815	0.8080	0.7723	0.4834
Z=78, Pt	1.2981	1.1796	0.6796	0.9525	0.9529	0.2769	1.9930	1.9052	0.6363
Z=79, Au	4.0982	4.1653	4.0390	2.8694	2.8688	2.5380	2.6789	2.6676	2.6763
Z=80, Hg	1.3864	1.4451	1.2002	0.9888	0.9893	1.7549	0.8700	0.8183	0.1880
Z=82, Pb	3.4901	3.5168	3.4494	1.8766	1.8766	1.7813	1.8782	1.8015	1.5379
Z=83, Bi	1.4083	1.4250	1.0420	0.9836	0.9845	0.5276	0.8895	0.8121	0.3280
Z=90, Th	2.2250	2.3246	1.6793	1.6953	1.6942	1.4857	1.2038	1.4656	1.1451
Z=92, U	0.8286	0.7364	0.6517	1.4905	1.4886	1.2810	0.7813	0.4968	0.4237

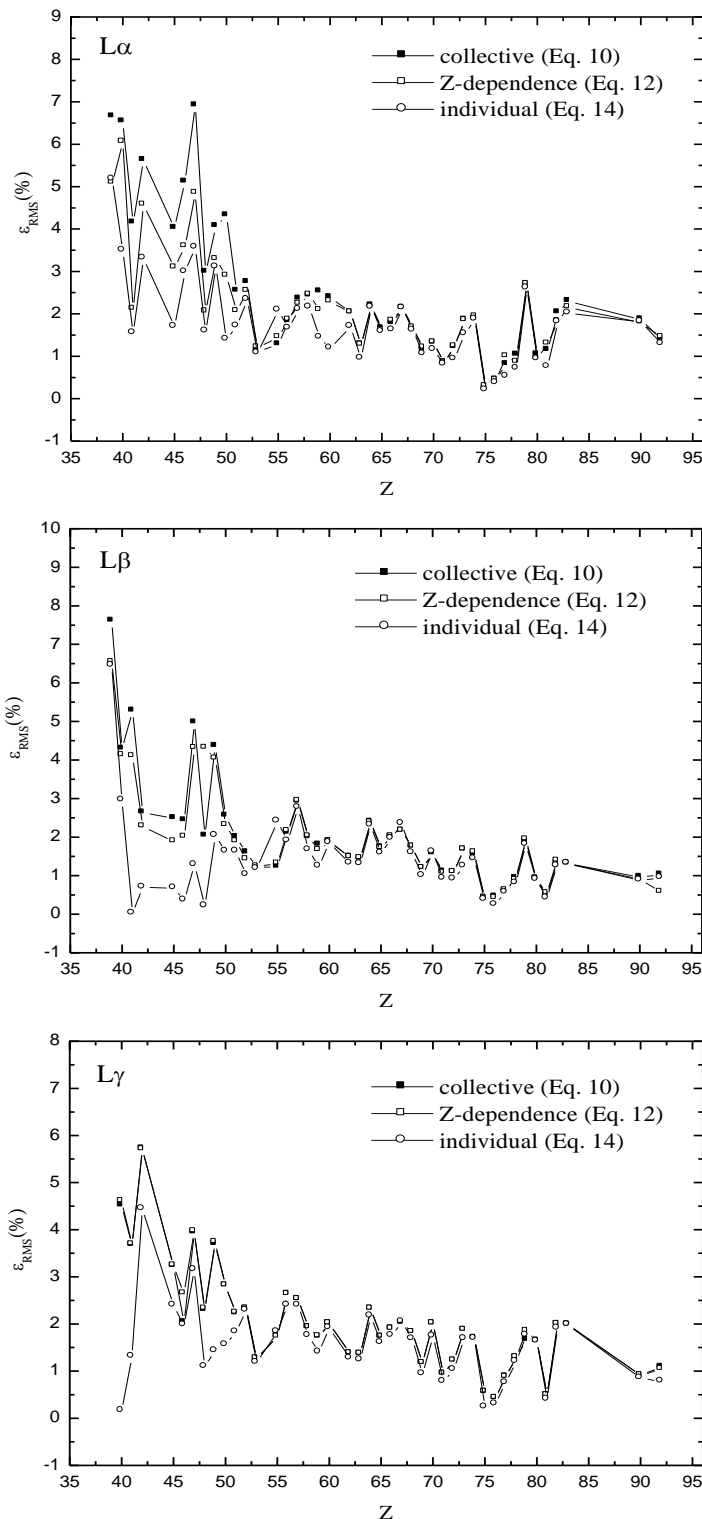


Figure III.13 : Erreur quadratique moyenne (ϵ_{RMS}) pour les trois procédés ; Collectif, Z-dépendance et Individuel des trois raies $L\alpha$, $L\beta$ et $L\gamma$ en fonction du numéro atomique de la cible (Z).

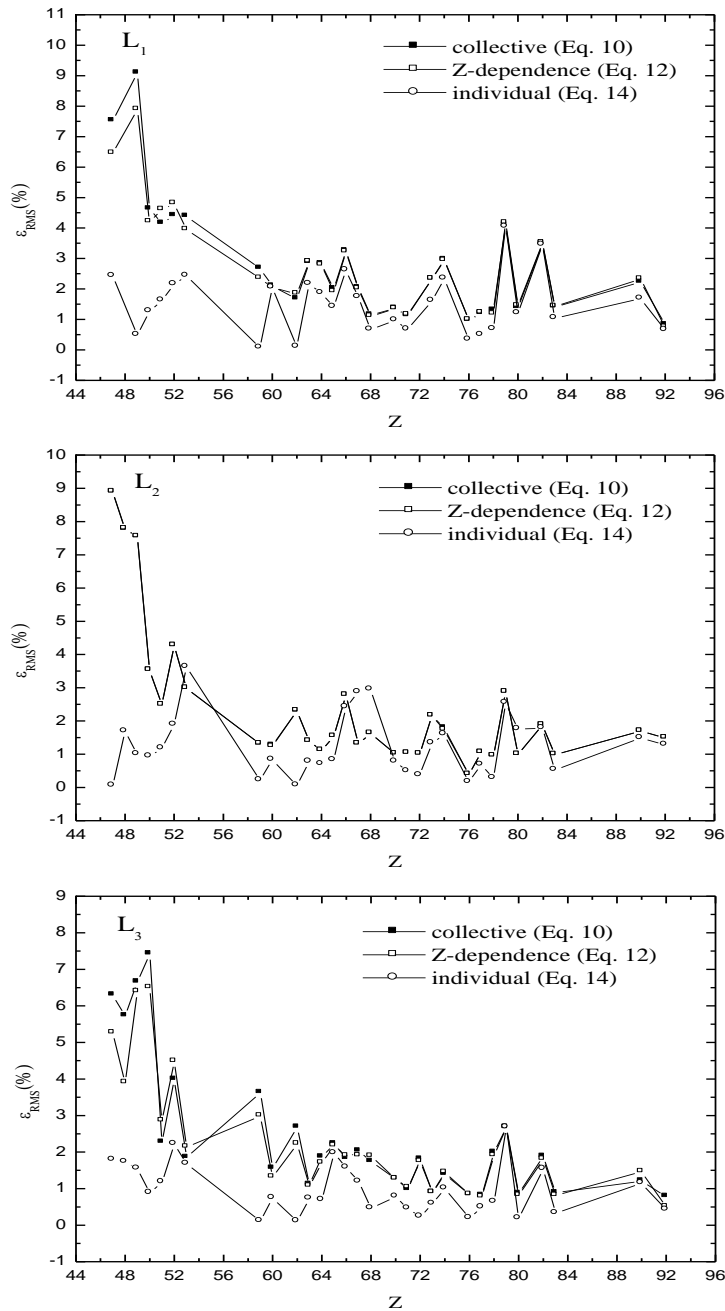


Figure III.14 : Erreur quadratique moyenne (ϵ_{RMS}) pour les trois procédés ; Collectif, Z-dépendance et Individuel des trois lignes L_1 , L_2 et L_3 en fonction du numéro atomique de la cible (Z).

III.3.2 Comparaison

En fin, pour vérifier la fiabilité des sections efficaces déduites, nos valeurs sont présentées sur les figures III.15-20 en utilisant les procédés collectif (σ_C), Z-dépendance ($\sigma_{Z\text{-dependence}}$) et individuel (σ_I) pour les trois raies L_α , L_β et L_γ et les trois lignes L_1 , L_2 et L_3 pour les éléments $_{50}\text{Sn}$, $_{79}\text{Au}$, et $_{92}\text{U}$ comme échantillon de présentation. Les sections efficaces déduites du modèle eCPSSR (σ_{eCPSSR}) et celles déduites des travaux de Reis and Jesus [Re.96] pour L_α , L_β et L_γ et ceux de Sow et al. [So.93] pour L_1 , L_2 et L_3 sont aussi présentées sur les figures correspondantes.

Nos valeurs (σ_{eCPSSR} , σ_C , $\sigma_{Z\text{-dependence}}$, σ_I) sont très proches les unes des autres pour les trois raies L_α , L_β et L_γ et les trois lignes L_1 , L_2 et L_3 sur la gamme entière de l'énergie du proton.

En plus, nous pouvons remarquer que l'accord entre nos valeurs σ_{eCPSSR} , σ_C , $\sigma_{Z\text{-dependence}}$, σ_I et ceux de Sow et al. [So.93] pour L_1 , L_2 et L_3 , est relativement bon. Par contre, nos valeurs s'écartent de plus en plus de celles déduites des travaux de Reis and Jesus [Re.96] pour L_α , L_β et L_γ , où elles sont surestimées. Ces écarts peuvent être expliqués par l'utilisation de paramètres atomiques nécessaires pour la conversion des sections efficaces d'ionisation en sections efficaces de production tels que les facteurs de Coster-Kronig, les rendements de fluorescence, les taux de transition radiative [Kr.79 et Sc.74].

Généralement, les sections efficaces de production L_α , L_β et L_γ et celles d'ionisation L_1 , L_2 et L_3 , diminuent avec le nombre atomique. Ceci peut attribuer à l'énergie de liaison des couches atomiques, qui augmente avec la croissance du numéro atomique et donc fait décroître la probabilité d'interaction entre la cible et le projectile.

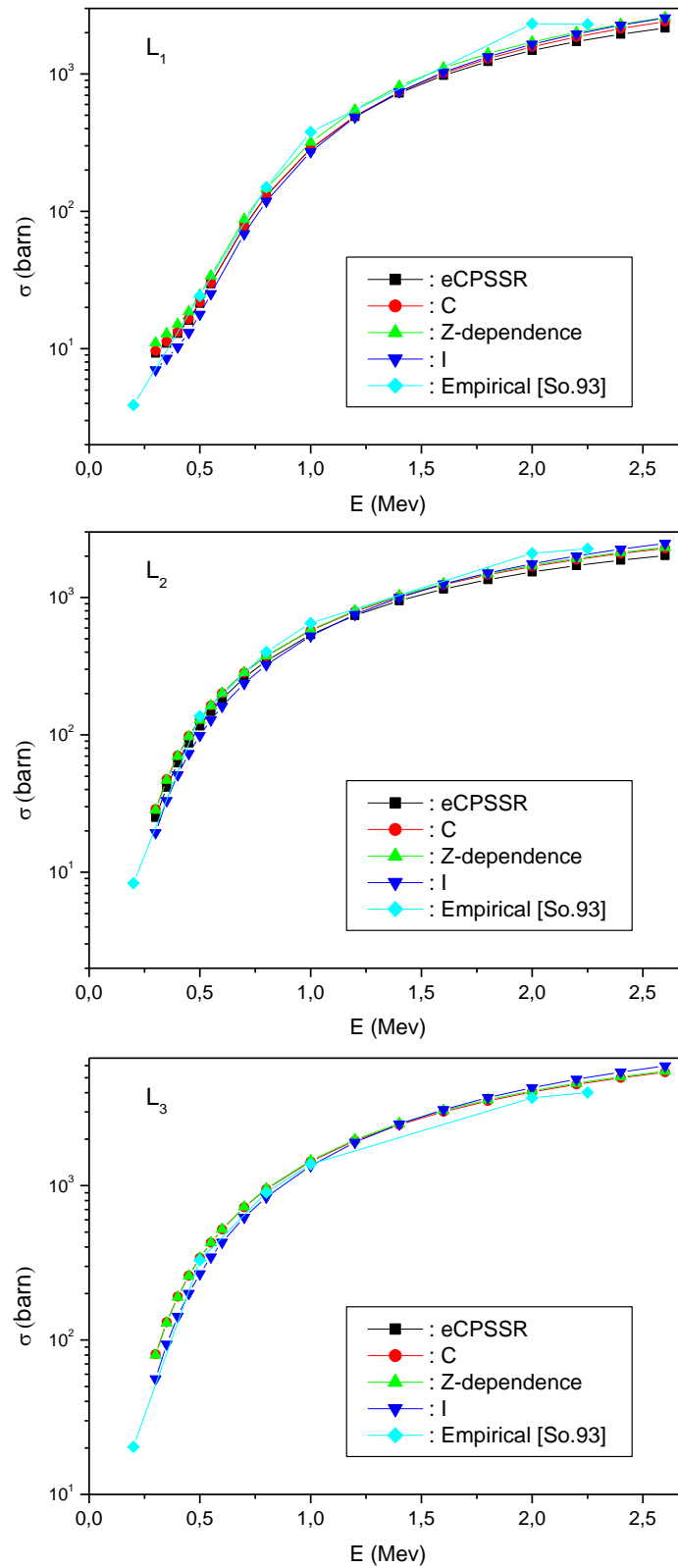


Figure III.15 : Sections efficaces d'ionisation ; σ_{eCPSSR} , σ_{C} , $\sigma_{\text{Z-dependence}}$, σ_{I} et $\sigma_{\text{emp.-[So.93]}}$ pour des couches L_1 , L_2 et L_3 en fonction de l'énergie du proton de l'élément $_{50}\text{Sn}$.

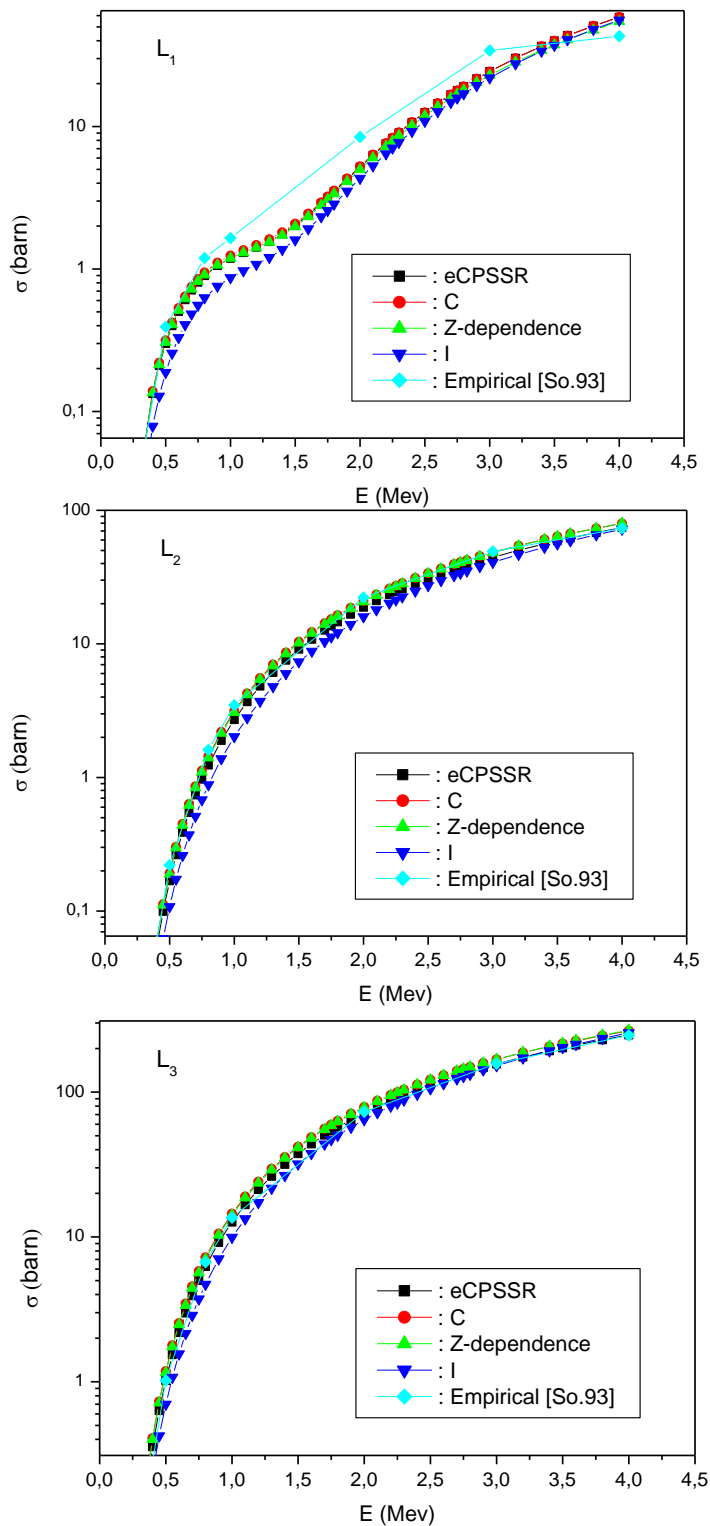


Figure III.16 : Sections efficaces d'ionisation ; σ_{eCPSSR} , σ_{C} , $\sigma_{\text{Z-dependence}}$, σ_{I} et $\sigma_{\text{emp. [So.93]}}$ pour des couches L_1 , L_2 et L_3 en fonction de l'énergie du proton de l'élément ${}_{79}\text{Au}$.

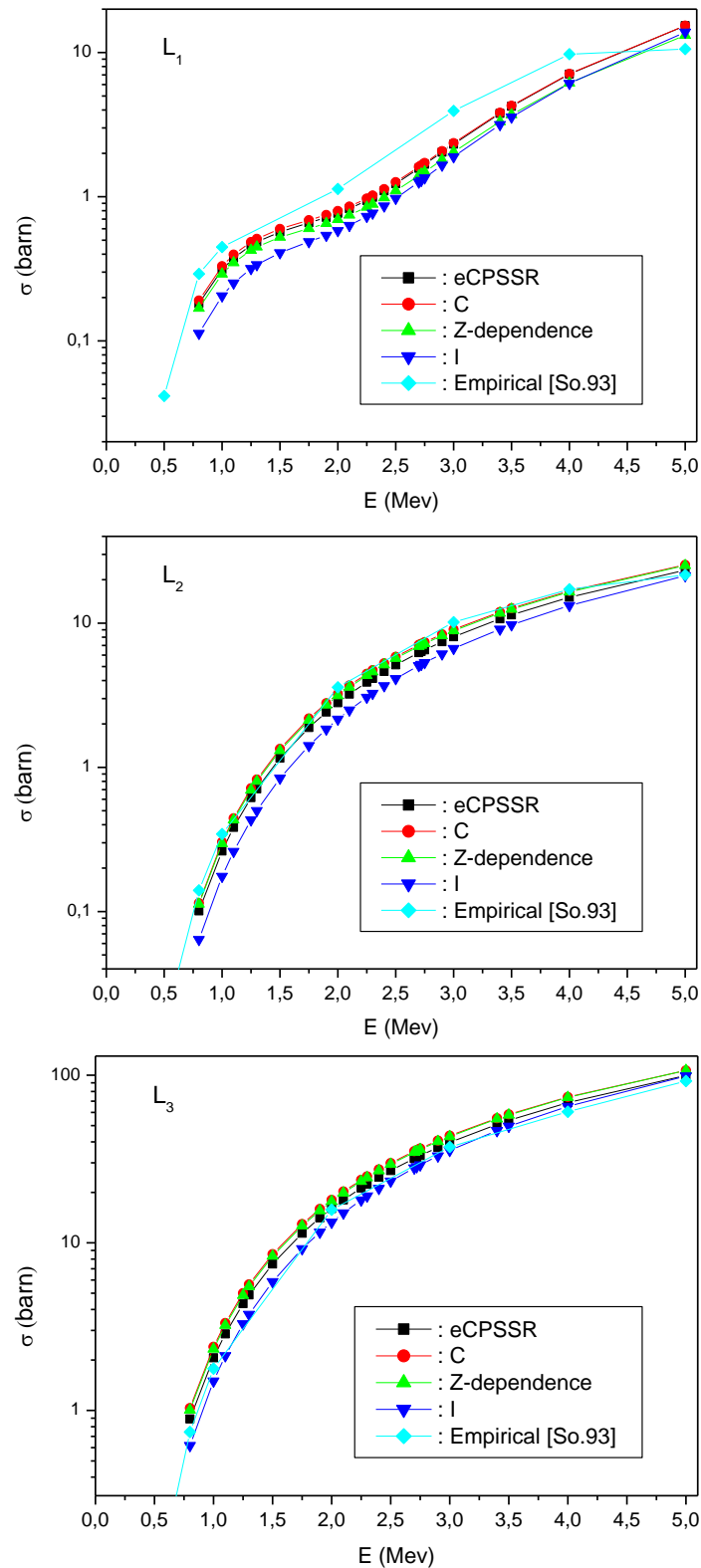


Figure III.17 : Sections efficaces d'ionisation ; σ_{eCPSSR} , σ_{C} , $\sigma_{\text{Z-dependence}}$, σ_{I} et $\sigma_{\text{emp.-[So.93]}}$ pour des couches L_1 , L_2 et L_3 en fonction de l'énergie du proton de l'élément ${}_{92}\text{U}$.

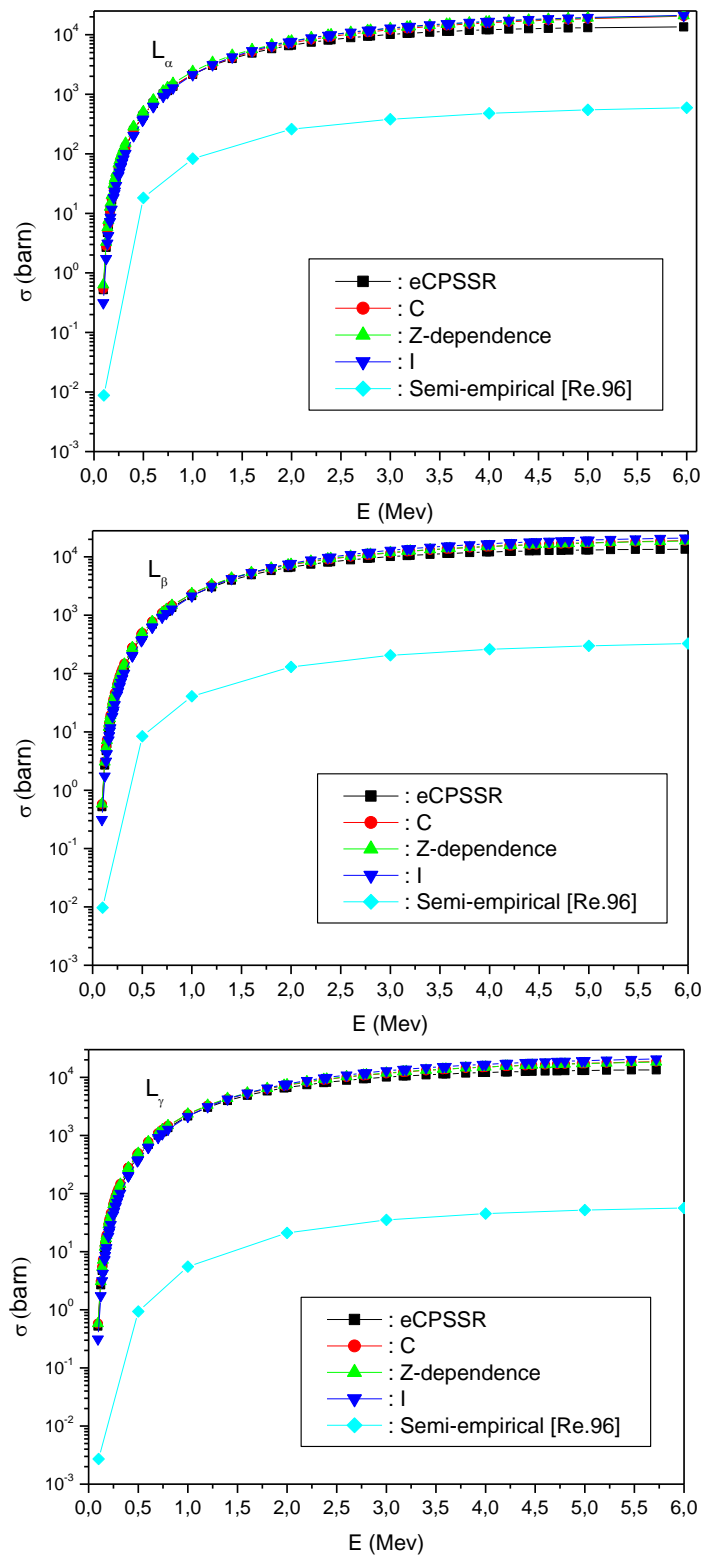


Figure III.18 : Sections efficaces de production; σ_{eCPSSR} , σ_C , $\sigma_{Z\text{-dependence}}$, σ_I et $\sigma_{\text{semi-emp.-[Re.96]}}$ pour des couches L_α , L_β et L_γ en fonction de l'énergie du proton de l'élément ^{50}Sn .

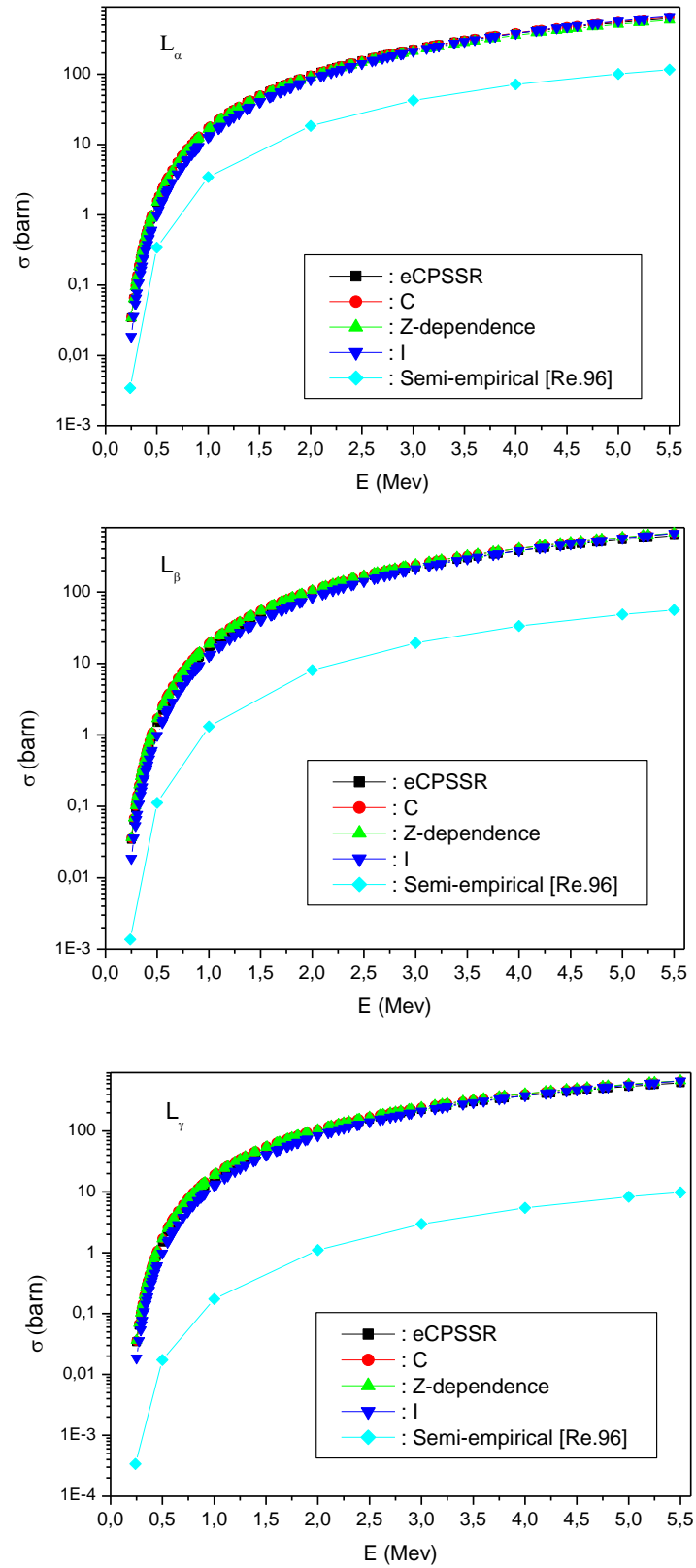


Figure III.19 : Sections efficaces de production ; σ_{eCPSSR} , σ_{C} , $\sigma_{\text{Z-dependence}}$, σ_{I} et $\sigma_{\text{semi-emp.-[Re.96]}}$ pour des couches L_{α} , L_{β} et L_{γ} en fonction de l'énergie du proton de l'élément ^{79}Au .

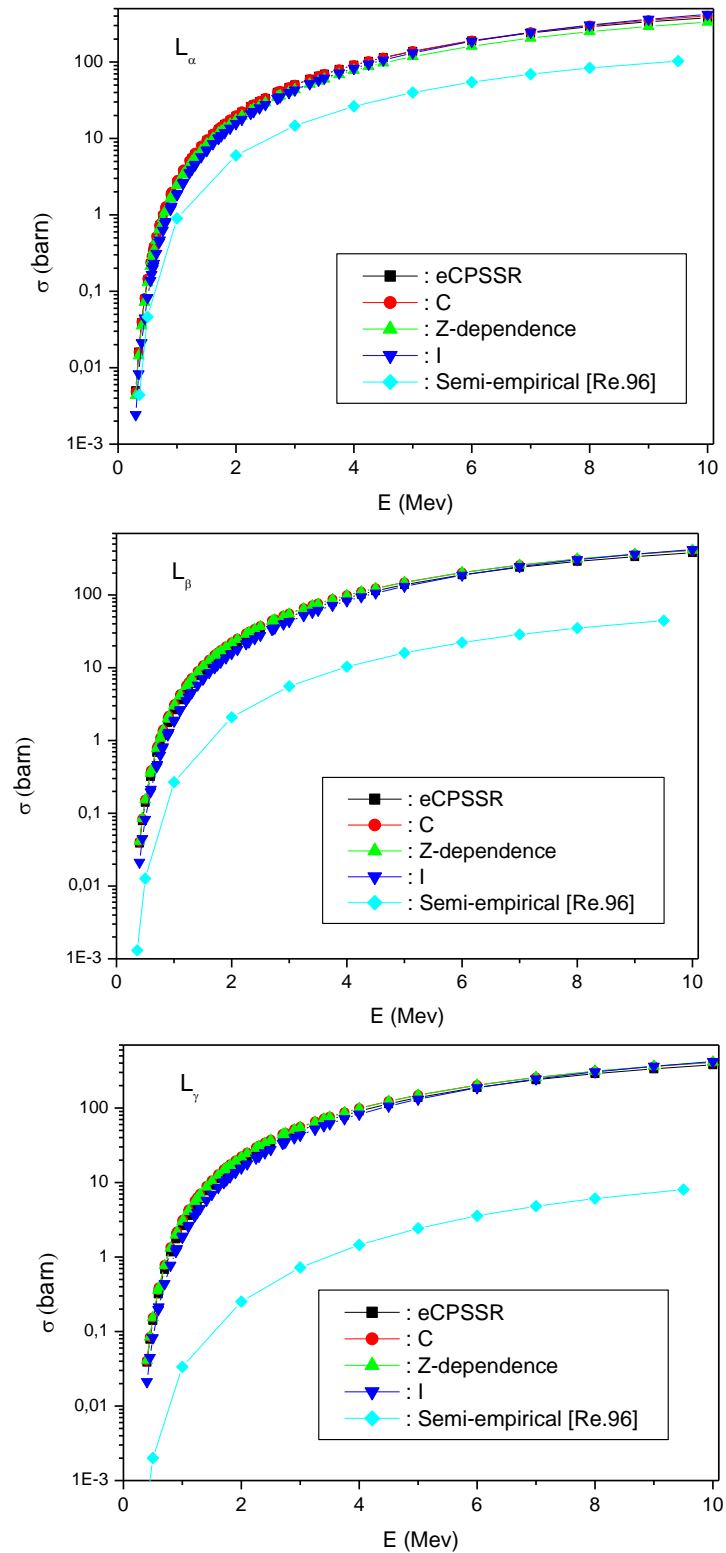


Figure III.20: Sections efficaces de production; σ_{eCPSSR} , σ_C , $\sigma_{Z-dependence}$, σ_I et $\sigma_{semi-emp.-[Re.96]}$ pour des couches L_α , L_β et L_γ en fonction de l'énergie du proton de l'élément ${}_{92}\text{U}$.

Références Bibliographiques

- [Ab.12] A. Abdellatif, A. Kahoul, B. Deghfel, M. Nekkab, D. E. Medjadi. *Radiat. Phys. Chem.*, 81(2012)499.
- [Br.79] W. Brandt, G. Lapicki. *Phys. Rev. A*20(1979) 465.
- [Br.81] W. Brandt, G. Lapicki. *Phys. Rev. A*23(1981) 1717.
- [Ch.73] B. H. Choi. *Phys. Rev. A*7(1973)2056.
- [De.13] B. Deghfel, A. Kahoul, S. Kerai, M. Saadaoui, S. Dechoucha and M. Nekkab. *Radiat. Phys. Chem.*92(2013)32.
- [De.15] B. Deghfel, F. Khalfallah, A. Kahoul, M. Nekkab. *Turk. J. Phys.*39(2015) 302.
- [Ka.05] A. Kahoul, M. Nekkab. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* 234(2005)412.
- [Kh.66] G. S. Khandelwal, E. Merzbacher. *Phys. Rev.* 144(1966) 349.
- [Kr.79] M. O. Krause. *J Phys Chem Ref Data* 8(1979) 307.
- [La.09] G. Lapicki. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 42(2009) 145204.
- [Li.96] Z. Liu and S. J. Cipolla. *Compt. Phys. Commun.* 97(1996) 315.
- [Me.58] E. Merzbacher and H. W. Lewis. *Handbuch Physik* 34 (1958)166.
- [Mi.88] Y. Miyagawa, S. Nakamura, S. Miyagawa. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B*30(1988) 115.
- [Mi.13] J. Miranda, G. Murillo, B. Mendez, J. Lopez-Monroy, J. Aspiazu, P. Villasenor, J. C. Pineda and J. Reyes-Herrera. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B*316(2013)113.
- [Mi.14] J. Miranda and G. Lapicki. *At. Data Nucl. Data Tables*100(2014) 651.
- [Mo.14] H. Mohan, A.K. Jain, M. Kaur, P.S. Singh, S. Sharma. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B*332(2014) 103.
- [Ne.06] M. Nekkab, A. Kahoul. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B*245(2006) 395.
- [Or.94a] I. Orlic. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B*87(1994)285.
- [Or.94b] I. Orlic, C. H. Sow and S. M. Tang. *Int. J. PIXE*4(1994) 217.
- [Pa.82] H. Paul. *Nucl. Instrum. Methods* 192(1982) 11.
- [Re.96] M. A. Reis, A. P. Jesus. *At. Data Nucl. Data Tables* 63(1996)1.
- [Ro.93] L. Rodriguez-Fernandez, J. Miranda, A. Oliver, F. Cruz and J. R. Pegueros. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B*75(1993) 49.
- [Sc.74] J. H. Scofield. *At. Data Nucl. Data Tables* 14(1974) 121.
- [Sm.14] Z. Šmit, G. Lapicki. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*47(2014)055203.

[So.93] C. H. Sow, I. Orlic, K. K. Loh, S. M. Tang. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B*75(1993) 58.

[St.02] D. Strivay, G. Weber. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B*190(2002) 112.

[Zh.13] X. Zhou, Y. Zhao, R. Cheng, Y. Wanga, Y. Lei, X. Wang, Y. Sun. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B*299(2013) 61.

CONCLUSION GENERALE

CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail, nous avons développé un programme numérique, basé sur le modèle *ECPSSR* et en utilisant la méthode de Gauss-Legendre afin d'évaluer le facteur de forme, pour calculer les sections efficaces de production L_α , L_β et L_γ et d'ionisation L_1 , L_2 et L_3 . Par la suite, ce modèle a été amélioré en introduisant les limites exactes dans le calcul du facteur de forme donnant naissance au modèle *eCPSSR*. De plus, Ce programme a été utilisé pour normaliser les données expérimentales et donc pour déduire les sections efficaces semi-empiriques.

Dans la première partie de ce travail, une base de données comporte 991 et 5266 points expérimentaux des sections efficaces totales d'ionisation et de production de rayons X de la couche L , respectivement, a été recueillie de plusieurs sources pour une large gamme d'éléments ($40 \leq Z \leq 92$) par des protons d'énergie allant de 0.02 à 10.0 MeV. Ces données expérimentales sont utilisées pour déduire les sections efficaces empiriques d'ionisation et de production de rayons X.

Les sections efficaces empiriques ainsi trouvées, sont comparées avec d'autres résultats rapportés dans la littérature et présentent un bon compromis. La fiabilité des ces résultats nous a permis de les utiliser pour déduire de nouvelles valeurs du rendement de fluorescence pour une large gamme des éléments du tableau périodique en exploitant la réalité que le rapport section efficace production-ionisation donne une valeur constante affectée à celle du rendement de fluorescence pour chaque élément.

Les valeurs empirique de rendement de fluorescence moyen ainsi trouvées sont interpolées en fonction du numéro atomique. Ce procédé nous a permis de calculer le rendement de fluorescence empirique moyen de la couche L des éléments pour lesquels nous ne disposons pas de sections efficaces d'ionisation ou de production expérimentales. Les résultats obtenus présentent un bon accord avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques.

Dans la deuxième partie de ce travail, une base de données comporte 12821 valeurs pour la section efficace de production de rayons X (4584 pour L_α , 4223 pour L_β et 4043 pour L_γ) et 2236 pour la section efficace d'ionisation (880 pour L_1 , 878 pour L_2 et 878 pour L_3) de la couche L, s'est appuyé sur plusieurs sources pour des cibles avec $39 \leq Z \leq 92$ pour L_α et L_β , $40 \leq Z \leq 92$ pour L_γ et $47 \leq Z \leq 92$ pour L_1 , L_2 et L_3 par des protons d'énergie allant de 0,02 à 10,0 MeV.

Pour obtenir des sections efficaces semi-empirique homogènes et fiables de production et d'ionisation de la couche L et améliorer la qualité d'interpolation, nous avons introduit un critère de dispersion sur les données expérimentales existantes en adoptant les données expérimentales pour lesquelles leur rapport aux sections efficaces calculées dans le cadre du modèle eCPSSR varie dans l'intervalle [0.5-1.5].

Pour déduire la section efficace semi-empirique, nous avons défini tout d'abord la section efficace normalisée comme étant le rapport entre la section efficace expérimentale et celle déduite du modèle ECPSSR dans lequel est inclus les limites exactes d'intégration dans le calcul du facteur de forme donnant naissance au modèle eCPSSR. La section efficace semi-empirique est ainsi défini comme le produit de la section efficace normalisée et sa correspondante calculée dans le modèle eCPSSR.

Pour calculer la section efficace semi-empirique, nous avons adopté trois procédés ; Collectif dans lequel les éléments sont analysés pour chaque groupe ; Z-dépendance dans lequel est la dépendance du numéro atomique est incorporée dans le traitement précédent; Individuel dans lequel l'analyse s'est effectué pour chaque élément séparément.

En outre, la déviation totale des sections efficaces expérimentales avec les sections efficaces semi-empiriques correspondantes, est exprimée en terme de l'erreur quadratique moyenne qui est considérée comme test de la précision des sections efficaces déduites.

Il s'est trouvé que la qualité d'ajustement dépend plus fortement sur la dispersion des données expérimentales que sur le nombre de données utilisées. Généralement, l'erreur quadratique moyenne est diminué avec l'augmentation du nombre atomique de la cible pour les trois raies L_α , L_β et L_γ et les trois lignes L_1 , L_2 et L_3 dans les trois procédés.

En plus, la section efficaces semi-empiriques décrites par le procédé individuel a donné la meilleure représentation des données expérimentales comparativement aux autres procédés (C et Z).

D'autre part, malgré le même nombre de données expérimentales utilisées pour chaque procédé (I, C ou Z), la dispersion des valeurs n'a pas été la même. D'ailleurs, le procédé Z-dépendance a donné meilleure représentation des données expérimentales que le procédé collectif dépourvu de la dépendance du numéro atomique, qui a ajouté une source supplémentaire d'erreurs pour déduire les sections efficaces semi-empiriques. En plus, malgré que les valeurs de l'erreur quadratique moyenne pour le procédé individuel se sont trouvées meilleures que celles du procédé Z -dépendance, ce dernier nous permet de trouver les sections efficaces semi-empiriques pour tous les éléments en utilisant une formule unique.

En fin, les différents procédés illustrés dans le présent manuscrit ont permis de déduire de nouvelles valeurs du rendement moyen de fluorescence et un ensemble de coefficients pour calculer les sections efficaces d'ionisation et de production de rayons X de la couche L des éléments pour lesquels on ne dispose pas de données expérimentales et de couvrir toute la gamme des éléments allant du zirconium à l'uranium. Ces coefficients et valeurs construisent une base de données proposée aux chercheurs travaillant dans le domaine des processus d'ionisation des couches atomiques internes.

LEGENDES DES FIGURES ET DES TABLEAUX

LEGENDES DES FIGURES ET DES TABLEAUX

Tableaux :	P
Tableau I.1 La configuration électronique et le moment angulaire total.	08
Tableau II.1 Valeurs des ε_{ms} , r_0 , r_1 et r pour les sections efficaces de production et d'ionisation.	48
Tableau II.2. Valeurs du rendement de fluorescence moyen $\bar{\omega}_L$ pour $40 \leq Z \leq 92$.	53
Tableau III.1 Nombre de données expérimentales des sections efficaces disponibles (rejetées) d'ionisation, N^I (et N_R^I), et de production de rayons X, N^X (et N_R^X), des éléments avec $47 \leq Z \leq 92$ pour L_1 , L_2 et L_3 , $39 \leq Z \leq 92$ pour L_α et L_β et $40 \leq Z \leq 92$ pour L_γ par des protons d'énergie de 0,02 à 10,0 MeV.	60
Tableau III.2 Coefficients d'ajustement pour déduire les sections efficaces semi-empiriques L_1 , L_2 , L_3 , L_α , L_β et L_γ des éléments avec $47 \leq Z \leq 92$ (pour L_1 , L_2 et L_3), $39 \leq Z \leq 92$ (pour L_α et L_β) et $40 \leq Z \leq 92$ (pour L_γ) en utilisant procédé collectif.	64
Tableau III.3 Coefficients pour déduire les sections efficaces semi-empiriques L_1 , L_2 , L_3 , L_α , L_β et L_γ des éléments avec $47 \leq Z \leq 92$ (pour L_1 , L_2 et L_3), $39 \leq Z \leq 92$ (pour L_α et L_β) et $40 \leq Z \leq 92$ (pour L_γ) en utilisant le procédé Z-dépendance.	67
Tableau III.4. Coefficients pour déduire les sections efficaces semi-empiriques L_α pour les éléments avec $39 \leq Z \leq 92$ en utilisant le procédé individuel.	71
Tableau III.5. Coefficients pour déduire les sections efficaces semi-empiriques L_β pour les éléments avec $39 \leq Z \leq 92$ en utilisant le procédé individuel.	72
Tableau III.6. Coefficients pour déduire les sections efficaces semi-empiriques L_γ pour les éléments avec $40 \leq Z \leq 92$ en utilisant le procédé individuel.	73
Tableau III.7 Coefficients pour déduire les sections efficace semi-empiriques L_1 pour les éléments avec $47 \leq Z \leq 92$ en utilisant le procédé individuel.	74
Tableau III.8. Coefficients pour déduire les sections efficaces semi-empiriques L_2 pour les éléments avec $47 \leq Z \leq 92$ en utilisant le procédé individuel.	75
Tableau III.9. Coefficients pour déduire les sections efficaces semi-empiriques L_3 pour les éléments avec $47 \leq Z \leq 92$ en utilisant le procédé individuel.	76
Tableau III.10 Erreurs quadratiques moyennes ε_{RMS} (%) des sections efficaces semi-empiriques L_α , L_β et L_γ en utilisant différents procédés ; collectif (C), Z-dépendance (Z) individuel (I).	85

Tableau III.11 Erreurs quadratiques moyennes ε_{RMS} (%) des sections efficaces semi-empiriques L_1 , L_2 et L_3 en utilisant différents procédés ; collectif (C), Z-dépendance (Z) individuel (I). 86

Figures :

Figure I.1: Ionisation par effet photoélectrique. 06

Figure I.2: Transitions permises entre les couches électroniques [Zs.07]. 09

Figure I.3: Niveaux d'énergie et quelques transitions électroniques permises. 10

Figure I.4: Excitation et désexcitation d'atome. 12

Figure I.5: Émissions X et Auger [Pi.16] (En vert : états électroniques occupés ; en blanc : états électroniques vides). 14

Figure I.6: Le rendement de fluorescence ω en fonction du numéro atomique Z pour la couche K[Mo.13]. 15

Figure I.7: Transition de Coster-Kronig [St.02]. 19

Figure I.8: Diffusion à une direction 2θ . 21

Figure II.1 : Distribution des valeurs expérimentales de la section efficace totale de production et d'ionisation en fonction du numéro atomique Z des éléments entre Zr (Z=40) et U (Z=92). 41

Figure II.2 : Section efficace expérimentale en fonction de la vitesse réduite des protons ξ_L pour quelques éléments comme échantillon de présentation. Le fit est représenté en trait plein. 43

Figure II.3 : Rapport des sections efficaces empiriques et celles calculées dans le cadre du modèle eCPSSR en fonction d'énergie des protons pour ^{40}Zr , ^{50}Sn , ^{75}Ta , ^{79}Au et ^{92}U . 50

Figure II.4 : La distribution des valeurs de rendement de fluorescence de la couche L en fonction du numéro atomique Z. 52

Figure II.5 : Résultats théoriques et expérimentaux de $\bar{\omega}_L$ sont présentés par rapport à nos valeurs en fonction du numéro atomique Z. 54

Figure III.1: Entrée et sortie des données du programme ECPSSR. 57

Figure III.2 : Distribution des valeurs expérimentales de la section efficace de production L_α , L_β et L_γ et d'ionisation L_1 , L_2 et L_3 en fonction du numéro atomique Z. 62

- Figure III.3 :** Evolution des sections efficaces expérimentales 65
normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ pour L_1 , L_2 et L_3 en fonction de la vitesse relativiste
réduite $\text{Log}_{10}(\xi_{L_i}^R)$ ($i = 1, 2, 3$). Le fit collectif \bar{S}_C est représenté en trait plein.
- Figure III.4 :** Evolution des sections efficaces expérimentales 66
normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ pour L_α , L_β et L_γ en fonction de la vitesse relativiste
réduite $\text{Log}_{10}(\xi_L^R)$. Le fit collectif \bar{S}_C est représenté en trait plein.
- Figure III.5 :** Evolution des sections efficaces de production normalisées 68
 $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ pour L_1 , L_2 et L_3 en fonction de la vitesse
réduite $\text{Log}_{10}(\xi_{L_i}^R)$ ($i = 1, 2, 3$). Le fit est représenté par une surface.
- Figure III.6 :** Evolution des sections efficaces de production 69
normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ pour L_α , L_β et L_γ en fonction de la vitesse relativiste
réduite $\text{Log}_{10}(\xi_L^R)$. Le fit est représenté par une surface.
- Figure III.7 :** Evolution des sections efficaces de production L_α normalisées 77
 $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10}(\xi_L^R)$ pour des éléments qui
possèdent le plus grand nombre de données expérimentales ; $_{58}\text{Ce}$, $_{68}\text{Er}$, $_{70}\text{Yb}$, $_{79}\text{Au}$,
 $_{83}\text{Bi}$ et $_{92}\text{U}$. Les différents ajustements \bar{S}_i sont représentés en trait plein.
- Figure III.8 :** Evolution des sections efficaces de production L_β normalisées 78
 $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10}(\xi_L^R)$ pour des éléments qui
possèdent le plus grand nombre de données expérimentales; $_{58}\text{Ce}$, $_{68}\text{Er}$, $_{70}\text{Yb}$, $_{79}\text{Au}$,
 $_{83}\text{Bi}$ et $_{92}\text{U}$. Les différents ajustements \bar{S}_i sont représentés en trait plein.
- Figure III.9 :** Evolution des sections efficaces de production de rayons X L_γ 79
normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10}(\xi_L^R)$ pour des
éléments qui possèdent le plus grand nombre de données expérimentales; $_{58}\text{Ce}$, $_{68}\text{Er}$,
 $_{70}\text{Yb}$, $_{79}\text{Au}$, $_{83}\text{Bi}$ et $_{92}\text{U}$. Les différents ajustements \bar{S}_i sont représentés en trait plein.
- Figure III.10 :** Evolution des sections efficaces d'ionisation normalisées 80
 $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ pour L_1 en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10}(\xi_{L_1}^R)$ pour des éléments
qui possèdent le plus grand nombre de données expérimentales; $_{92}\text{U}$, $_{79}\text{Au}$, $_{82}\text{Pb}$,
 $_{74}\text{W}$, $_{70}\text{Yb}$ et $_{60}\text{Nd}$. Les différents ajustements \bar{S}_i sont représentés en trait plein.
- Figure III.11 :** Evolution des sections efficaces d'ionisation normalisées 81
 $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ pour L_2 en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10}(\xi_{L_2}^R)$ pour des éléments

qui possèdent le plus grand nombre de données expérimentales; ${}_{92}\text{U}$, ${}_{79}\text{Au}$, ${}_{82}\text{Pb}$, ${}_{74}\text{W}$, ${}_{70}\text{Yb}$ et ${}_{60}\text{Nd}$. Les différents ajustements $\bar{\sigma}_1$ sont représentés en trait plein.

Figure III.12 : Evolution des sections efficaces d'ionisation normalisées $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ pour L_3 en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10}\left(\frac{z^R}{\sigma_{L1}}\right)$ pour des éléments qui possèdent le plus grand nombre de données expérimentales; ${}_{92}\text{U}$, ${}_{79}\text{Au}$, ${}_{82}\text{Pb}$, ${}_{74}\text{W}$, ${}_{70}\text{Yb}$ et ${}_{60}\text{Nd}$. Les différents ajustements $\bar{\sigma}_1$ sont représentés en trait plein.

Figure III.13 : Erreur quadratique moyenne (ε_{RMS}) pour les deux collectives, Z- dépendance et individuelles de trois rayons, L_α L_β et L_γ en fonction du numéro atomique de la cible (Z).

Figure III.14 : Erreur quadratique moyenne (ε_{RMS}) pour les procédures collectives, Z-dépendance et individuelles de trois rayons, L_1 L_2 et L_3 en fonction du numéro atomique de la cible (Z).

Figure III.15 : Sections efficaces d'ionisation ; σ_{eCPSSR} , σ_{C} , $\sigma_{\text{Z-dependence}}$, σ_{I} et $\sigma_{\text{emp.-[So.93]}}$ pour des couches L_1 , L_2 et L_3 en fonction de l'énergie du proton de l'élément ${}_{50}\text{Sn}$.

Figure III.16 : Sections efficaces d'ionisation ; σ_{eCPSSR} , σ_{C} , $\sigma_{\text{Z-dependence}}$, σ_{I} et $\sigma_{\text{emp.-[So.93]}}$ pour des couches L_1 , L_2 et L_3 en fonction de l'énergie du proton de l'élément ${}_{79}\text{Au}$.

Figure III.17 : Sections efficaces d'ionisation ; σ_{eCPSSR} , σ_{C} , $\sigma_{\text{Z-dependence}}$, σ_{I} et $\sigma_{\text{emp.-[So.93]}}$ pour des couches L_1 , L_2 et L_3 en fonction de l'énergie du proton de l'élément ${}_{92}\text{U}$.

Figure III.18 : Sections efficaces d'ionisation ; σ_{eCPSSR} , σ_{C} , $\sigma_{\text{Z-dependence}}$, σ_{I} et $\sigma_{\text{semi-emp.-[Re.96]}}$ pour des couches L_α , L_β et L_γ en fonction de l'énergie du proton de l'élément ${}_{50}\text{Sn}$.

Figure III.19 : Sections efficaces d'ionisation ; σ_{eCPSSR} , σ_{C} , $\sigma_{\text{Z-dependence}}$, σ_{I} et $\sigma_{\text{semi-emp.-[Re.96]}}$ pour des couches L_α , L_β et L_γ en fonction de l'énergie du proton de l'élément ${}_{79}\text{Au}$.

Figure III.20 : Sections efficaces d'ionisation ; σ_{eCPSSR} , σ_{C} , $\sigma_{\text{Z-dependence}}$, σ_{I} et $\sigma_{\text{semi-emp.-[Re.96]}}$ pour des couches L_α , L_β et L_γ en fonction de l'énergie du proton de l'élément ${}_{92}\text{U}$.

*COMMUNICATIONS ET PUBLICATIONS
INTERNATIONALES*

COMMUNICATIONS INTERNATIONALES

1. Empirical L shell fluorescence yields for elements with $40 \leq Z \leq 92$
A. Bendjedi, B. Deghfel, I. Derradj, A. Kahoul, F. Khalfallah, Y. Sahnoune, A. Bentabet and M. Nekkab.
6th International Advances in Applied Physics & Materials Science Congress & Exhibition, İstanbul, Turkey. 01-03 Juin 2016.
2. L-shell ionization cross section within ECPSSR theory with correct exact integration limits.
B. Deghfel, **A. Bendjedi**, I. Derradj, F. Khalfallah, **A. Kahoul** and M. Nekkab
Communication at "The 5th International Congress on Physics of Radiation-Matter Interactions (PIRM-V'2015), May 5-7, 2015 El Jadida, Morocco".
3. Proton induced L-shell X-ray production cross section with updated experimental data.
M. Nekkab, B. Deghfel, I. Derradj, **A. Bendjedi**, F. Khalfallah and A. Kahoul
Communication at "the 5th International Congress on Physics of Radiation-Matter Interactions (PIRM-V2015) El Jadida, Morocco, May 5-7, 2015".
4. Empirical formulae for L1, L2 and L3 subshell cross section by proton impact with updated experimental data.
A. Bendjedi, B. Deghfel, A. Kahoul, I. Derradj, Y. Sahnoune, A. Bentabet
Communication at "The 1st International conference on Radiations and Applications (ICRA2017)", 20-22 November 2017.

PUBLICATIONS INTERNATIONALES

1. L-shell fluorescence yields and total ionization and x-ray production cross sections for elements with $40 \leq Z \leq 92$.
A. Bendjedi, B. Deghfel, A. Kahoul, I. Derradj, F. Khalfallah, Y. Sahnoune, A. Bentabet, M. Nekkab.
Radiation Physics and Chemistry 117, (2015) 128.
URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0969806X15300335>
2. Three dimensional (Z-dependence), collective and individual semi-empirical formulae for L X-ray production and ionization cross section by protons impact within corrected ECPSSR theory and updated experimental data: A review.
B. Deghfel, A. Kahoul, I. Derradj, **A. Bendjedi**, F. Khalfallah, Y. Sahnoune, A. Bentabet and M. Nekkab.
X-Ray Spectrometry (2016)
URL: <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/xrs.2698/abstract>
3. Empirical L Shell Fluorescence Yields for Elements with $40 \leq Z \leq 92$,
A. Bendjedi, B. Deghfel, I. Derradj, A. Kahoul, F. Khalfallah, Y. Sahnoune, A. Bentabet and M. Nekkab
ACTA PHYSICA POLONICA A, Vol. 131 (2017) 13.
URL: <http://przzybwn.icm.edu.pl/APP/PDF/131/a131z1p03.pdf>
4. L-shell cross section within corrected ECPSSR theory and updated experimental data.
I. Derradj, A. Kahoul, B. Deghfel, **A. Bendjedi**, F. Khalfallah, Y. Sahnoune, A. Bentabet, M. Nekkab.
Radiation Physics and Chemistry 121, (2016) 81.
URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0969806X15301493>

1. Empirical L shell fluorescence yields for elements with $40 \leq Z \leq 92$
A. Bendjedi, B. Deghfel, I. Derradj, A. Kahoul, F. Khalfallah, Y. Sahnoune, A. Bentabet and M. Nekkab.
6th International Advances in Applied Physics & Materials Science Congress & Exhibition, İstanbul, Turkey. *01-03 Juin 2016.*



2. L-shell ionization cross section within ECPSSR theory with correct exact integration limits.

B. Deghfel, **A. Bendjedi**, I. Derradj, F. Khalfallah, A. Kahoul and M. Nekkab
Communication at " *The 5th International Congress on Physics of Radiation-Matter Interactions (PIRM-V'2015), May 5-7, 2015 El Jadida, Morocco*".



PIRM-V'2015
Faculty of Sciences, Chouaib Doukkali University.
El Jadida, MOROCCO, May 5-7, 2015.



PI29

**L-SHELL IONIZATION CROSS SECTION WITHIN ECPSSR THEORY WITH
CORRECT EXACT INTEGRATION LIMITS**

B. Deghfel^{1,2,*}, A. Bendjedi^{1,2}, I. Derradj^{1,2}, F. Khalfallah^{3,4}, A. Kahoul^{3,4} and M. Nekkab^{1,5}

¹ Laboratory of materials physics and their applications, Physics Department, Faculty of Sciences,
University of Mohamed Boudiaf, 28000 M'sila, Algeria

² Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Mohamed Boudiaf, 28000 M'sila, Algeria

³ Department of Materials Science, Faculty of Sciences and Technology, Mohamed El Bachir El Ibrahimi University,
Bordj-Bou-Arreidj 34030, Algeria.

⁴ LPMRN laboratory, Department of Materials Science, Faculty of Sciences and Technology, Mohamed El Bachir El
Ibrahimi University, Bordj-Bou-Arreidj 34030, Algeria.

⁵ LESIMS laboratory, Physics Department, Faculty of Sciences, Ferhat Abbas University, Setif, 19000, Algeria.

*Corresponding author: b_deghfel@yahoo.fr

Cross sections for L-shell ionization [1] within ECPSSR model, based on corrections introduced on the plan wave Born approximation [2], are calculated by using exact limits of momentum transfer [3]. Comparison is made between the deduced results and other earlier works [2]. The cross section calculated with such limits differs slightly from the classical ECPSSR calculation in the region of lowest collision while as a good agreement is observed at high energy of projectile.

Keywords: ECPSSR model, Exact integration limits for momentum transfer, Inner-shell ionization cross section.

References:

1. G. S. Khandelwal and E. Merzbacher, *Phys. Rev.* 1966; 144, 349.
2. W. Brandt and G. Lapicki, *Phys. Rev. A* 1981; 23, 1717.
3. Z Smit and G Lapicki, *Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 47 (2014) 055203

The certificate is on a light pink background. At the top, there are four logos: the University of Mohamed Boudiaf, Chouaib Doukkali University, Hassan I University, and the Faculty of Sciences and Techniques in Sétif. Below these is the PIRM V - 2015 logo. The main text reads: "Certificate of Participation. We hereby confirm the participation of DEGHFEL BAHRI at the 5th International Congress on Physics of Radiation-Matter Interactions (PIRM-V'2015), organized jointly by Faculty of Sciences in El Jadida, and Faculty of Sciences and Techniques in Sétif (Hassan 1st University), held on May 5-7, 2015 at Chouaib Doukkali University, El Jadida, Morocco. Kind regards,". At the bottom, there is a signature and a blue circular stamp that says "General Chair of the PIRM-V'2015 Conference Prof. Hamid Merzouk" and "Physique des Interactions Rayonnement Matière EL JADIDA". At the very bottom, contact information is provided: "PIRM-V'2015 Faculty of Sciences, Chouaib Doukkali University, B.P.:20, 24000 El Jadida, Morocco. Tel: (+212) 5 23 34 23 25/(+212) 5 23 34 30 03 Fax: (+212) 5 23 34 21 87 Email: pirmv-2015@ued.ac.ma http://www.creatinov.com/pirmv/".

3. Proton induced L-shell X-ray production cross section with updated experimental data. M. Nekkab, B. Deghfel, I. Derradj, **A. Bendjedi**, F. Khalfallah and A. Kahoul Communication at " the 5th International Congress on Physics of Radiation-Matter Interactions (PIRM-V2015) El Jadida, Morocco, May 5-7, 2015".



PIRM-V'2015
Faculty of Sciences. Chouaib Doukkali University.
El Jadida, MOROCCO, May 5-7, 2015.



PI28

PROTON INDUCED L-SHELL X-RAY PRODUCTION CROSS SECTION WITHIN UPDATED EXPERIMENTAL DATA

M. Nekkab^{1,5,*}, B. Deghfel^{1,2}, I. Derradj^{1,2}, A. Bendjedi^{1,2}, F. Khalfallah^{3,4} and A. Kahoul^{3,4}

¹ Laboratory of materials physics and their applications, Physics Department, Faculty of Sciences, University of Mohamed Boudiaf, 28000 M'sila, Algeria

² Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Mohamed Boudiaf, 28000 M'sila, Algeria

³ Department of Materials Science, Faculty of Sciences and Technology, Mohamed El Bachir El Ibrahimy University, Bordj-Bou-Arredj 34030, Algeria.

⁴ LPMRN laboratory, Department of Materials Science, Faculty of Sciences and Technology, Mohamed El Badir El Ibrahimy University, Bordj-Bou-Arredj 34030, Algeria.

⁵ LESIMS laboratory, Physics Department, Faculty of Sciences, Ferhat Abbas University, Setif, 19000, Algeria.

*Corresponding author: mohammed_nekkab@yahoo.com

Empirical L-shell X-ray production cross sections have been deduced by introducing the dependence of the universal trend of the experimental data on the atomic number of the target [1]. For this effect, a large database of experimental L-shell X-ray production cross-sections by protons energies varying from 0.1 to 10.0 MeV for elements with atomic number $18 \leq Z \leq 92$, is collected from various sources published till 2014 and used [2] to calculate the empirical cross sections. Finally, a comparison is made between the deduced results and other earlier works [3].

Keywords: Empirical cross sections; Updated experimental data; ECPSSR Model.

References:

1. B. Deghfel, A. Kahoul, S. Kerai, M. Saadaoui, S. Dechoucha, M. Nekkab, Radiation Physics and Chemistry 92 (2013) 32–36
2. J. Miranda and G. Lapicki, Atomic Data and Nuclear Data Tables 100 (2014) 651–780.
3. Z. Smit and G. Lapicki, Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 47 (2014) 055203.




Certificate of Participation

We hereby confirm the participation of **MOHAMMED NEKKAB** at the 5th International Congress on Physics of Radiation-Matter Interactions (PIRM-V'2015), organized jointly by Faculty of Sciences in El Jadida, and Faculty of Sciences and Techniques in Settat (Hassan 1st University), held on May 5-7, 2015 at Chouaib Doukkali University, El Jadida, Morocco.

Kind regards,

General Chair of the PIRM-V'2015 Conference
Prof. Hassan El Didi



PIRM-V'2015 Faculty of Sciences, Chouaib Doukkali University, B.P.:20. 24000 El Jadida, Morocco.
Tel: (+212) 5 23 34 23 25/(+212) 5 23 34 30 03 Fax: (+212) 5 23 34 21 87 Email: pirmv-2015@ucd.ac.ma http://www.creatinov.com/pirmv/

4. Empirical formulae for L1, L2 and L3 subshell cross section by proton impact with updated experimental data.

A. Bendjedi, B. Deghfel, A. Kahoul, I. Derradj, Y. Sahnoune, A. Bentabet
Communication at "The 1st International conference on Radiations and Applications (ICRA2017)", 20-22 November 2017.





ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Radiation Physics and Chemistry

journal homepage: www.elsevier.com/locate/radphyschemL shell fluorescence yields and total ionization and x-ray production cross sections for elements with $40 \leq Z \leq 92$ A. Bendjedi^{a,b}, B. Deghfel^{a,b,*}, A. Kahoul^{c,d}, I. Derradj^{a,b}, F. Khalfallah^{c,d}, Y. Sahnoune^{c,d}, A. Bentabet^e, M. Nekkab^{a,f}^a Laboratory of Materials Physics and Their Applications, Physics Department, Faculty of Sciences, University of Mohamed Boudiaf, 28000 M'sila, Algeria^b Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Mohamed Boudiaf, 28000 M'sila, Algeria^c Department of Materials Science, Faculty of Sciences and Technology, Mohamed El Bachir El Ibrahimi University, Bordj-Bou-Arreidj 34030, Algeria^d LPMRN Laboratory, Department of Materials Science, Faculty of Sciences and Technology, University of Mohamed El Bachir El Ibrahimi, Bordj-Bou-Arreidj 34030, Algeria^e Laboratory of Characterization and Valuation of Natural Resources, University of Mohamed El Bachir El Ibrahimi, Bordj-Bou-Arreidj 34030, Algeria^f LESIMS Laboratory, Physics Department, Faculty of Sciences, Ferhat Abbas University, Setif 19000, Algeria

H I G H L I G H T S

- L shell cross sections are deduced from updated experimental data (till 2014).
- Derive a new values of average fluorescence yield from L shell cross sections.
- The obtained results are compared with others works for elements with $40 \leq Z \leq 92$.
- Good agreement was obtained by comparing our result with other works.

A R T I C L E I N F O

Article history:

Received 3 May 2015

Received in revised form

27 July 2015

Accepted 12 August 2015

Available online 14 August 2015

Keywords:

L shell fluorescence yields

Ionization and x-ray production cross sections

Empirical method

Updated experimental data

A B S T R A C T

Existing experimental compilation (till 2014) for a wide range of elements ($40 \leq Z \leq 92$) by proton impact (up to 10.0 MeV) is used to deduce empirical ionization and x-ray production cross sections. The reliability of the obtained cross sections is then exploited to derive new values of L shell average fluorescence yield. This was based on the fact that ratio of ionization to x-ray production cross sections is independent of the excitation energy of proton ranging from 0.02 to 10.0 MeV, for a given element. The obtained values are compared with earlier theoretical and experimental results, where a good agreement is observed for all elements under investigation.

© 2015 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The average fluorescence yield connects the ionization cross-section and the subsequent x-ray production one by filling of vacancies created in the corresponding shell. Accurate values of average fluorescence yield are important in many uses of inner shell ionization and related phenomena such as PIXE analysis that uses the inner shell fluorescence yields to predict or compare

* Corresponding author at: Laboratory of Materials Physics and Their Applications, Physics Department, Faculty of Sciences, University of Mohamed Boudiaf, 28000 M'sila, Algeria. Fax: +213 035666599.

E-mail address: b_deghfel@yahoo.fr (B. Deghfel).

theoretical x-ray cross sections with those measured experimentally (Cohen, 1987; Oz et al., 1999; Hubbel et al., 1994; Küçükönder et al., 2004). The collected database consists of 991 and 5266 experimental points for total ionization and x-ray production cross sections, respectively, from existing compilation (Miranda and Lapicki, 2014) and other experimental data extracted from curves (Miranda et al., 2013; Zhou et al., 2013; Batyrbekov et al., 2014; Bertol et al., 2014; Mohan et al., 2014). Sometimes a remarkable dispersion is pointed out in both theoretical (Cohen, 1987; Mitchell and Barfoot, 1981; Hubbell et al., 1994; Oz et al., 1999) and experimental values (Singh et al., 1990; Simsek et al., 1999; Garg et al., 1992; Ertugrul, 2002; Apaydin and Tirasoglu, 2012). This situation motivates the need to a consistent and reliable new set of

average L shell fluorescence yields. For this purpose, we adopt a criterion of dispersion of the existing experimental data, which are considerably scattered, from their corresponding calculated using the most advanced theoretical model (Smit and Lapicki, 2014).

The present contribution is organized as follows. In the first part, the available experimental compilation, (Miranda et al., 2013; Zhou et al., 2013; Batyrbekov et al., 2014; Bertol et al., 2014; Mohan et al., 2014; Miranda and Lapicki, 2014), for a wide range of elements ($40 \leq Z \leq 92$) by proton impact (0.02 to 10.0 MeV) are used to deduce empirical ionization and x-ray production cross sections. These cross sections are then exploited, in the second part, to derive a new values of average fluorescence yield. Finally, the obtained results are compared with other theoretical and experimental values.

2. Summary of experimental database

Table 1 displays the number of the available experimental points of L shell total ionization and x-ray production cross sections for elements in the range $40 \leq Z \leq 92$ by proton impact (0.02–10.0 MeV) from compilation of Miranda and Lapicki (Miranda and Lapicki, 2014) and other experimental data extracted from curves (Miranda et al., 2013; Zhou et al., 2013; Batyrbekov et al., 2014; Bertol et al., 2014; Mohan et al., 2014). To produce a consistent and reliable set of average L shell fluorescence yields and enhance the quality of interpolation in the next section, we introduce the dispersion criterion, fixed within the interval [0.5–1.5], of the existing experimental data for both ionization and x-ray production cross sections from their corresponding calculated using ECPSSR model (Brandt and Lapicki, 1981; Liu and Cipolla, 1996; Deghfel et al., 2013b) with correct exact integration limits (noted as eCPSSR by Smit and Lapicki, 2014). In such model Smit and Lapicki indicated that it would be wrong to evaluate the exact limits for momentum transfers of integration in calculating form factors (Q_{min} and Q_{max}) by replacing η_s with η_s^R ($\eta_s^R = m_s^R \eta_s$), where η_s^R is the reduced ion energy and m_s^R is the relativistic correction functions (Brandt and Lapicki, 1981). As a solution of this problem, they proposed that the factor m_s^R should multiply

electron rest mass m wherever it occurs. This led to the correct integration limits given by Eq. (14) from reference of Smit and Lapicki (2014) given as

$$Q_{\min}^{\max} = \left(\frac{M}{m_s^R m}\right)^2 \eta_s^R (1 \mp \sqrt{1 - m_s^R m W / \eta_s^R M})^2 \tag{1}$$

where W is the transferred energy from projectile to the ejected electron and Q is the square of the transferred momentum of the projectile.

Also, the eCPSSR model is distinguished from the original ECPSSR theory of Brandt and Lapicki (1981) developed from PWBA theory by including f_s -functions to account for the energy loss (E), the perturbed stationary state (PSS), Coulomb deflection (C) effects of the projectile and relativistic (R) nature of the target's inner-shell. These effects are included in the PWBA cross section (Liu and Cipolla, 1996; Reis and Jesus, 1996) by changing θ_s to $\zeta_s \theta_s$, where ζ_s accounts for the changes in binding energy and multiplying the PWBA cross section by Coulomb deflection factor C_s and m by the relativistic correction functions $m_s^R(\xi_s)$, where ξ_s is the scaled projectile velocity. Then, the rejected experimental data are also incorporated in Table 1. This criterion is applied by several authors (Paul, 1982; Paul and Muhr, 1986; Rodriguez-Fernandez et al., 1993; Orlic, 1994; Deghfel et al., 2013a) and has no much influence on the present calculation of the cross section; 121 (448) data are removed for ionization (x-ray production) cross section, which represents about 12.21% (08.50%) from the total number of experimental data.

3. Total ionization and x-ray production cross sections

Measured L-shell total ionization and x-ray production cross sections, reported from the compilation of Miranda and Lapicki (Miranda and Lapicki, 2014) and other extracted data from curves (Miranda et al., 2013; Zhou et al., 2013; Batyrbekov et al., 2014; Bertol et al., 2014; Mohan et al., 2014), are found to be universal when plotted, in a logarithmic scale, as a function of the scaled velocity ξ_L given as

$$\xi_L = (\xi_{L1} + \xi_{L2} + 2\xi_{L3})/4 \tag{2}$$

where, $\xi_s = 2 v_i / \theta_s v_s$ ($s=L_1, L_2$ and L_3).

This is shown in Fig. 1 for selected elements with $40 \leq Z \leq 92$ by proton impact. Universal character of L-shell for both ionization and x-ray production cross sections allows us to derive an empirical cross section for each elements; the set of the experimental data, following its evolution, is interpolated by a first order exponential decay function as

$$\ln \sigma_{emp} = r_0 + r_1 \exp(-r \ln \xi_M) \tag{3}$$

The result of interpolation is shown in Fig. 1 with a full line for both ionization and x-ray production cross sections.

The root-mean-square error (ϵ_{rms}) is considered as a criterion of the quality of the calculated empirical cross section. This error is expressed as the total deviation of the experimental cross sections (σ_{exp}) from their corresponding empirical (σ_{emp}) values (Deghfel et al., 2013a). The interpolation coefficients (r_0, r_1 and r) with the values of ϵ_{rms} for both x-ray production and ionization empirical cross sections, are listed in Table 2.

From this table, it can be seen that the empirical method, described in the previous section, gives the better representation of the experimental data for both ionization and x-ray production cross sections. Generally, the values of ϵ_{rms} vary within an acceptable ranges: from 0.08% to 3.91% for the first cross section and from 0.05% to 6.70% for the second one. This allows us to use them as reliable cross sections to deduce new values of the average

Table 1
Number of available (rejected) experimental data of ionization, $N^I(N_R^I)$, and x-ray production, $N^X(N_R^X)$, cross sections for elements with atomic number $40 \leq Z \leq 92$ by proton impact.

Z	N^I	N_R^I	N^X	N_R^X	Z	N^I	N_R^I	N^X	N_R^X
40	30	22	75	03	64	27	02	146	12
41	30	19	68	27	65	24	00	115	01
42	-	-	99	12	66	53	00	198	23
44	-	-	09	00	67	30	04	156	15
45	-	-	60	09	68	13	00	148	17
46	-	-	101	34	69	-	-	67	00
47	30	00	250	86	70	29	01	181	30
48	13	01	109	13	71	15	00	62	00
49	29	00	138	06	72	15	00	71	09
50	35	02	191	32	73	37	17	185	05
51	16	00	75	02	74	47	00	173	08
52	16	00	112	06	75	-	-	19	00
53	26	00	82	01	76	06	00	26	00
54	-	-	08	04	77	20	00	57	00
55	-	-	79	01	78	18	00	113	00
56	-	-	103	05	79	176	32	445	14
57	-	-	166	11	80	15	00	58	00
58	04	00	130	01	81	-	-	33	01
59	07	00	123	06	82	59	01	277	01
60	17	00	179	11	83	58	19	200	06
62	12	00	126	22	90	33	00	61	02
63	17	01	93	07	92	34	00	99	05

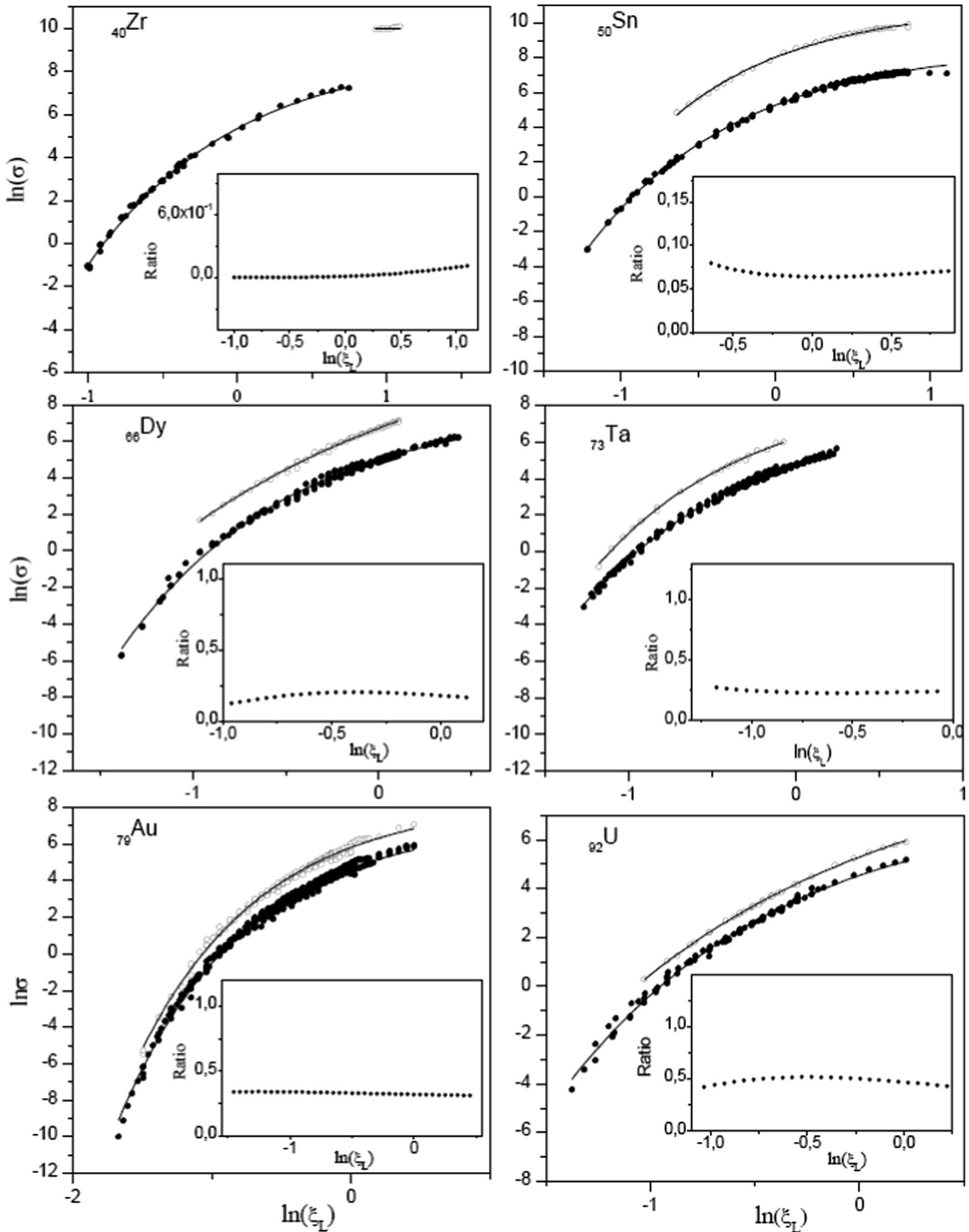


Fig. 1. Ionization (open circles) and x-ray production (dark points) cross sections as a function of the scaled velocity ξ_L , in a logarithmic scale, for selected elements. The ratio between them are also included.

fluorescence yield of the L-shell in the next section. In addition, a comparison has been made (presented by a ratio to eCPSSR model in Fig. 2) between our empirical values of ionization and x-ray

production cross sections and other semi-empirical results tabulated by Reis, and Jesus (1996) and empirical works deduced from fitting coefficients (Sow et al., 1993) as a function of the protons

Table 2Values of r_0 , r_1 , r and ϵ_{rms} for both x-ray production and ionization cross sections.

x-ray production									
Z	r_0	r_1	r	ϵ_{rms}	Z	r_0	r_1	r	ϵ_{rms}
40	9.02081	-3.66585	0.99487	3.45	64	8.14491	-3.1032	0.9462	2.88
41	8.12921	-0.94431	0.94775	1.72	65	8.48955	-3.472	1.03673	1.95
42	8.08279	-3.00797	0.91544	4.87	66	8.00676	-3.01228	0.93021	2.34
44	105555.24	-105550.08	23972.7	0.37	67	8.14514	-3.10271	0.95461	2.41
45	8.88927	-3.69029	1.04954	3.61	68	7.93495	-2.93433	0.92957	1.92
46	10.01608	-5.12278	1.41753	6.70	69	7.65246	-2.6421	0.87131	1.60
47	8.87953	-3.68271	1.04256	5.82	70	7.70602	-2.87152	0.9364	2.81
48	9.15261	-3.99187	1.07036	4.74	71	7.99634	-3.07118	0.97312	0.85
49	8.9351	-3.71151	1.03506	3.70	72	7.48343	-2.61877	0.89487	1.00
50	8.70562	-3.43526	0.9945	2.10	73	7.99602	-3.2154	1.04259	1.44
51	9.57593	-4.41725	1.23571	1.92	74	7.85676	-2.98585	0.97918	1.63
52	9.09436	-3.92709	1.08695	2.71	75	7.99218	-3.15228	1.00727	0.23
53	8.68467	-3.53129	0.99067	1.54	76	7.95159	-3.17153	1.02337	0.46
54	4.97191	0.78676	-0.57815	0.05	77	9.68979	-4.71231	1.31337	0.57
55	8.41844	-3.3258	0.97127	2.95	78	8.86982	-4.12143	1.22898	0.83
56	9.2297	-4.20771	1.20205	1.92	79	7.18089	-2.50234	0.8929	3.15
57	10.42211	-5.53335	1.51242	3.78	80	8.10928	-3.44057	1.09707	0.89
58	8.19577	-3.10984	0.93414	2.19	81	9.28312	-4.31197	1.2122	0.69
59	8.60761	-3.46959	1.02591	1.50	82	7.91838	-3.231	1.03653	2.19
60	8.56443	-3.50094	1.02185	2.25	83	7.04683	-2.49919	0.91112	1.79
62	8.75538	-3.75095	1.09515	1.55	90	7.20063	-2.70441	0.97536	0.91
63	8.78888	-3.70315	1.06287	1.23	92	7.6067	-3.0655	1.04792	0.96
Ionization									
40	10.09	-0.07322	1.0683 · 10 ⁻⁵	3.10	67	9.94163	-3.30506	1.02135	2.03
41	10.37844	-3.86845	0.4081	0.60	68	7.6815	-1.65295	0.71336	0.75
47	11.01748	-2.64373	0.78201	1.22	70	8.86412	-2.55233	0.89277	2.15
48	12.15725	-3.97066	1.0634	1.12	71	7.89291	-1.92792	0.78109	0.52
49	10.78228	-2.62572	0.76433	2.23	72	12.14821	-5.71356	1.59867	0.28
50	11.00119	-2.97715	0.85337	1.76	73	8.83628	-2.63703	0.91962	0.85
51	13.92258	-6.33173	1.7217	0.92	74	7.396	-1.46498	0.67331	3.90
52	21.76221	-14.36475	3.61382	1.84	76	3.21586	-0.08937	0.31021	0.28
53	11.60219	-4.04011	1.1342	1.39	77	9.37225	-3.38875	1.08793	0.26
58	11.37961	-4.05205	1.98459	0.10	78	13.42445	-7.38921	1.84268	0.43
59	9.82464	-2.57458	0.87303	0.08	79	8.41193	-2.59343	0.90628	3.91
60	14.1901	-7.12786	1.88901	0.54	80	9.71589	-3.87392	1.19259	0.31
62	9.90274	-2.80067	0.91131	0.78	82	8.38695	-2.71599	0.93682	1.55
63	17.09922	-10.25302	2.60789	0.58	83	7.94707	-2.40889	0.8879	1.48
64	8.26489	-1.6735	0.71749	3.14	90	11.53568	-5.94973	1.63783	0.94
65	8.15031	-1.88242	0.77728	1.56	92	9.75192	-4.45313	1.36444	0.31
66	12.62418	-5.90625	1.54466	1.55					

energy for selected elements. Our results for empirical ionization cross section agree with eCPSSR calculations and with the values of Sow et al. (Sow et al., 1993) except for ${}_{40}\text{Zr}$ where a some discrepancy is observed. For empirical x-ray production cross section the agreement is less satisfactory at low energy of proton between our results and those of Reis and Jesus (Reis and Jesus, 1996). This is may be attributed to the non inclusion of the correct exact integration limits for momentum transfer on the ECPSSR theory in the work of Reis and Jesus.

4. Fluorescence yields of the L-shell

The total L-shell ionization cross section is related to total x-ray production one through $\sigma_L^x = \bar{\omega}_L \sigma_L^I$, where $\bar{\omega}_L$ is the average fluorescence yield of the L-shell. This formula can be exploited to deduce empirical values of the average fluorescence yield for elements with $40 \leq Z \leq 92$ as follows:

First, σ_{Emp}^x and σ_{Emp}^I are plotted together as a function of the scaled velocity ξ_L (see Fig. 1), where σ_{Emp}^x is the total empirical x-ray production cross section and σ_{Emp}^I is the total empirical ionization one, both deduced from the previous section (Eq. (3) with the interpolation parameters summarized in Table 2).

Second, the ratio $\sigma_{Emp}^x / \sigma_{Emp}^I$ is depicted in the same figure (inner figure). It can be seen that this ratio presents, approximately, a constant value for each element over the whole range of the scaled velocity ξ_L . This situation makes the ratio $\sigma_{Emp}^x / \sigma_{Emp}^I$ to be independent of the scaled velocity ξ_L and allows us to take the mean value of this ratio for each element.

Third, the previous result can be served to calculate the empirical average fluorescence yield. This latter is affected to the corresponding mean value of the ratio for each element.

Then, the values of the empirical average fluorescence yield $\bar{\omega}_L$ deduced from the procedure described in the three previous steps, are interpolated (Fig. 3) as a function of the atomic number (Khalfallah, et al., 2015), using the famous formula

$$(\bar{\omega}_L / (1 - \bar{\omega}_L))^{1/4} = a + bZ \quad (4)$$

with $a = -0.02177$ and $b = 0.01073$ are deduced from the present study. Since this evolution is a smooth function of atomic number, the previous interpolation is permitted and allows us to deduce the average fluorescence yield of elements for which we do not dispose of the experimental ionization or x-ray production cross sections and to cover the whole range of elements from zirconium to uranium.

Finally, the empirical average fluorescence yield are presented in Table 3 together with other theoretical (Cohen, 1987; Mitchell and Barfoot, 1981; Hubbell et al., 1994; Oz et al., 1999) and

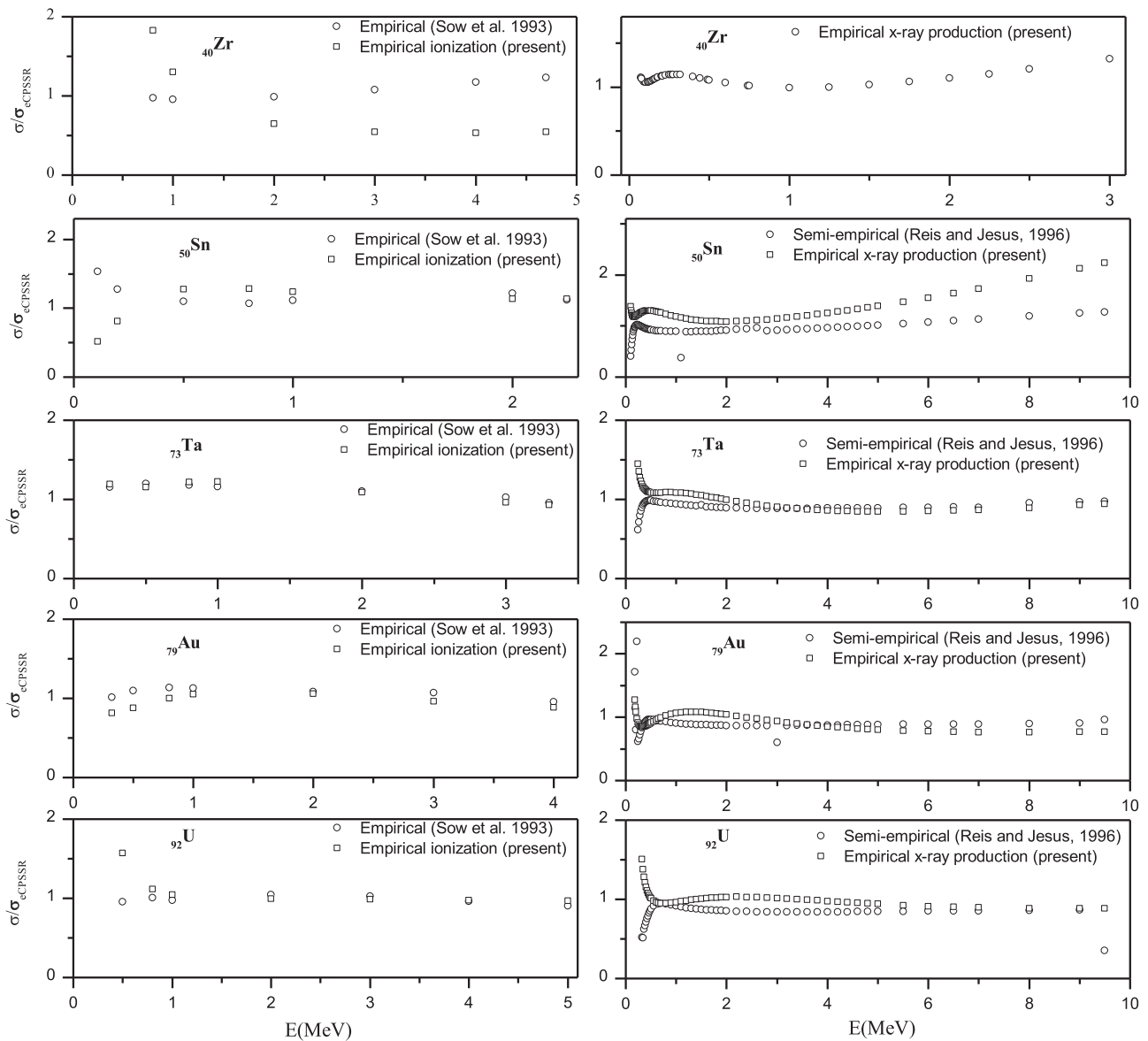


Fig. 2. Ratio to eCPSSR model of our empirical values of ionization (left side) and x-ray production (right side) cross section and other semi-empirical and empirical works as a function of the protons energy for selected elements.

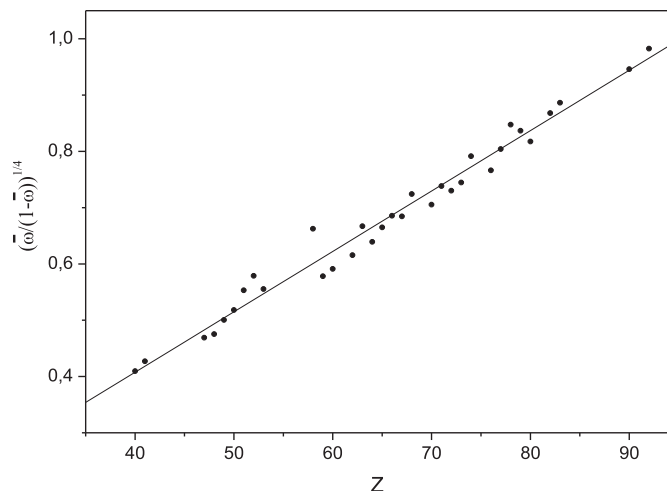


Fig. 3. Empirical values of the average fluorescence yield of elements with $40 \leq Z \leq 92$. Line presents the linear evolution of the distribution of these values.

experimental values (Singh et al., 1990; Simsek et al., 1999; Garg et al., 1992; Ertugrul 2002; Apaydin and Tirasoglu, 2012).

To well compare our empirical average fluorescence yields and other theoretical and experimental values, ratio to the present calculation of all values of $\bar{\omega}_L$ are plotted in Fig. 4 as a function of atomic number. The comparison enables us to say that our results vary within the experimental values of Ertugrul (2002) and Apaydin and Tirasoglu (2012) whereas a slight overestimation is observed for those of Singh, et al. (1990), Simsek, et al. (1999) and Garg et al. (1992) where a remarkable dispersion of the experimental data is observed for low atomic number region. In addition, our values of $\bar{\omega}_L$ differ by only a few percent from those of Cohen (1987) and Hubbell et al. (1994) over the whole range of atomic number. Generally, the results deduced from this procedure present a good compromise between theory and experiment.

5. Conclusion

We have calculated the average L shell fluorescence yields ($\bar{\omega}_L$) for a wide range of target atoms from Zirconium ($_{40}\text{Zr}$) to Uranium

Table 3Empirical (present work), theoretical and experimental average fluorescence yield $\bar{\omega}_L$ for elements with $40 \leq Z \leq 92$.

Z	Present	Cohen (1987)	Mitchell and Barfoot (1981)	Hubbell, et al. (1994)-fit	Hubbell et al. (1994)	Oz et al., (1999)	Singh et al. (1990)-exp	Other experiments
40	0.0268	0.0313	0.033	0.0310	0.0319	0.031	–	0.026 ^a
41	0.0297	0.0334	0.036	0.0342	0.0335	0.035	–	0.037 ^b 0.032 ^a
42	0.0327	0.0374	0.040	0.0376	0.0363	0.038	–	0.038 ^b 0.035 ^a
43	0.0360	0.0406	0.043	–	–	0.042	–	–
44	0.0395	0.0438	0.047	–	–	0.046	–	–
45	0.0432	0.0471	0.052	0.0499	0.0459	0.049	–	0.051 ^b –
46	0.0472	0.0503	0.056	0.0547	0.0495	0.053	–	0.054 ^b 0.049 ^a
47	0.0514	0.0544	0.061	0.0599	0.0534	0.058	–	0.057 ^b 0.051 ^a
48	0.0559	0.0584	0.066	0.0656	0.0575	0.063	–	0.066 ^b 0.056 ^a
49	0.0606	0.0629	0.071	0.0717	0.0618	0.068	–	0.075 ^b 0.065 ^a
50	0.0656	0.0673	0.077	0.0782	0.0665	0.073	–	0.079 ^b 0.069 ^a
51	0.0708	0.0724	0.082	0.0852	0.0714	0.079	–	0.083 ^b 0.075 ^a
52	0.0763	0.0775	0.089	0.0934	0.0765	0.081	–	0.093 ^b 0.078 ^a
53	0.0821	0.0828	0.096	0.096	0.082	0.091	–	– 0.086 ^a
54	0.0882	0.0882	0.102	–	–	0.097	–	–
55	0.0945	0.102	0.110	–	–	0.104	–	– 0.090 ^a
56	0.1011	0.101	0.117	0.110	0.100	0.111	0.110	0.112 ^c –
57	0.1080	0.108	0.125	0.116	0.107	0.119	0.118	0.135 ^c –
58	0.1151	0.115	0.133	0.123	0.114	0.127	0.121	0.141 ^c –
59	0.1225	0.123	0.141	0.130	0.121	0.127	0.132	0.145 ^c –
60	0.1302	0.130	0.150	0.138	0.129	0.140	0.143	0.161 ^c –
61	0.1382	0.138	0.158	–	–	0.156	–	–
62	0.1464	0.145	0.168	0.155	0.145	0.162	0.161	0.174 ^c –
63	0.1548	0.154	0.177	0.165	0.153	0.171	0.164	–
64	0.1635	0.162	0.187	0.174	0.163	0.181	0.184	0.170 ^c –
65	0.1725	0.172	0.197	0.184	0.172	0.191	0.192	–
66	0.1817	0.181	0.207	0.194	0.182	0.201	0.199	–
67	0.1911	0.191	0.217	0.205	0.192	0.212	0.217	–
68	0.2007	0.201	0.228	0.215	0.202	0.222	0.223	–
69	0.2105	0.210	0.239	0.226	0.212	0.232	0.228	–
70	0.2205	0.220	0.250	0.236	0.223	0.243	0.239	–
71	0.2307	0.231	0.261	0.247	0.234	0.255	0.246	–
72	0.2411	0.242	0.272	0.258	0.245	0.266	0.255	–
73	0.2517	0.255	0.284	0.269	0.257	0.277	0.274	–
74	0.2624	0.267	0.296	0.280	0.269	0.289	0.285	–
75	0.2732	0.280	0.308	0.292	0.281	0.296	0.286	0.235 ^d –
76	0.2841	0.293	0.320	–	–	0.309	–	0.252 ^d –
77	0.2952	0.305	0.332	0.314	0.305	0.320	0.326	0.255 ^d –
78	0.3063	0.318	0.344	0.326	0.318	0.331	0.328	0.258 ^d –
79	0.3175	0.332	0.356	0.337	0.331	0.342	0.330	0.272 ^d –
80	0.3288	0.345	0.369	0.348	0.343	0.354	–	0.292 ^d –
81	0.3402	0.359	0.381	0.360	0.356	0.365	0.354	0.314 ^d –
82	0.3516	0.372	0.393	0.371	0.369	0.377	0.374	0.345 ^d –
83	0.3630	0.385	0.406	0.383	0.382	0.389	0.374	0.369 ^d –
84	0.3744	0.398	–	–	–	0.401	–	–
85	0.3858	0.411	–	–	–	0.414	–	–
86	0.3972	0.423	–	–	–	0.424	–	–
87	0.4086	0.436	–	–	–	0.437	–	–
88	0.4200	0.448	–	–	–	0.448	–	–
89	0.4313	0.461	–	–	–	0.460	–	–
90	0.4426	0.475	–	0.468	0.474	0.472	0.473	0.451 ^d –
91	0.4537	0.487	–	–	–	0.482	–	–
92	0.4648	0.499	0.515	0.495	0.499	0.493	0.489	0.481 ^d –

^a Ertugrul (2002).^b Garg et al. (1992).^c Simsek et al. (1999).^d Apaydin et al. (2012).

(g_2U). This was based on the empirical ionization and x-ray production cross sections by proton impact, where the ratio ionization to production of the cross section is found to be independent of the excitation energy (ranging from 0.02 to 10.0 MeV) for a given element. A smooth function is used to interpolate the evolution of the average fluorescence yield as a function of the atomic number. This procedure allows us to deduce new values of average fluorescence yield of elements for which we do not dispose of the experimental data and to cover the whole range of elements from zirconium to uranium. A set of coefficients, for both ionization and x-ray

production cross sections and average L-shell fluorescence yields, were proposed, in the present manuscript, to workers in the field of atomic inner-shell ionization processes. Our values are compared with those tabulated by earlier workers and with other theoretical calculations. Generally, the values of the root-mean-square error for both ionization and x-ray production cross sections vary within an acceptable range which allows to use them as reliable cross sections to derive a new values of average L shell fluorescence yield. The obtained results for this latter present a good compromise between experiment and theoretical calculations.

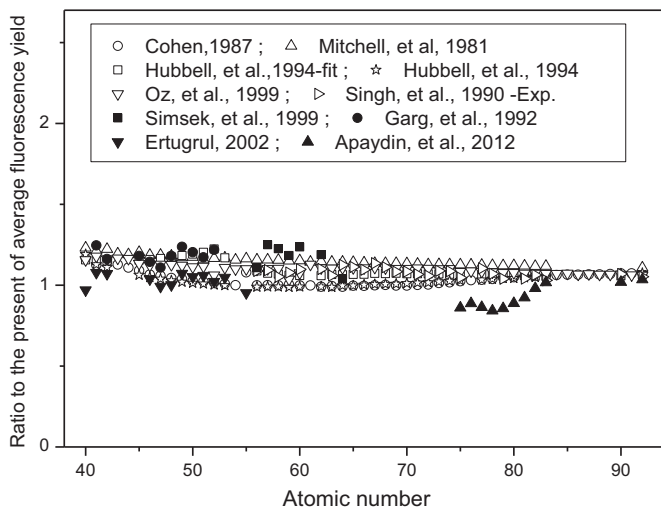


Fig. 4. Ratio to the present calculation of theoretical and experimental values of ω_L as a function of atomic number.

References

- Apaydin, G., Tirasoglu, E., 2012. Calculation of vacancy transfer probabilities from K to L shell using the x-ray fluorescence parameters. *Radiat. Phys. Chem.* 81, 1593.
- Batyrbekov, E., Gorlachev, I., Ivanov, I., Platov, A., 2014. K-, L- and M-shell x-ray production cross sections by 1–1.3 MeV protons. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 325, 84–88.
- Bertol, A.P.L., Trincavelli, J., Hinrichs, R., Vasconcellos, M.A.Z., 2014. L-shell x-ray production cross sections induced by protons and alpha-particles in the 0.7–2.0 MeV/amu range for Ru and Ag. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 318, 19–22.
- Brandt, W., Lapicki, G., 1981. Energy-loss effect in inner-shell Coulomb ionization by heavy charged particles. *Phys. Rev. A* 23, 1717.
- Cohen, D.D., 1987. Average L shell fluorescence yield. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 22, 55.
- Deghfel, B., Kahoul, A., Heraiz, S., Belouadah, N., Nekkab, M., 2013a. M x-ray production cross sections of heavy elements for low and high proton energy. *Radiat. Phys. Chem.* 85, 89.
- Deghfel, B., Kahoul, A., Kerai, S., Saadaoui, M., Dechoucha, S., Nekkab, M., 2013b. Z-dependence and collective analysis of M x-ray production cross sections for a wide range of elements ($60 \leq Z \leq 90$) by proton impact. *Radiat. Phys. Chem.* 92, 32.
- Ertugrul, M., 2002. Measurement of L x-ray Production Cross-sections at 5.96 keV and Average L and M Shell Fluorescence Yields of Elements in the Atomic Number Range $40 \leq Z \leq 55$. *Phys. Scr.* 65, 323.
- Garg, R.R., Puri, S., Singh, S., Mehta, D., Shahi, J.S., Garg, M.L., Singh, N., Mangal, P.C., Trehan, P.N., 1992. Measurements of L x-ray fluorescence cross sections and yields for elements in the atomic range $41 \leq Z \leq 52$ at 5.96 keV. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 72, 147.
- Hubbel, J.H., Trehan, P.N., Singh, N., Chand, B., Mehta, D., Garg, M.L., Garg, R.R., Singh, S., Puri, S., 1994. A review, bibliography, and tabulation of K, L, and higher atomic shell x-ray fluorescence yields. *J. Phys. Chem. Ref. Data* 23, 339.
- Khalfallah, F., Deghfel, B., Kahoul, A., Aylikci, V., Küp Aylikci, N., Nekkab, M., 2015. Ytterbium to thorium semi-empirical average M-shell fluorescence yields. *Radiat. Phys. Chem.* 112, 71.
- Küçükönder, A., Durdu, B.G., Söğüt, Ö., Büyükkasap, E., 2004. L x-ray production cross sections, average L shell fluorescence yield and intensity ratios in heavy elements. *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 260, 89.
- Liu, Z., Cipolla, S.J., 1996. ISICS: A program for calculating K-, L- and M-shell cross sections from ECPSSR theory using a personal computer. *Comp. Phys. Commun.* 97, 315.
- Miranda, J., Murillo, G., Mendez, B., Lopez-Monroy, J., Aspiazua, J., Villasenor, P., Pineda, J.C., Reyes-Herrera, J., 2013. Measurement of L x-ray production cross sections by impact of proton beams on Hf, Ir, and Tl. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 316, 113.
- Miranda, J., Lapicki, G., 2014. Experimental cross sections for L-shell x-ray production and ionization by protons. *Atomic Data Nucl. Data Tables* 100, 651.
- Mitchell, I.V., Barfoot, K., 1981. Particle induced x-ray emission analysis application to analytical problems. *Nucl. Sci. App.* 1, 99.
- Mohan, H., Jain, A.K., Kaur, M., Singh, P.S., Sharma, S., 2014. Cross section for induced L x-ray emission by protons of energy < 400 keV. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 332, 103–105.
- Orlic, I., 1994. Present status of the experimental L-shell ionization cross sections for light ion impact. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 87, 285.
- Oz, E., Erdogan, H., Ertugrul, M., 1999. Calculation of average L shell fluorescence yields for the elements with $25 < Z < 101$. *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 242, 219.
- Paul, H., 1982. K-shell ionization by protons: a quantitative comparison between published cross sections and theories. *Nucl. Instrum. Methods* 192, 11.
- Paul, H., Muhr, J., 1986. Review of experimental cross sections for K-shell ionization by light ions. *Phys. Rep.* 135, 47.
- Reis, M.A., Jesus, A.P., 1996. Semiempirical approximation to cross sections for L x-ray production by proton impact. *Atomic Data Nucl. Data Tables* 63, 1.
- Rodriguez-Fernandez, L., Miranda, J., Oliver, A., Cruz, F., Pegueros, J.R., 1993. Measurement of L x-ray production cross sections by 400–700 keV proton impact on rare earth elements. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 75, 49.
- Simsek, O., Dogan, O., Turgut, U., Ertugrul, M., 1999. Measurement of L shell fluorescence yields of some elements in the atomic range $56 \leq Z \leq 64$ using photoionization. *Radiat. Phys. Chem.* 54, 229.
- Singh, S., Mehta, D., Garg, R.R., Kumar, S., Garg, M.L., Singh, N., Mangal, P.C., Hubbell, J.H., Trehan, P.N., 1990. Average L shell fluorescence yield for elements $56 \leq Z \leq 92$. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 51, 5.
- Smit, Z., Lapicki, G., 2014. Energy loss in the ECPSSR theory and its calculation with exact integration limits. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 47, 055203.
- Sow, C.H., Orlic, I., Lob, K.K., Tang, S.M., 1993. New parameters for the calculation of L subshell ionization cross sections. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 75, 58.
- Zhou, X., Zhao, Y., Cheng, R., Wanga, Y., Lei, Y., Wang, X., Sun, Y., 2013. K and L-shell x-ray production cross sections for 50–250 keV proton impact on elements with $Z=26–30$. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 299, 61–67.

Three dimensional (Z-dependence), collective and individual semi-empirical formulae for L X-ray production and ionization cross section by protons impact within corrected ECPSSR theory and updated experimental data: a review

B. Deghfel,^{a,b} A. Kahoul,^{c,d,*} I. Derradj,^{a,b} A. Bendjedi,^{a,b} F. Khalfallah,^{c,d}
Y. Sahnoune,^{c,d} A. Bentabet^e and M. Nekkab^{a,f}

In this paper we propose a new three dimensional semi-empirical formulae for the deduction of L X-ray production and ionization cross sections by introducing the dependence on the atomic number of the target, noted as 'Z-dependence'. The data are also fitted collectively and separately (for each element) by analytical functions to calculate semi-empirical cross sections. For this purpose, the corrected ECPSSR model (noted as eCPSSR) and the published experimental data of L_{α} , L_{β} and L_{γ} X-ray production and L_1 , L_2 and L_3 ionization cross sections in the period (1950–2014) are combined to calculate the semi-empirical ones for a wide range of elements by proton impact. The semi-empirical cross sections (for the three x-rays lines L_{α} , L_{β} , L_{γ} and the three sub-shells L_1 , L_2 , L_3) are then deduced by fitting the available experimental data normalized to their corresponding theoretical values (using the eCPSSR model) giving a better representation of the experimental data for the individual interpolation. At last, a comparison is made between the three semi-empirical formulae reported in this work. Copyright © 2016 John Wiley & Sons, Ltd.

Introduction

During the last decades, the study of phenomena occurring in collisions between charged particles and target atoms has grown to a field of increasing interest in both its theoretical and experimental aspects. This growing interest is because of the wide applicability of Particle Induced X-Ray Emission (PIXE) in many fields. When performing sample analysis by PIXE, one of the essential factors is the X-ray production cross section or the ionization cross section on which relies a great extent of the quantitative PIXE analysis. Several theories have been proposed to describe the direct ionization process. One of the theories used most often has been the plane-wave Born approximation (PWBA), which is extended to describe the direct ionization for K, L and M-shell.^[1,2] The PWBA theory has been refined and further developed by incorporating some modifications. Brandt and Lapicki^[3,4] have accounted for the energy-loss (E), Coulomb-deflection (C) corrections for the projectile, the perturbed-stationary-state (PSS) and the relativistic(R) wave functions for the target electron giving the ECPSSR model. The available experimental L X-ray production and ionization cross sections present generally a significant spread at low proton energies. Also, experimental data show appreciable differences when compared with the theoretical predictions and none of the present theories gives satisfactory predictions that agree with experimental data at all energies and all atomic numbers. So, several authors have tried to perform fittings of the available experimental data with analytical functions and thus some contributions have been reported. The first contribution which modeled the ionization cross

sections of the three L_i sub-shells is that of Miyagawa et al.^[5] who used only 669 experimental data points for fitting. Later, Sow et al.^[6] reported new parameters for the calculation of the L_i sub-shell ionization cross sections. Further, Orlic et al.^[7,8] from the same research group reported empirical formulas for the calculation of empirical ionization cross sections for protons. Another major contribution is the one reported by Reis and Jesus.^[9] More recently, Strivay and Weber^[10] have reported empirical formulas based on

* Correspondence to: A. Kahoul, Laboratory of Materials Physics, Radiation and Nanostructures (LPMRN), University of Mohamed El Bachir El Ibrahimi, Bordj-Bou-Arredj 34030, Algeria. E-mail: ka_abdelhalim@yahoo.fr

a Laboratory of Materials Physics and its Applications, University of Mohamed Boudiaf, 28000, M'sila, Algeria

b Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Mohamed Boudiaf, 28000, M'sila, Algeria

c Department of Materials Science, Faculty of Sciences and Technology, Mohamed El Bachir El Ibrahimi University, Bordj-Bou-Arredj 34030, Algeria

d Laboratory of Materials Physics, Radiation and Nanostructures (LPMRN), University of Mohamed El Bachir El Ibrahimi, Bordj-Bou-Arredj 34030, Algeria

e Laboratory of Characterization and Evaluation of Natural Resources, University of Mohamed El Bachir El Ibrahimi, Bordj-Bou-Arredj 34030, Algeria

f LESIMS laboratory, Physics Department, Faculty of Sciences, Ferhat Abbas University, Setif 19000, Algeria

the direct fitting of experimental L X-ray production cross sections. This method allowed to obtain reliable L X-ray production cross sections of elements from Ag to U for protons with energies below 3.5 MeV. Kahoul and Nekab^[11,12] have proposed a semi-empirical and empirical formulae to calculate L_1 , L_2 and L_3 subshells ionization cross sections for elements with $71 \leq Z \leq 80$ and L X-ray production cross sections for elements with $50 \leq Z \leq 92$ for protons of 0.5–3.0 MeV. Gregory Lapicki^[13] evaluated the L_α x-ray production cross sections by up to 4-MeV protons in representative elements from Silver to Uranium. In 2014, Šmit and Lapicki^[14] proposed the eCPSSR model; in this model the exact limits for momentum transfers are used to calculate the cross sections. In the present contribution, we report on the determination of the L X-ray production and ionization cross sections by proton impact for elements with atomic numbers ranging from 39 to 92. First, we propose an analytical formula for the collective fit for elements with $39 \leq Z \leq 92$ for L_α , L_β and with $40 \leq Z \leq 92$ for L_γ to calculate the X-ray production cross sections and with $47 \leq Z \leq 92$ to calculate L_1 , L_2 and L_3 ionization cross sections by proton impact. Then, we propose a second formula by introducing the dependence on the atomic number of the target, noted as 'Z-dependence'. Finally, the data are also fitted separately ('individual') by analytical formula to deduce semi-empirical L X-ray production and ionization cross sections. We conclude our study by performing a comparison between the three semi-empirical formulae reported in this work.

Theory

In the PWBA development,^[15] the first-order Born approximation is used in scattering theory to describe the interaction between an incident charged particle and an atomic target. For a system composed of the projectile and the target atom, the PWBA L-shell ionization cross section in the center of mass system is given by the formula:

$$\sigma_{L_i}^{PWBA} = \frac{\sigma_{OL}}{\theta_{L_i}} F_{L_i} \left(\frac{\eta_{L_i}}{\theta_{L_i}^2}, \theta_{L_i} \right) \quad (1)$$

with:

$$\sigma_{OL} = 8a_0^2 \pi \left(\frac{z_1^2}{Z_{2L}^4} \right), \theta_{L_i} = 2n^2 \frac{U_{L_i}}{Z_{2L}^2} \text{ and } \eta_{L_i} = 2 \frac{E_1}{M_1 Z_{2L}^2}. \quad (2)$$

In the previous expression, σ_{OL} denotes a constant cross section for a given combination projectile-target. η_{L_i} and θ_{L_i} are dimensionless variables representing the reduced ion energy and the reduced electron binding energy, respectively. M_1 , E_1 and z_1 are the mass, the energy and the atomic number of the projectile. $Z_{2L} = Z - 4.15$ and Z are the effective atomic number and the atomic number of the target, respectively. a_0 is the Bohr radius, $U_L = \frac{1}{4}(U_{L_1} + U_{L_2} + 2U_{L_3})$ the mean L-shell binding energy, U_{L_1} , U_{L_2} and U_{L_3} is the binding energy of sub-shells L_1 , L_2 and L_3 , respectively, and $n=2$ for the L-shell. $F_{L_i} \left(\frac{\eta_{L_i}}{\theta_{L_i}^2}, \theta_{L_i} \right)$ follows from the double integration of the squared electron transition form factor and is given by:

$$F_{L_i} \left(\frac{\eta_{L_i}}{\theta_{L_i}^2}, \theta_{L_i} \right) = \frac{\theta_{L_i}}{\eta_{L_i}} \int_{W_{min}}^{W_{max}} dW \int_{Q_{min}}^{Q_{max}} |F_{W_{L_i}}(Q)|^2 \frac{dQ}{Q^2} \quad (3)$$

with:

$$\begin{aligned} W_{min} &= \frac{\theta_{L_i}}{n^2}, W_{max} = M\eta_{L_i}, Q_{min} \\ &= M^2 \eta_{L_i} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{W}{\eta_{L_i} M}} \right)^2 \text{ and } Q_{max} \\ &= M^2 \eta_{L_i} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{W}{\eta_{L_i} M}} \right)^2 \end{aligned}$$

where M is the reduced mass.

The ECPSSR theory of Brandt and Lapicki,^[4] which incorporates energy loss (E) and Coulomb deflection (C) of the projectile as well as perturbed stationary state (PSS) and relativistic (R) effects into the plane-wave Born approximation (PWBA), describes the L_i sub-shell ionization cross section by the following expression:

$$\sigma_{L_i}^{ECPSSR} = C_{L_i} (dq_{0L} \zeta_{L_i}) \sigma_{L_i}^{PWBA} \left(\frac{m_{L_i}^R \left(\frac{\xi_{L_i}}{\zeta_{L_i}} \right)}{(\zeta_{L_i} \theta_{L_i})^2}, \zeta_{L_i} \theta_{L_i} \right). \quad (4)$$

C_{L_i} represents the Coulomb deflection, d is the half distance of closest approach in a head on collision, q_{0L} the minimum momentum transfer in the collision, $\xi_{L_i} = 2V_1/V_{2L_i}$ θ_{L_i} the reduced velocity parameter; where V_1 and V_{2L_i} are the projectile and L_i sub-shell electron velocities, respectively. $\zeta_{L_i} = 1 + \left(\frac{2z_1}{\theta_{L_i} Z_{2L}} \right) (g_{L_i} - h_{L_i})$ is a factor that accounts for the perturbed stationary state; more detail for the function $C_{L_i} (dq_{0L} \zeta_{L_i})$, g_{L_i} and h_{L_i} can be found in the paper of Liu and Cipolla.^[16] $m_{L_i}^R$ is the relativistic correction given as:

$$m_{L_i}^R \left(\frac{\xi_{L_i}}{\zeta_{L_i}} \right) = \sqrt{1 + 1.1y_{L_i}^2} + y_{L_i} \quad (5)$$

where: $y_{L_1} = 0.4 \frac{(Z_{2L}/137)^2}{n(\xi_{L_i}/\zeta_{L_i})}$ and $y_{L_2, L_3} = 0.15(Z_{2L}/137)^2 (\xi_{L_i}/\zeta_{L_i})$.

The relativistic reduced ion velocity of the L_i subshell ($i = 1, 2$ or 3)

$\xi_{L_i}^R$ is defined as: $\xi_{L_i}^R = \left[m_{L_i}^R \left(\frac{\xi_{L_i}}{\zeta_{L_i}} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \zeta_{L_i}$.

The mean reduced ion velocity for L shell ξ_L^R is given by Rodriguez-Fernandez *et al.*^[17] as: $\xi_L^R = \frac{1}{4} (\xi_{L_1}^R + \xi_{L_2}^R + 2\xi_{L_3}^R)$.

It is indicated^[14] that it would be wrong to evaluate the exact limits for momentum transfers of integration in calculating form factors (Q_{min} and Q_{max}) by replacing η_{L_i} with $\eta_{L_i}^R$ ($\eta_{L_i}^R = m_{L_i}^R \eta_{L_i}$), where $\eta_{L_i}^R$ is the reduced ion energy and $m_{L_i}^R$ is the relativistic correction function.^[4] To remedy this problem, the factor $m_{L_i}^R$ should be multiplied by electron rest mass m wherever it occurs. This leads to the correct integration limits^[14]:

$$Q_{min}^{max} = \left(\frac{M}{m_{L_i}^R m} \right)^2 \eta_{L_i}^R \left(1 \mp \sqrt{1 - \frac{m_{L_i}^R m W}{\eta_{L_i}^R M}} \right)^2. \quad (6)$$

Also, it is interesting to distinguish the ECPSSR theory of Brandt and Lapicki,^[4] who incorporated f_5 -functions to account for the energy loss, from the eCPSSR cross sections that are calculated here with exact limits of integration for momentum transfers in the calculation of form factors.^[14]

The theoretical L X-ray production cross sections of the main L X-ray lines L_α , L_β and L_γ are calculated from the L_i sub-shells ionization cross sections as follows:

$$\sigma_{L_\alpha} = [(f_{13} + f_{12}f_{23}) \sigma_{L_1} + f_{23}\sigma_{L_2} + \sigma_{L_3}] \omega_3 F_{3\alpha} \quad (7)$$

$$\sigma_{L_{\beta}} = [\omega_1 F_{1\beta} + f_{12} \omega_2 F_{2\beta} + (f_{13} + f_{12} f_{23}) \omega_3 F_{3\beta}] \sigma_{L_1} \quad (8)$$

$$+ (\omega_2 F_{2\beta} + f_{23} \omega_3 F_{3\beta}) \sigma_{L_2} + \omega_3 F_{3\beta} \sigma_{L_3}$$

$$\sigma_{L_{\gamma}} = (\omega_1 F_{1\gamma} + f_{12} \omega_2 F_{2\gamma}) \sigma_{L_1} + \omega_2 F_{2\gamma} \sigma_{L_2} \quad (9)$$

In the previous expressions, σ_{L_i} ($i=1,2,3$) is our L_i sub-shell ionization cross sections calculated within the corrected ECPSSR theory, ω_i is the fluorescence yield of the L_i sub-shell and f_{ij} ($i=1, 2; j=2,3$) is the Coster–Kronig transition probability. Either ω_i or f_{ij} is taken from the compilation of Krause.^[18] F_{iy} ($y=\alpha, \beta, \gamma$) is the fraction of the radiation transitions of the L_i sub-shell ($i=1,2,3$) contained in the y th spectral line $F_{iy} = \Gamma_{iy} / \Gamma_i$ where Γ_i is the theoretical total transition rate of the L_i sub-shell and Γ_{iy} is the sum of the radiative transition rates contributing in the L_y ($y=\alpha, \beta, \gamma$) lines associated with the hole filling in the L_i sub-shell. Theoretical values of L X-ray emission rates of Scofield^[19] are adopted for the calculation of the fractions of the radiative transitions F_{iy} . As an example: $F_{3\alpha} = \Gamma_{3\alpha} / \Gamma_3$, where Γ_3 is the total transition rate to the subshell L_3 leading to emission of an X-ray, and $\Gamma_{3\alpha}$ is the sum of the radiative transition rates of the $X_{L_{\alpha}}$ ray (based on the IUPAC and the Siegbahn notations the transitions $L_3 \rightarrow M_5$ and $L_3 \rightarrow M_4$, leading to the emission of x-rays lines $L_{\alpha 1}$ and $L_{\alpha 2}$, respectively), to notified all the L_i ($i=1, 2$ and 3) transitions. In Table 1 we present the IUPAC notations and their corresponding Siegbahn ones.

Table 1. Correspondence between Siegbahn and IUPAC notation diagram lines

Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC
L_{α}	$L_{\alpha 1}$	L_3-M_5	L_{β}	$L_{\beta 1}$	L_2-M_4
	$L_{\alpha 2}$	L_3-M_4		$L_{\beta 2}$	L_3-N_5
				$L_{\beta 3}$	L_1-M_3
				$L_{\beta 4}$	L_1-M_2
				$L_{\beta 5}$	$L_3-O_{4,5}$
				$L_{\beta 6}$	L_3-N_1
				$L_{\beta 7}$	L_3-O_1
				$L_{\beta 7'}$	$L_3-N_{6,7}$
				$L_{\beta 9}$	L_1-M_5
				$L_{\beta 10}$	L_1-M_4
				$L_{\beta 15}$	L_3-N_4
				$L_{\beta 17}$	L_2-M_3
				L_{γ}	$L_{\gamma 1}$
					$L_{\gamma 2}$
					$L_{\gamma 3}$
					$L_{\gamma 4}$
					$L_{\gamma 4'}$
					$L_{\gamma 5}$
					$L_{\gamma 6}$
					$L_{\gamma 8}$
					$L_{\gamma 8'}$
					L_2-N_4
					L_1-N_2
					L_1-N_3
					L_1-O_3
					L_1-O_2
					L_2-N_1
					L_2-O_4
					L_2-O_1
					$L_2-N_{6,7}$

Semi-empirical formulae

We present new parameters for the calculation of semi-empirical L_{α} , L_{β} and L_{γ} X-ray production and L_1 , L_2 and L_3 ionization cross sections for targets with atomic number from 39 to 92 for L_{α} , from 39 to 92 for L_{β} , from 40 to 92 for L_{γ} , from 47 to 92 for L_1 , from 47 to 92 for L_2 and from 47 to 92 for L_3 . The database used in this work relies mainly on the recent compilations of Miranda and Lapicki.^[20] In

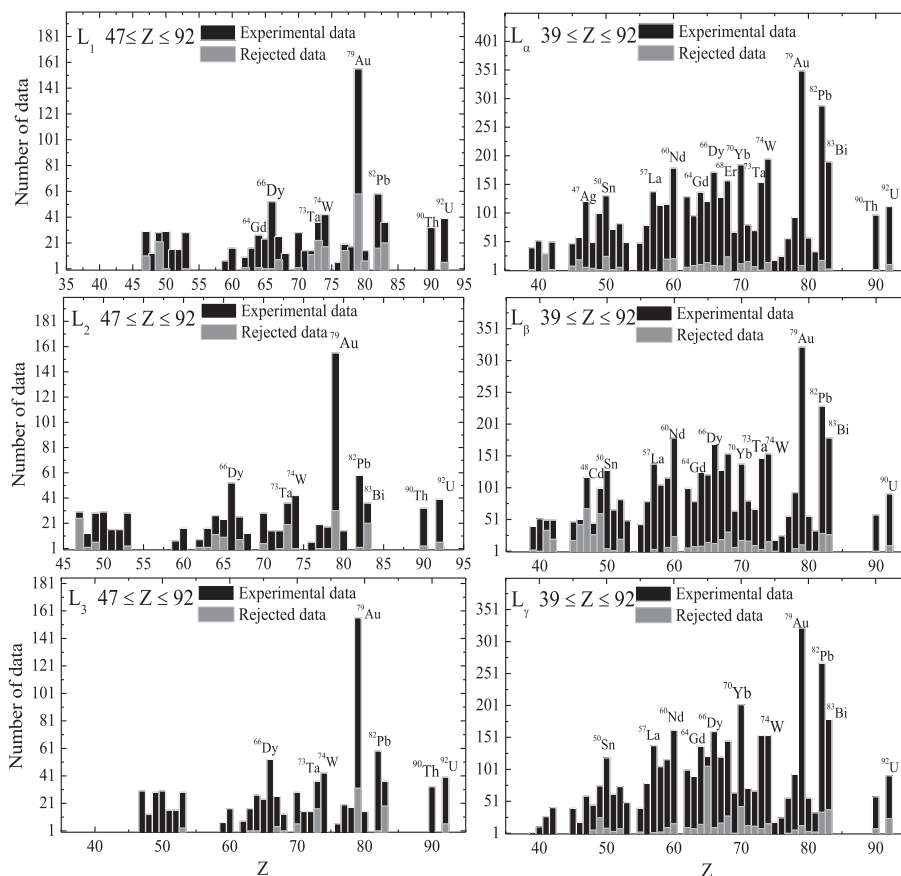


Figure 1. Available experimental ionization (L_1 , L_2 and L_3) and x-ray production cross sections (L_{α} , L_{β} and L_{γ}) by proton impact (0.02 to 10.0 MeV) for elements in the range $39 \leq Z \leq 92$ and their corresponding rejected data.

In addition to this, we selected an additional number of data from other works.^[21–25] These experimental data are not reported in the paper of Miranda and Lapicki.^[20] This provides us a database consisting of a total of 12 821 experimental data for the L X-ray production cross sections (4584 for L_{α} , 4223 for L_{β} and 4043 for L_{γ}) and a total of 2236 L-shell ionization cross sections (880 for the L_1 , 878 for L_2 and 878 for L_3) for proton impact. To produce a consistent and reliable semi-empirical L-shell ionization and x-ray production cross sections and enhance the quality of interpolation (see next section), we introduce the dispersion criterion on the existing experimental data for both ionization and x-ray production cross sections. This criterion is fixed within an interval of [0.5–1.5] from the corresponding calculated values. Therefore, we only consider the experimental data for which the ratio $S = \sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ varies within the range of 0.5–1.5. This criterion is used by several authors to reject experimental data which fit far from the ECPSSR calculations.^[11,17,26–29] Figure 1 displays the number of the available and rejected experimental data of L-shell ionization and x-ray production cross sections for elements by proton impact (0.02 to 10.0 MeV). Accordingly, a number of 322, 595 and 504 data points are removed from the L_{α} , L_{β} and L_{γ} x-rays lines and 242, 162, and 91 for L_1 , L_2 and L_3 sub-shells, respectively. These rejected data from the total database (about 7.02% for L_{α} , 14.09% for L_{β} , 12.46% for L_{γ} ,

27.5% for L_1 , 18.45% for L_2 and 10.36% for L_3) have little influence on the calculation of the cross section.

Collective fit

First, we present a graph of the normalized cross section $S = \sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ against the logarithm of the reduced velocity parameter $X = \log_{10}(\xi_L^R)$, where σ_{eCPSSR} refers to our theoretical production cross sections calculated using a personal computer program based on the ECPSSR model of Brandt and Lapicki^[4] and employing the correct integration limits from Šmit and Lapicki.^[14] $\xi_L^R = [m_L^R(\xi_L/\zeta_L)]^{1/2}\xi_L$ is defined as a product of $\xi_L = 2V_1/V_{2L}\theta_L$ (a measure used to distinguish the slow collision from the fast one) and the function $(m_L^R)^{1/2}$ which introduces the electronic relativistic effect. It is worth noting that the experimental data of all elements are generally mixed when the scaling based on the reduced velocity parameter $X = \log_{10}(\xi_L^R)$ is used. Furthermore, the relativistic factor $(m_L^R)^{1/2}$ is introduced to point out that the electronic relativistic effect has been incorporated in the eCPSSR theory by replacing $\xi_L = 2V_1/V_{2L}\theta_L$ with $\xi_L^R = [m_L^R(\xi_L/\zeta_L)]^{1/2}\xi_L$. Figure 2 shows all points

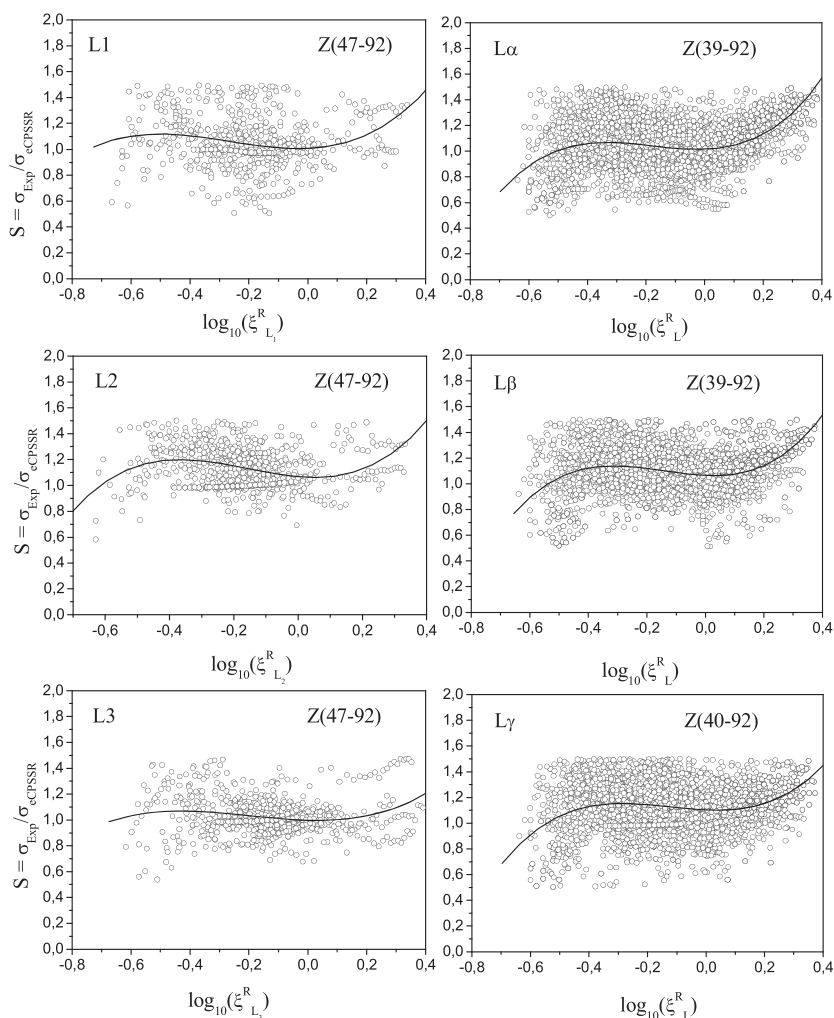


Figure 2. Evolution of the collective normalized cross sections $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ for L_1 , L_2 , L_3 , L_{α} , L_{β} and L_{γ} as a function of the scaled velocity. The collective fits \bar{S}_C are also represented by full lines.

Table 2. Coefficients to deduce the L_1 , L_2 , L_3 , L_α , L_β and L_γ semi-empirical cross sections for elements with $47 \leq Z \leq 92$ for L_1 , L_2 and L_3 , $39 \leq Z \leq 92$ for L_α and L_β and $40 \leq Z \leq 92$ for L_γ by proton impact using collective formula (Eqn 10)

Line	r_0	r_1	r_2	r_3
L_1	1.00726	0.09703	1.69759	2.12686
L_2	1.06797	-0.21331	1.75954	3.71492
L_3	0.99783	-0.06113	0.85959	1.44369
L_α	1.01495	0.07598	1.85009	3.46794
L_β	1.06464	-0.09375	1.63553	3.77564
L_γ	1.10239	-0.09988	1.15819	3.09114

(S , $\log_{10}(\xi_L^R)$) by proton impact (0.02 to 10.0 MeV) corresponding to the elements in the range $39 \leq Z \leq 92$ for L_α and L_β , $40 \leq Z \leq 92$ for L_γ and $47 \leq Z \leq 92$ for L_1 , L_2 , and L_3 . We use the term 'semi-empirical cross sections' to describe cross sections for selected targets and energies that have been obtained by considering the experimental

data for which the ratio $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ varies within the range of 0.5–1.5. These cross sections turn out to have considerably smaller errors than any single experimental data. Now defining the semi-empirical L x-ray production and ionization cross sections as:

$$\sigma_{s\text{-emp}} = \sigma_{\text{eCPSSR}} \bar{S}_C \quad (10)$$

$$\text{where } \bar{S}_C = \sum_{i=0}^3 r_i \text{Log}_{10}(\xi_L^R)^i.$$

The fitting results are represented on Fig. 2 with full lines, and Table 2 shows all the coefficients r_i .

Three dimensional (Z-dependence) formula

In our recent papers^[30–32] we have deduced a new semi-empirical cross sections by introducing the dependence of the ratios ($\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$) on the atomic number of the target, noted as 'Z-dependence' (pointing out that we are the first to propose this new treatment of the experimental data). With the same treatment, we generalize this formula for the L shell (L_1 , L_2 , L_3 , L_α , L_β and L_γ). In

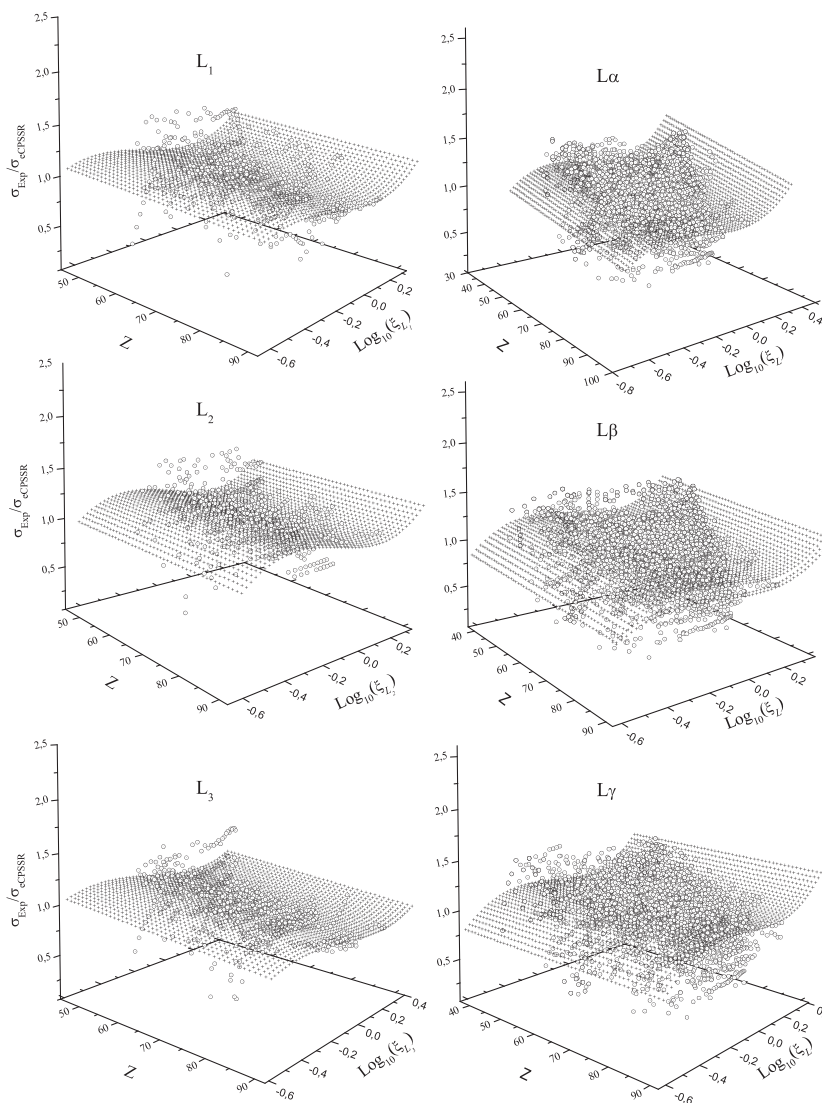


Figure 3. Evolution of the collective normalized cross sections $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{eCPSSR}}$ for L_1 , L_2 , L_3 , L_α , L_β and L_γ as a function of the scaled velocity and the atomic number of the target. The Z-dependence fits \bar{S}_Z are also represented by small x.

order to appreciate the deviations between the theoretical calculations and the experimental data, the evolution of the ratios S is presented in Fig. 3 (with the same number of experimental data used in the formula (10)) as a function of the scaled velocity parameter ($\log_{10}(\xi_L^R)$) and the atomic number of the target (Z) for the three x-rays lines L_α , L_β , L_γ and the three sub-shells L_1 , L_2 , and L_3 . It can be seen from this figure that the ratio S tends generally toward unity in all the range of the scaled velocities and for all elements with $39 \leq Z \leq 92$, $40 \leq Z \leq 92$ and $47 \leq Z \leq 92$. In this work, we suggest the linear dependence on the atomic number of the normalized cross sections. This allows us to fit the normalized experimental data (S) as follows:

$$\bar{S}_Z = (r_4 + r_5 Z) \sum_{i=0}^3 r_i \log_{10}(\xi_L^R). \quad (11)$$

Figure 3 show all points (S , $\log_{10}(\xi_L^R)$, Z) for L_α , L_β , L_γ , L_1 , L_2 , and L_3 corresponding to the elements with $39 \leq Z \leq 92$ for L_α and L_β , $40 \leq Z \leq 92$ for L_γ and $47 \leq Z \leq 92$ for L_1 , L_2 and L_3 . Table 3 shows all the coefficients r_i for the three x-rays lines L_α , L_β and L_γ and the three sub-shells L_1 , L_2 , and L_3 . We define the semi-empirical L x-ray production cross sections for Z-dependence procedure as:

$$\sigma_{s\text{-emp}} = \sigma_{e\text{CPSSR}} \bar{S}_Z. \quad (12)$$

Table 3. Coefficients to deduce the L_1 , L_2 , L_3 , L_α , L_β and L_γ semi-empirical cross sections for elements with $47 \leq Z \leq 92$ for L_1 , L_2 and L_3 , $39 \leq Z \leq 92$ for L_α and L_β and $40 \leq Z \leq 92$ for L_γ by proton impact using Z-dependence formula (Eqn 12)

Line	r_0	r_1	r_2	r_3	r_4	r_5
L_1	0.720581	-0.00244085	1.13963	1.57442	1.54655	-0.00229564
L_2	0.579578	-0.115053	0.955432	2.01533	1.84031	3.62851E-5
L_3	0.956351	-0.206268	0.623413	1.48782	1.25977	-0.00319824
L_α	-0.475922	0.00740202	-0.429538	-0.867927	-2.73948	0.00872574
L_β	-0.406722	0.0513717	-0.553097	-1.34665	-2.9166	0.004411
L_γ	-0.392374	0.0341799	-0.418301	-1.10789	-2.78213	-0.404465E-3

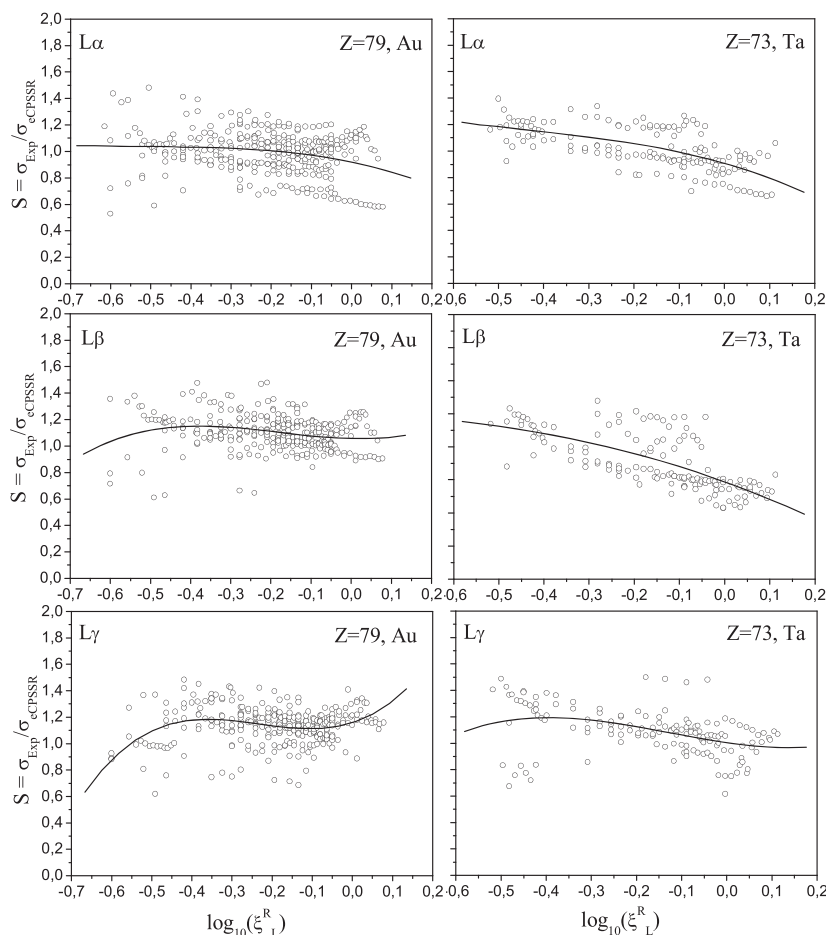


Figure 4. Evolution of the individual normalized cross sections $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{e\text{CPSSR}}$ for L_α , L_β and L_γ as a function of the scaled velocity $\log_{10}(\xi_L^R)$ for ^{79}Au and ^{73}Ta , as a sample of presentation. The individual fits \bar{S}_i are also represented by full lines.

Individual fit

Taking into account the dependence of the collision on the atomic number of the target, we propose that the data may be treated separately to study the difference between the global fit of the elements $39 \leq Z \leq 92$ (Eqn 10 and 12) and those obtained when each element is fitted separately. Our calculations are done for all elements for which experimental data for L_{α} , L_{β} , L_{γ} , L_1 , L_2 , and L_3 exist. We note that there are no experimental data for the elements ^{43}Tc , ^{44}Ru , ^{54}Xe , ^{61}Pm , ^{84}Po , ^{85}At , ^{86}Rn , ^{87}Fr , ^{88}Ra , ^{89}Ac , ^{91}Pa for L_{α} , L_{β} and L_{γ} and ^{39}Y , ^{40}Zr , ^{41}Nb , ^{42}Mo , ^{43}Tc , ^{44}Ru , ^{45}Rh , ^{46}Pd , ^{54}Xe , ^{55}Cs , ^{56}Ba , ^{57}La , ^{58}Ce , ^{61}Pm , ^{69}Tm , ^{75}Re , ^{81}Tl , ^{84}Po , ^{85}At , ^{86}Rn , ^{87}Fr , ^{88}Ra , ^{89}Ac for L_1 , L_2 , and L_3 . The lack of these experimental data is because of the fact that they are difficult to handle and not readily available.^[20] As previously, the rejection criterion of the experimental data, for which the ratio $S = \sigma_{\text{exp}} / \sigma_{\text{ECPSSR}}$ varies within the range of 0.5–1.5, is still going on here in order to work in the same conditions. The distribution of the normalized cross sections for ^{79}Au and ^{73}Ta elements, as a sample of presentation, is shown in Figs. 4 and 5 for the three x-rays lines L_{α} , L_{β} and L_{γ} and the three sub-shells L_1 , L_2 , and L_3 , respectively. The analytical function used for the fitting is:

$$\bar{S}_i = \sum_{i=0}^3 r_i \text{Log}_{10} \left(\frac{\xi^R}{\xi^L} \right)^i \tag{13}$$

The semi-empirical L X-ray production and ionization cross sections for the individual procedure is:

$$\sigma_{s-\text{emp}} = \sigma_{\text{ECPSSR}} \bar{S}_i \tag{14}$$

The fitting results are also shown in Figs. 4 and 5. The set of coefficients r_i for all elements are presented in Tables 4 and 5 for the three x-rays lines L_{α} , L_{β} and L_{γ} and the three sub-shells L_1 , L_2 , and L_3 , respectively.

The root-mean-square error (ϵ_{RMS}) is a frequently used quantity to check the quality and accuracy of the fit and measure the difference between values actually observed (experimental values) and those predicted by a model (semi-empirical). For each element and each x-ray line or subshell, the total deviation of N experimental data (σ_{exp}) from their corresponding fitted values ($\sigma_{s-\text{emp}}$) is expressed in terms of the root-mean-square error (ϵ_{RMS}) using the following expression:

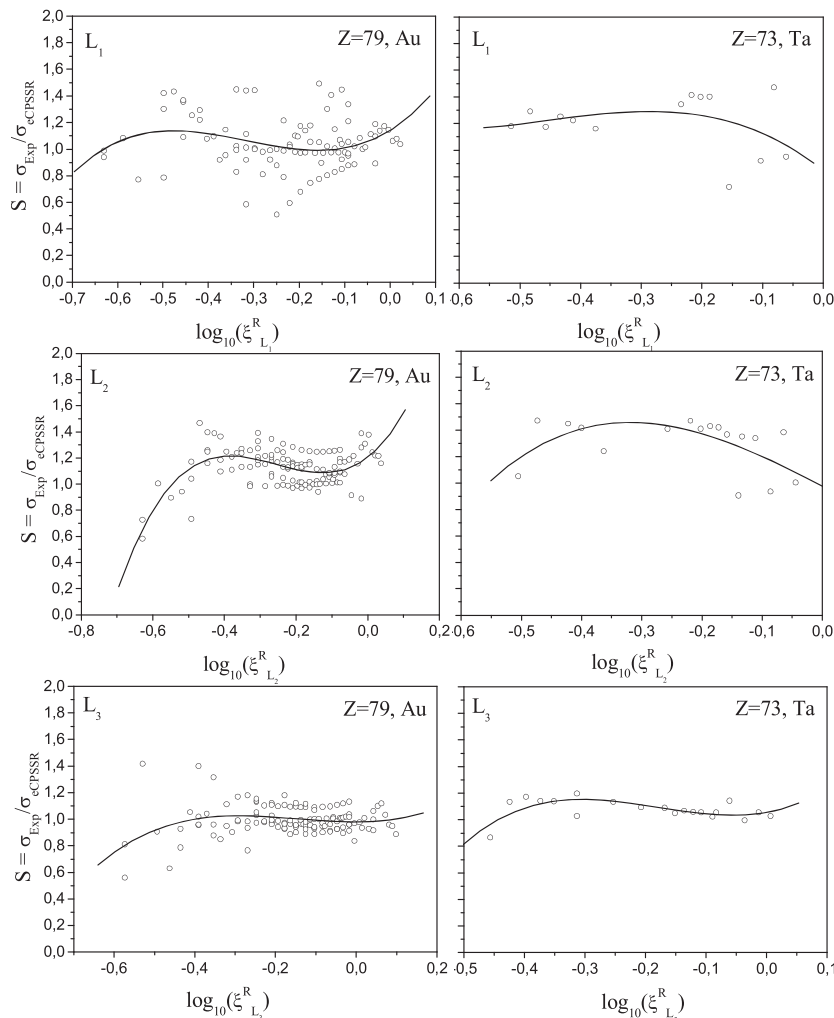


Figure 5. Evolution of the individual normalized cross sections $\sigma_{\text{exp}} / \sigma_{\text{ECPSSR}}$ for L_1 , L_2 and L_3 as a function of the scaled velocity $\text{Log}_{10} \left(\frac{\xi^R}{\xi^L} \right)$ ($i = 1, 2, 3$) for ^{79}Au and ^{73}Ta , as a sample of presentation. The individual fits \bar{S}_i are also represented by full lines.

Table 4. Coefficients to deduce the L_{α} , L_{β} and L_{γ} semi-empirical cross sections for elements with $39 \leq Z \leq 92$ for L_{α} and L_{β} and $40 \leq Z \leq 92$ for L_{γ} by using Individual formula (Eqn 14)

Z	L_{α}				L_{β}				L_{γ}			
	r_0	r_1	r_2	r_3	r_0	r_1	r_2	r_3	r_0	r_1	r_2	r_3
39	1.59348	7.98074	28.72512	30.07243	1.27752	4.5024	12.45966	7.67689	—	—	—	—
40	2.62697	22.05288	95.64576	124.4541	2.40595	17.16835	72.74564	94.68616	1.00028	-7.75519	-36.49951	-45.74647
41	4.31964	41.07273	165.6203	198.7551	9.00582	110.18532	519.2925	794.52283	1.7708	9.76115	35.75082	27.78148
42	3.81036	30.44728	104.3418	108.99175	2.27074	14.38733	53.43626	57.3684	4.14033	34.43001	115.49323	118.63182
45	1.02284	0.08131	2.38559	-2.99901	1.21535	-0.46645	1.05703	4.28625	1.0289	0.15756	1.82159	-2.61976
46	0.9473	-3.87283	-22.42569	-43.22731	1.01146	-10.13844	-70.96265	-135.29993	0.87256	-11.80771	-79.01378	-138.09143
47	1.183	-0.27731	0.5966	1.49248	1.39277	0.22145	-0.56762	-1.21994	1.17939	0.58759	-0.18296	-4.31533
48	1.15462	-0.25999	1.07992	2.23693	1.35257	-0.30286	1.49207	3.23033	1.28488	0.09549	-0.13648	0.9656
49	1.12889	-0.1039	0.87322	1.95822	1.4246	1.36394	-4.11281	-14.8667	1.30915	0.54385	0.64116	-4.51594
50	1.21342	0.21989	1.09841	0.20253	1.07485	-0.19515	1.51332	2.21276	1.07232	-0.11659	0.69608	1.78183
51	1.0629	0.37666	3.53026	-3.61825	1.07362	0.44192	2.78009	-4.84534	1.12387	0.50803	1.90431	-4.0813
52	1.05635	0.83336	3.24528	-7.9672	1.16692	0.10123	1.09723	1.86782	1.0329	0.34367	3.26679	-4.66565
53	1.02033	-0.10674	1.46189	4.79264	1.03577	-0.12391	2.28309	1.07274	1.05842	-0.15164	2.46439	-0.91441
55	0.99845	0.33211	2.4383	3.1312	1.39277	0.22145	-0.56762	-1.21994	1.17939	0.58759	-0.18296	-4.31533
56	0.97948	0.06119	2.46225	-0.21779	0.99531	-0.13487	1.40425	-2.63463	0.98019	4.80999E-4	1.01349	-2.90251
57	1.01815	-0.11841	3.13	6.82019	0.96372	-0.52774	-2.63463	9.0353	1.01172	-0.30034	3.17522	7.39073
58	0.98229	-0.27359	4.31289	12.4023	1.01658	-0.59061	2.8104	10.40457	1.07503	-0.32338	1.70141	7.13898
59	1.12165	-0.38304	1.95596	5.23435	1.12421	-0.35912	2.2379	5.79493	1.13275	-0.49238	1.75361	6.03204
60	1.07369	-0.06494	1.36183	4.55604	1.04538	-0.2711	1.75857	5.68839	1.10186	-0.29061	1.68217	6.55921
62	0.91173	-0.19546	4.43997	7.89217	0.98102	-0.2853	4.19139	8.6526	1.04305	0.07104	3.50444	6.93221
63	1.08619	0.51764	1.97123	2.11787	1.06931	0.10669	3.31041	8.90383	1.08267	0.43319	1.85382	1.06674
64	1.06398	0.18776	1.09419	1.97061	1.09741	0.17969	0.90824	1.42023	1.17175	0.28313	0.28795	0.51603
65	1.07686	0.05379	0.38818	0.89208	1.15428	-0.05641	-0.16698	0.26341	1.18085	0.06678	-0.09093	0.10888
66	0.99909	0.09422	2.72616	6.50358	1.03943	-0.18233	0.86821	4.47807	1.03619	0.15145	3.58355	8.01378
67	1.07529	-0.664422	1.49211	4.5896	1.11887	-0.23195	0.81526	4.82647	1.15781	-0.07732	1.41987	5.09674
68	1.03565	-0.02856	1.81929	4.75753	1.12703	-0.51804	-0.51235	3.33922	1.19577	-0.33872	0.13821	4.25036
69	0.99357	0.03697	2.87549	6.43992	1.073	-0.33053	3.29934	10.58981	1.10348	-0.1303	3.42844	8.53542
70	0.99442	-0.13471	2.75634	5.5699	1.04294	-0.1809	1.89856	4.81245	1.12554	-0.4909	0.91374	3.7302
71	1.01605	-0.14767	0.84754	3.62436	1.08457	-0.58663	-2.02561	-0.98704	1.20202	-0.70478	-3.73528	-3.13739
72	0.91477	-0.73075	5.35934	16.19713	0.96065	-1.07015	8.83159	35.17242	0.98729	-0.97843	10.98288	39.9137
73	0.90691	-0.97504	-1.36268	-1.03359	0.98732	-0.98327	-0.65532	-0.07818	1.00404	-0.49625	1.16646	3.04864
74	0.97217	-0.07422	2.93956	5.92749	1.07512	-0.6425	0.51406	3.73722	1.08203	-0.54379	0.1033	2.59539
75	1.04349	1.99151	15.14796	26.11066	0.99547	-2.7165	-18.23455	-34.1464	0.83025	-4.34728	-18.63181	-26.42585
76	0.998	1.61878	10.19319	13.88353	0.97126	0.60613	6.77451	11.66988	1.04479	0.57913	6.3467	11.76443
77	1.16193	1.16045	1.75458	-1.71001	1.10736	-0.23629	-1.51278	-2.02115	1.12205	-1.03857	-2.38785	-0.24274
78	0.94438	0.33446	1.34836	-0.49296	0.96163	-1.13581	-3.5108	-2.96065	1.04317	-1.64203	-11.74459	-19.74719
79	0.91916	-0.63355	-1.17519	-0.75593	1.05699	-0.07426	1.56323	2.91428	1.15806	0.9585	5.92317	8.50944
80	0.99992	1.91172	11.55465	17.08924	1.31193	2.5507	6.67855	3.88729	1.12126	0.44066	-3.32223	-10.38893
81	1.36842	4.29694	13.38436	13.11111	1.08729	-0.10736	2.18168	4.38395	1.07104	-0.32028	2.83677	6.49864
82	0.95231	-0.09524	-0.42144	-0.29023	1.08482	-0.33435	-1.22492	-0.95882	1.07481	-0.91894	-2.82588	-1.8815
83	0.75816	-1.11353	1.26384	6.77319	1.00392	-0.37389	0.84256	3.1215	1.2218	1.62664	4.91265	4.33411
90	0.73452	-1.4871	-3.18215	-2.12039	0.60893	-6.28471	-27.5479	-36.22848	1.28241	0.52615	-3.90918	-12.1963
92	0.95846	0.30987	1.56536	1.60416	0.96136	0.02593	2.78103	4.64422	1.16175	-0.52021	0.30125	2.34507

$$\epsilon_{RMS} = \left[\sum_{j=1}^N \frac{1}{N} \left(\frac{\sigma_j(\text{exp}) - \sigma_j(\text{s-emp})}{\sigma_j(\text{s-emp})} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (15)$$

Discussion of results

It must be emphasized that the fitting equations 10, 12 and 14 and their associated coefficients are only valid in the region of the used

experimental data. Any extension of the fittings outside the corresponding ranges might give erroneous cross sections. Also, we noted that the scatter of the experimental data is partly because of the fact that the data are taken from various references and sources and consequently measured in different experimental conditions. The values of the root-mean-square error (ϵ_{RMS}) are presented in Fig. 6 for collective (Eqn 10), Z-dependence (Eqn 12) and individual (Eqn 14) procedures for the three x-rays lines L_{α} , L_{β} and L_{γ} and the three sub-shells L_{1} , L_{2} , and L_{3} as a function of the atomic number Z. The examination of the figure requires some comments, namely:

Table 5. Coefficients to deduce L_1 , L_2 and L_3 semi-empirical cross sections for elements with $47 \leq Z \leq 92$ by using individual formula (Eqn 14)

Z	L_1				L_2				L_3			
	r_0	r_1	r_2	r_3	r_0	r_1	r_2	r_3	r_0	r_1	r_2	r_3
47	-1.19495	2.93902	-17.5052	29.75498	6.60456	-94.9495	568.5812	-1106.2428	1.06532	-0.63527	-0.50391	6.12252
48	1.61174	0.72398	-4.30376	-69.08706	1.33534	1.04743	0.05809	-52.48904	1.09315	-0.51133	8.69663	-52.9004
49	1.44323	0.1437	-0.1192	-2.32049	1.39168	-0.44599	-0.11953	2.26448	1.08151	-0.94398	-2.44489	9.92385
50	1.11381	-0.60557	-0.67599	4.07469	1.0059	0.32261	0.48287	-1.03248	1.30106	0.13343	0.43888	1.67962
51	0.75591	0.08656	9.56737	26.98288	0.91292	-0.17426	6.07956	16.24015	0.85511	-0.47871	5.15021	8.79436
52	0.92721	0.28432	-9.90131	-34.48858	0.84445	0.48699	-1.294	-33.48422	0.79784	0.48592	-0.14886	-32.48673
53	1.17627	-0.22338	0.64394	-2.57772	1.17627	-0.22338	0.64394	-2.57772	0.97352	-0.46304	0.83883	10.84194
59	-2.76159	-31.6645	-79.0064	-64.19107	-0.92537	-19.70677	-51.29754	-39.42286	-2.07049	-30.85475	-87.40128	-79.47139
60	1.00996	-0.52442	-2.63232	-4.84997	0.99583	0.77773	17.42562	41.51355	1.02348	0.29933	-1.05657	-20.12084
62	-0.19104	-3.93125	-2.57093	0.94252	-7.7708	-60.64273	-130.0439	-91.28515	-4.74802	-45.74752	-112.5388	-90.57708
63	0.89496	0.93199	5.7442	0.42505	1.02082	0.14917	-5.29622	-35.64485	1.00104	0.6531	3.7743	-5.51765
64	0.98532	1.49557	12.73915	16.81583	1.06578	-0.65169	-4.35897	-22.39062	0.94001	0.0518	7.66258	12.8798
65	2.2641	8.53927	20.31279	15.51218	1.93826	7.99671	30.49356	36.29774	0.80513	-0.74385	1.85308	4.18433
66	0.99246	-3.18264	-24.65632	-45.31364	1.09804	0.00479	-3.24882	-8.11746	1.05193	0.12965	-4.36759	-14.6172
67	1.00885	0.8765	5.06322	4.51398	0.9265	-3.20806	-20.98525	-40.92843	1.00491	0.77808	6.89368	7.89078
68	2.53468	13.12968	39.42441	38.18373	2.39653	13.14093	47.10426	51.71089	-0.01368	-11.28523	-42.31529	-48.28783
70	1.10367	2.38382	13.12624	14.98593	1.06787	0.77338	5.5217	6.71195	0.96632	0.93846	7.46656	9.3271
71	3.96849	23.21854	59.11301	48.96563	2.13561	10.01131	36.05581	40.37832	1.39946	4.89445	19.77491	25.45068
72	—	—	—	—	1.3793	4.2572	20.8576	23.13972	1.07976	-0.05042	2.6481	-0.49655
73	0.84467	-3.68529	-9.40129	-6.88051	0.97613	-2.40397	-0.83086	6.14659	1.0554	0.80425	8.45904	15.61573
74	0.88258	1.81886	9.97022	9.82569	1.27048	2.6137	14.86794	21.13912	1.03785	0.00256	1.18101	0.48932
76	29.93258	225.99602	566.2726	457.45315	34.6391	219.0386	478.4566	348.2775	34.21072	273.2048	741.9049	663.11475
77	402.39066	2590.5154	5550.3269	3946.5100	1.14832	-0.42677	1.83156	5.85769	0.90878	-1.03585	-6.11129	-11.62077
78	3.17566	23.34386	75.0876	73.95037	0.69601	-4.51125	-18.19327	-23.33076	0.57685	-5.19648	-29.64811	-48.22803
79	1.14002	2.11355	8.83143	9.24689	1.20548	2.13214	11.29568	14.773	0.97935	0.00595	1.69219	3.86258
80	-18.0649	-234.01976	-924.06642	-1185.6502	1.3793	4.2572	20.8576	23.13972	1.40142	4.5802	16.89235	22.09373
82	1.63802	7.90457	25.72061	22.9974	1.16641	0.36256	0.76495	0.71237	1.00318	0.57682	4.13976	8.00876
83	1.54178	6.15412	23.56011	26.27598	1.08873	0.72189	1.64124	0.21964	1.10783	2.44987	13.19867	18.71107
90	-2.05925	-38.86788	147.9876	-174.03284	1.42102	-1.16448	-17.42183	-34.01275	1.07035	0.03071	-2.25107	-6.81565
92	0.99462	-0.94905	-7.00589	-12.67041	1.20661	-0.62262	-6.49957	-13.83045	0.95699	0.061	-0.61421	-4.37752

- First, the quality of the fitting depends more strongly on the spread of the experimental data than on the number of data used in the fitting, generally it is observed that the root-mean-square error (ϵ_{RMS}) decreases with the rise of the atomic number Z for both three x-rays lines L_{α} , L_{β} and L_{γ} and three sub-shells L_1 , L_2 , and L_3 whatever the procedure used: collective, Z-dependence or individual.
- Second, when making comparison between collective and Z-dependence formulae (Eqn 10 and Eqn 12), we find that the root-mean-square errors (ϵ_{RMS}) for collective procedure are higher than those of the Z-dependence formula ($\epsilon_{RMS(Eq.10)} > \epsilon_{RMS(Eq.12)}$) in most elements from Ytterbium to Uranium and for the three x-rays lines L_{α} , L_{β} and L_{γ} and from silver to uranium for the three sub-shells L_1 , L_2 , and L_3 (the values of the error related to the Z-dependence procedure are always less than those related to collective procedure). This is true despite the fact that the two formulae are based on both theoretical and experimental values via the fitting of the S parameter, but the lack of parameter Z (the atomic number) in the first formula (Eqn 10) adds an additional error for the deduction of the L x-ray production and ionization cross sections. Consequently, adding the atomic number in the semi-empirical formula will reduce the error.
- Third, if we compare the collective and Z-dependence formulae (Eqn 10 and Eqn 12) on one hand and individual formula (Eqn 14) on the other hand we can observe that the results deduced

by the individual fit are better than those obtained by collective or Z-dependence formulae in all ranges ; $39 \leq Z \leq 92$ for L_{α} and L_{β} , $40 \leq Z \leq 92$ for L_{γ} and $47 \leq Z \leq 92$ for L_1 , L_2 , and L_3 . The values of ϵ_{RMS} vary as follows:

- For the collective treatment (Eqn 10): 0.25%–6.91% for L_{α} , 0.49%–7.61% for L_{β} , 0.42%–5.72% for L_{γ} , 0.83%–9.08% for L_1 , 0.39%–8.89% for L_2 and 0.78%–7.41% for L_3 .
- For the Z-dependence formula (Eqn 12): 0.28%–6.05% for L_{α} , 0.41%–7.53% for L_{β} , 0.44%–4.60% for L_{γ} , 0.74%–7.88% for L_1 , 0.98%–8.90% for L_2 and 0.50%–6.50% for L_3 .
- For individual formula (Eqn 14): 0.37%–5.17% for L_{α} , 0.38%–6.45% for L_{β} , 0.16%–4.44% for L_{γ} , 0.10%–4.04% for L_1 , 0.05%–3.62% for L_2 and 0.11%–2.22% for L_3 .

From these results, we can safely conclude that the semi-empirical cross sections described by Eqn 14 give a better representation of the experimental data than those deduced using the whole range of experimental data (collective or Z-dependence), but we must point out that each procedure have its advantages. Indeed, despite a relatively higher values for the root-mean-square error for the collective fit and the Z-dependence procedures, the fact remains that the use of a single formula for all the elements is a clear advantage of these two methods. Concerning the method of the individual fit, the quality and accuracy of the fit are certainly better, but it comes with inconvenience of using individual formulae for each element.

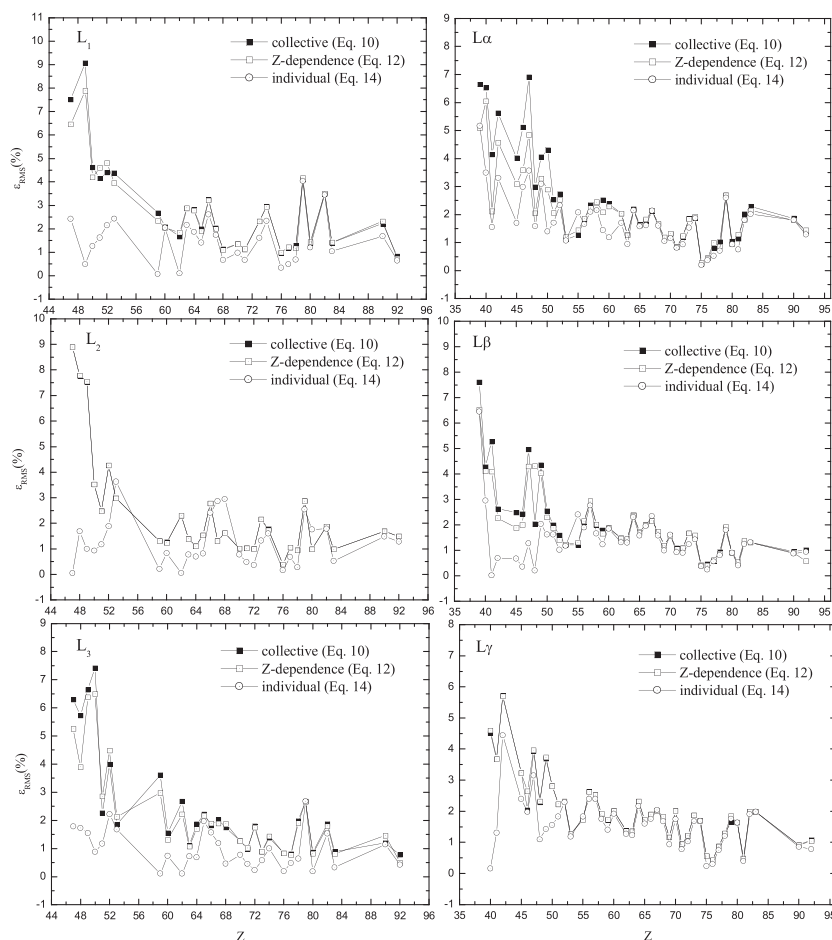


Figure 6. Root-mean-square error (ϵ_{RMS}) of collective, Z-dependence and individual procedures for L_1 , L_2 , L_3 , L_α , L_β and L_γ as a function of the atomic number of the target (Z).

Conclusion

Z-dependence, collective and individual semi-empirical cross sections are deduced from the normalized experimental data of the L_α , L_β and L_γ X-ray production and L_1 , L_2 and L_3 ionization cross sections for a wide range of elements by proton impact ($39 \leq Z \leq 92$ for L_α and L_β , $40 \leq Z \leq 92$ for L_γ and $47 \leq Z \leq 92$ for L_1 , L_2 , and L_3). By considering the root-mean-square error (ϵ_{rms}) as a criterion of the accuracy of the deduced cross sections, we can point out that, among the three fitting approaches, the semi-empirical cross sections described by the individual fit give the best representation of the experimental data. Also, a new set of coefficients, for both ionization and x-ray production cross sections, is proposed, in the present manuscript, to workers in the field of atomic inner-shell ionization processes and related phenomena such as PIXE analysis, where an accurate values are needed.

References

- [1] G. S. Khandelwal, E. Merzbacher. *Phys. Rev.* **1966**, *144*, 349.
- [2] B. H. Choi. *Phys. Rev. A* **1973**, *7*, 2056.
- [3] W. Brandt, G. Lapicki. *Phys. Rev. A* **1979**, *20*, 465.
- [4] W. Brandt, G. Lapicki. *Phys. Rev. A* **1981**, *23*, 1717.
- [5] Y. Miyagawa, S. Nakamura, S. Miyagawa. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **1988**, *30*, 115.
- [6] C. H. Sow, I. Orlic, K. K. Loh, S. M. Tang. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **1993**, *75*, 58.
- [7] I. Orlic. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **1994**, *87*, 285.
- [8] I. Orlic, C. H. Sow, S. M. Tang. *Int. J. PIXE* **1994**, *4*, 217.
- [9] M. A. Reis, A. P. Jesus. *At. Data Nucl. Data Tables* **1996**, *63*, 1.
- [10] D. Strivay, G. Weber. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **2002**, *190*, 112.
- [11] A. Kahoul, M. Nekab. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **2005**, *234*, 412.
- [12] M. Nekab, A. Kahoul. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **2006**, *245*, 395.
- [13] G. Lapicki. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **2009**, *42*, 145204.
- [14] Z. Šmit, G. Lapicki. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **2014**, *47*, 055203.
- [15] E. Merzbacher, H. W. Lewis. *Handbuch Physik* **1958**, *34*, 166.
- [16] Z. Liu, S. J. Cipolla. *Comput. Phys. Commun.* **1996**, *97*, 315.
- [17] L. Rodriguez-Fernandez, J. Miranda, A. Oliver, F. Cruz, J. R. Pegueros. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **1993**, *75*, 49.
- [18] M. O. Krause. *J Phys Chem Ref Data* **1979**, *8*, 307.
- [19] J. H. Scofield. *At. Data Nucl. Data Tables* **1974**, *14*, 121.
- [20] J. Miranda, G. Lapicki. *At. Data Nucl. Data Tables* **2014**, *100*, 651.
- [21] J. Miranda, G. Murillo, B. Mendez, J. Lopez-Monroy, J. Aspiazua, P. Villasenor, J. C. Pineda, J. Reyes-Herrera. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **2013**, *316*, 113.
- [22] X. Zhou, Y. Zhao, R. Cheng, Y. Wanga, Y. Lei, X. Wang, Y. Sun. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **2013**, *299*, 61.
- [23] E. Batyrbekov, I. Gorbachev, I. Ivanov, A. Platov. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **2014**, *325*, 84.
- [24] A. P. L. Bertol, J. Trincavelli, R. Hinrichs, M. A. Z. Vasconcellos. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **2014**, *318*, 19.
- [25] H. Mohan, A. K. Jain, M. Kaur, P. S. Singh, S. Sharma. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **2014**, *332*, 103.

- [26] H. Paul. *Nucl. Instrum. Methods* **1982**, 192, 11.
- [27] H. Paul, J. Muhr. *Phys. Rep.* **1986**, 135, 47.
- [28] A. Kahoul, M. Nekkab, B. Deghfel. *X-ray spectrum*. **2008**, 37, 536.
- [29] A. Abdellatif, A. Kahoul, B. Deghfel, M. Nekkab, D. E. Medjadi. *Radiat. Phys. Chem.* **2012**, 81, 499.
- [30] B. Deghfel, A. Kahoul, S. Kerai, M. Saadaoui, S. Dechoucha, M. Nekkab. *Radiat. Phys. Chem.* **2013**, 92, 32.
- [31] B. Deghfel, F. Khalfallah, A. Kahoul, M. Nekkab. *Turkish J Pediatr* **2015**, 39, 302.
- [32] I. Derradj, A. Kahoul, B. Deghfel, A. Bendjedi, F. Khalfallah, Y. Sahnoune, A. Bentabet, M. Nekkab. *Radiat. Phys. Chem.* **2016**, 121, 81.

Special Issue of the 6th International Congress & Exhibition (APMAS2016), Maslak, Istanbul, Turkey, June 1–3, 2016

Empirical L Shell Fluorescence Yields for Elements with $40 \leq Z \leq 92$

A. BENDJEDI^{a,*}, B. DEGHFEL^a, I. DERRADJ^a, A. KAHOU^b, F. KHALFALLAH^b, Y. SAHNOUNE^b,
A. BENTABET^c AND M. NEKKAB^d

^aLaboratory of Materials Physics and Its Applications, Department of Physics, Faculty of Sciences,
University of Mohamed Boudiaf, M'sila 28000, Algeria

^bLPMRN Laboratory, Department of Materials Science, Faculty of Sciences and Technology,
University of Mohamed El Bachir El Ibrahimi, Bordj-Bou-Arreidj 34030, Algeria

^cLaboratory of Characterization and Valuation of Natural Resources, University of Mohamed El Bachir El Ibrahimi,
Bordj-Bou-Arreidj 34030, Algeria

^dLESIMS Laboratory, Physics Department, Faculty of Sciences, Ferhat Abbas University Ferhat Abess,
Setif 19000, Algeria

Based on the fact that ratio of ionization to X-ray production cross-sections are independent of the excitation energy of projectile for a given target, we have deduced a new values of L shell average fluorescence yield from existing experimental compilation (till 2014) for a wide range of elements ($40 \leq Z \leq 92$) by proton impact (up to 10.0 MeV) of ionization and X-ray production cross-sections which are found to be universal when plotted as a function of the scaled velocity of projectile. The obtained empirical cross-sections are found reliable and then exploited to derive new values of average fluorescence yield. The obtained values are compared with earlier theoretical and experimental results and an agreement is observed for all elements.

DOI: [10.12693/APhysPolA.131.13](https://doi.org/10.12693/APhysPolA.131.13)

PACS/topics: 33.50.-j

1. Introduction

Accurate values of average fluorescence yield are important in many uses of inner shell ionization and related phenomena such as particle induced X-ray emission (PIXE) analysis that uses the inner shell fluorescence yields to predict or compare theoretical X-ray cross-sections with those measured experimentally. The collected data base [1] consists of 991 and 5266 experimental points for total ionization and X-ray production cross-sections, respectively. Sometimes a remarkable dispersion is pointed out in experimental values. This situation motivates the need to a consistent and reliable new set of average L shell fluorescence yields.

2. Ionisation and X-ray production cross-sections

Figure 1 displays the available experimental points of L shell total ionization (Fig. 1a) and X-ray production cross-sections of existing compilation (Fig. 1b) [2] and other data extracted from curves [1]. Also, we introduce the dispersion criterion, within [0.5–1.5], of the existing experimental data from their corresponding calculated by ECPSSR model [3] with correct exact integration limits [4]. In such model Smit and Lapicki indicated that it would be wrong to evaluate the exact limits for momentum transfers of integration in calculating form factors

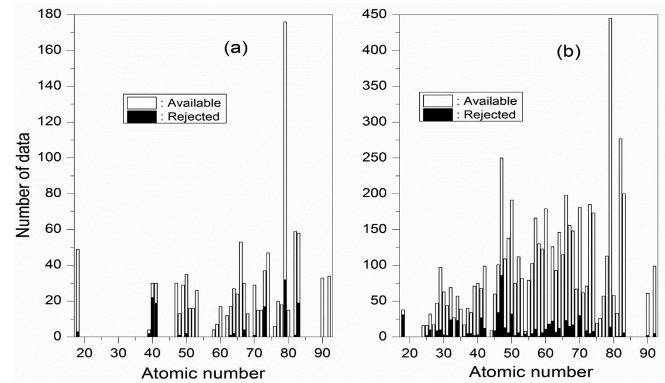


Fig. 1. Ionization (a) and X-ray production (b) experimental points and their corresponding rejected data.

(Q_{\min} and Q_{\max}) by replacing η_s with η_s^R ($\eta_s^R = m_s^R \eta_s$), where η_s^R is the reduced ion energy and m_s^R is the relativistic correction function [5]. As a solution of this problem, they proposed that the factor m_s^R should multiply electron rest mass m wherever it occurs. This led to the correct integration limits given by Eq. (1) from reference of Smit and Lapicki [4] given as

$$Q_{\min}^{\max} = \left(\frac{M}{m_s^R m} \right)^2 \eta_s^R \left(1 \mp \sqrt{1 - \frac{m_s^R m W}{\eta_s^R M}} \right)^2, \quad (1)$$

where W is the transferred energy from projectile to the ejected electron and Q is the square of the transferred momentum of the projectile.

*corresponding author; e-mail: a_bendjedi@yahoo.fr

TABLE I

r_0 , r_1 , r , and ε_{rms} for both X-ray production and ionization cross-sections for selected elements.

X-ray production									
Z	r_0	r_1	r	ε_{rms}	Z	r_0	r_1	r	ε_{rms}
47	8.87953	-3.68271	1.04256	5.82	79	7.18089	-2.50234	0.8929	3.15
60	8.56443	-3.50094	1.02185	2.25	90	7.20063	-2.70441	0.97536	0.91
Ionization									
47	11.01748	-2.64373	0.78201	1.22	79	8.41193	-2.59343	0.90628	3.91
60	14.1901	-7.12786	1.88901	0.54	90	11.53568	-5.94973	1.63783	0.94

TABLE II

Ratio (R) to the present calculation of other values of $\bar{\omega}_L$ as a function of atomic number (Z).

Z	R [6]	R [8]	R [7] fit	R [7]	R [9]	R [14]	R [13]	R [12]	R [11]	R [10]
40	1.17	1.23	1.16	1.19	1.16				0.97	
46	1.07	1.19	1.16	1.05	1.12			1.14	1.04	
50	1.03	1.17	1.19	1.01	1.11			1.20	1.05	
56	1.00	1.16	1.09	0.99	1.10	1.09	1.11			
62	0.99	1.15	1.06	0.99	1.11	1.10	1.19			
64	0.99	1.14	1.06	1.00	1.11	1.13	1.04			
75	1.02	1.13	1.07	1.03	1.08	1.05				0.86
83	1.06	1.12	1.06	1.05	1.07	1.03				1.02
92	1.07	1.11	1.06	1.07	1.06	1.05				1.03

The present compilations are found to be universal when plotted, in a logarithmic scale, as a function of the scaled velocity $\xi_L = (\xi_{L_1} + \xi_{L_2} + 2\xi_{L_3})/4$. This is shown in Fig. 2a for ${}_{79}\text{Au}$. Universal character of cross-sections allows us to derive an empirical cross-section for each elements by interpolating these cross-sections by a first order exponential decay function as

$$\ln \sigma_{\text{emp}} = r_0 + r_1 \exp(-r \ln \xi_L) \quad (2)$$

The result of interpolation is shown in Fig. 2a with a full line.

The root-mean-square error (ε_{rms}) is considered as a criterion of the quality of the calculated empirical cross-section. This error is expressed as the total deviation of the experimental cross-sections (σ_{exp}) from their corresponding empirical (σ_{emp}) values. The interpolation coefficients (r_0 , r_1 and r) with the values of ε_{rms} , are listed in Table I for selected elements.

3. Fluorescence yields of the L -shell

The total L -shell ionization cross-section is related to total X-ray production one through $\sigma_L^X = \bar{\omega}_L \sigma_L^I$, where $\bar{\omega}_L$ is the average fluorescence yield of the L -shell. This formula can be exploited to deduce empirical values of the average fluorescence yield for elements with $40 \leq Z \leq 92$ as follows.

First, σ_{emp}^X and σ_{emp}^I are plotted together as a function of the scaled velocity ξ_L (see Fig. 2a), where σ_{emp}^X is the total empirical X-ray production cross-section and σ_{emp}^I

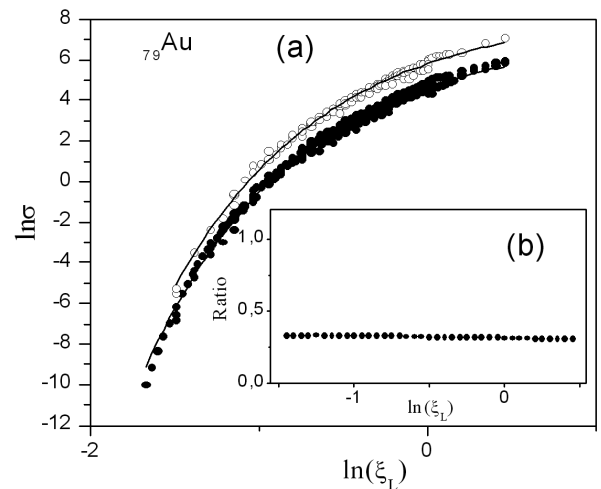


Fig. 2. Ionization (open circles) and X-ray production (dark points) cross-sections as a function of the scaled velocity ξ_L , in a logarithmic scale, for ${}_{79}\text{Au}$ (a). The ratio between them are also included (b).

is the total empirical ionization one, both deduced from the previous section.

Second, the ratio $\sigma_{\text{emp}}^X / \sigma_{\text{emp}}^I$ is depicted in the same Fig. 2b, inner figure. It can be seen that this ratio presents, approximately, a constant value for each element over the whole range of the scaled velocity ξ_L . This situation makes the ratio $\sigma_{\text{emp}}^X / \sigma_{\text{emp}}^I$ to be independent of

the scaled velocity ξ_L and allows us to take the mean value of this ratio for each element.

Third, the previous result can be served to calculate the empirical average fluorescence yield. This latter is affected to the corresponding mean value of the ratio for each element.

Then, the values of the empirical average fluorescence yield $\bar{\omega}_L$ deduced from the procedure described in the three previous steps, are interpolated as a function of the atomic number, using the famous formula

$$\sqrt[4]{\frac{\bar{\omega}_L}{1 - \bar{\omega}_L}} = a + bZ, \quad (4)$$

where $a = -0.02177$ and $b = 0.01073$ are deduced from the present study.

Finally, ratio (R) to the present calculation of $\bar{\omega}_L$ is presented in Table II of theoretical [2, 3, 5–9] and experimental values [10–14]. Generally, the results obtained from this procedure present a good compromise between theory and experiment.

4. Conclusion

Based on the empirical ionization and X-ray production cross-sections by proton impact, where the ratio ionization to production of the cross-section is found to be independent of the excitation energy for a given element. This procedure allows us to deduce the average fluorescence yield of elements for which we do not dispose of the experimental ionization or X-ray production cross-sections and to cover the whole range of elements from zirconium to uranium.

References

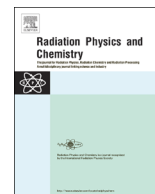
- [1] A. Bendjedi, B. Deghfel, A. Kahoul, I. Derradj, F. Khalfallah, Y. Sahnoune, A. Bentabet, M. Nekkab, *Radiat. Phys. Chem.* **117**, 128 (2015).
- [2] J. Miranda, G. Lapicki, *At. Data Nucl. Data Tables* **100**, 651 (2014).
- [3] Z. Liu, S.J. Cipolla, *Comp. Phys. Commun.* **97**, 315 (1996).
- [4] Z. Smit, G. Lapicki, *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **47**, 055203 (2014).
- [5] W. Brandt, G. Lapicki, *Phys. Rev. A* **23**, 1717 (1981).
- [6] D. Cohen, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **22**, 55 (1987).
- [7] J.H. Hubbel, P.N. Trehan, N. Singh, B. Chand, D. Mehta, S. Singh, *J. Phys. Chem.* **23**, 339 (1994).
- [8] I.V. Mitchell, K. Barfoot, *Nucl. Sci. Appl.* **1**, 99 (1981).
- [9] E. Oz, H. Erdogan, M. Ertugrul, *J. Radioanalyt. Nucl. Chem.* **242**, 219 (1999).
- [10] G. Apaydin, E. Trasoglu, *Radiat. Phys. Chem.* **81**, 1593 (2012).
- [11] M. Ertugrul, *Phys. Scr.* **65**, 323 (2002).
- [12] R. Garg, S. Puri, S. Singh, D. Mehta, J.S. Shahi, M.L. Garg, N. Singh, P.C. Mangal, P.N. Trehan, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **72**, 147 (1992).
- [13] O. Simsek, O. Dogan, U. Turgut, M. Ertugrul, *Radiat. Phys. Chem.* **54**, 229 (1999).
- [14] S. Singh, D. Mehta, R.R. Garg, S. Kumar, M.L. Garg, N. Singh, P.C. Mangal, J.H. Hubbell, P.N. Trehan, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **51**, 5 (1990).



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Radiation Physics and Chemistry

journal homepage: www.elsevier.com/locate/radphyschem

L-shell cross section within corrected ECPSSR theory and updated experimental data

I. Derradj^{a,b}, A. Kahoul^{c,d}, B. Deghfel^{a,b,*}, A. Bendjedi^{a,b}, F. Khalfallah^{c,d}, Y. Sahnoune^{c,d}, A. Bentabet^e, M. Nekkab^{a,f}^a Laboratory of materials physics and its applications, Physics Department, Faculty of Sciences, University of Mohamed Boudiaf, 28000 M'sila, Algeria^b Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Mohamed Boudiaf, 28000 M'sila, Algeria^c Department of Materials Science, Faculty of Sciences and Technology, Mohamed El Bachir El Ibrahimi University, Bordj-Bou-Argeridj 34030, Algeria^d LPMRN laboratory, Department of Materials Science, Faculty of Sciences and Technology, University of Mohamed El Bachir El Ibrahimi, Bordj-Bou-Argeridj 34030, Algeria^e Laboratory of characterization and valuation of natural resources, University of Mohamed El Bachir El Ibrahimi, Bordj-Bou-Argeridj 34030, Algeria^f LESIMS laboratory, Physics Department, Faculty of Sciences, Ferhat Abbas University, Setif 19000, Algeria

HIGHLIGHTS

- Investigate the inclusion of the correct exact integration limits on ECPSSR model.
- Semi-empirical L shell ionization and x-ray production cross section are deduced.
- The obtained results are compared with others works for elements with $18 \leq Z \leq 92$.
- Reasonable agreement was typically obtained between our result and other works.

ARTICLE INFO

Article history:

Received 4 May 2015

Accepted 23 December 2015

Available online 23 December 2015

Keywords:

L-shell ionization and x-ray production cross section

Correct integration limits for momentum transfer

ECPSSR model

Semi-empirical method

ABSTRACT

The aim of this contribution is to investigate the inclusion of the correct exact integration limits for momentum transfer on ECPSSR theory for a wide range of elements ($18 \leq Z \leq 92$) by proton impact with energy up to 10.0 MeV and its effect on deducing a reliable semi-empirical method for calculating L shell x-ray production and ionization cross sections. A comparison is made with earlier theoretical and experimental results.

© 2015 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The knowledge of the cross section dependence on projectile energy is essential for quantitative analysis by proton-induced x-ray emission (PIXE) (Reis and Jesus, 1996), which has a growing interest due to its wide applicability in many fields. A great extent of the quantitative PIXE analysis relies on x-ray production or ionization cross section.

Over the years several theories have been proposed to describe the direct ionization process by charged particles. The plane-wave Born approximation (PWBA) has been the most often used to

describe the direct ionization for K, L and M-shell (Khandelwal and Merzbacher, 1966; Choi, 1973). This approximation has been further developed by Brandt and Lapicki (1979; 1981) to give the ECPSSR model by incorporating some modifications; energy-loss (E), Coulomb-deflection (C) corrections for the projectile, the perturbed-stationary-state (PSS) and the relativistic (R) wave functions of target electron.

The available experimental L-shell ionization and x-ray production cross sections (Miranda, et al., 2013; Zhou, et al., 2013; Batyrbekov, et al., 2014; Bertol, et al., 2014; Mohan, et al., 2014; Miranda and Lapicki, 2014) show significant differences when compared with theoretical predictions especially at low energies of projectile. This motivated several workers to perform empirical and semi-empirical calculation on L-shell ionization and x-ray production cross sections from existing databases and theoretical models (Miyagawa et al., 1988; Sow et al. 1993; Orlic et al., 1994,

* Corresponding author at: Laboratory of materials physics and its applications, Physics Department, Faculty of Sciences, University of Mohamed Boudiaf, 28000 M'sila, Algeria.

E-mail address: b_deghefel@yahoo.fr (B. Deghfel).

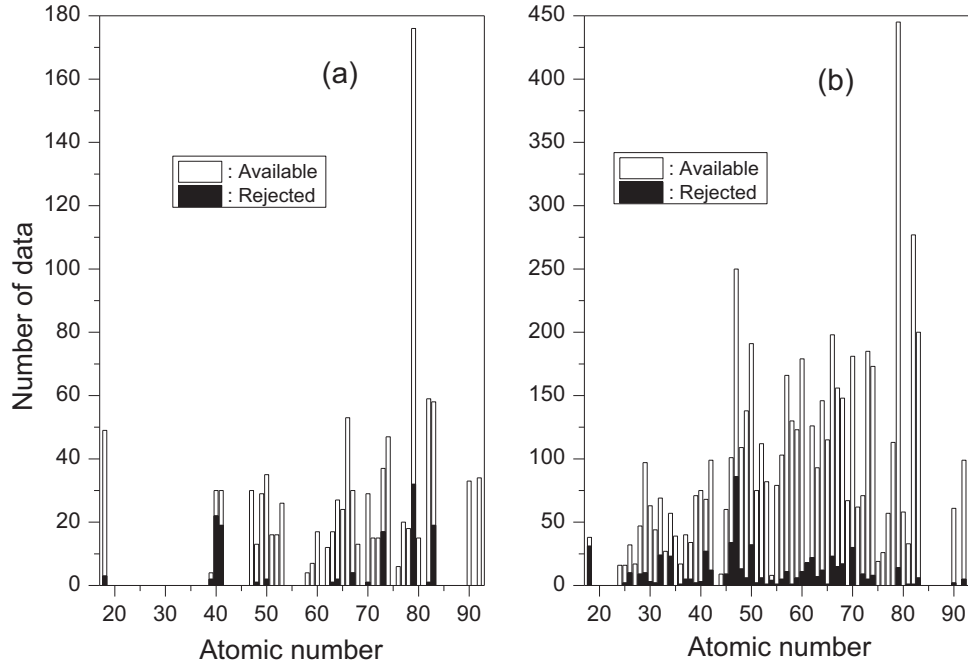


Fig. 2. Available ionization (a) and x-ray production (b) experimental points for elements in the range $18 \leq Z \leq 92$ and their corresponding rejected data.

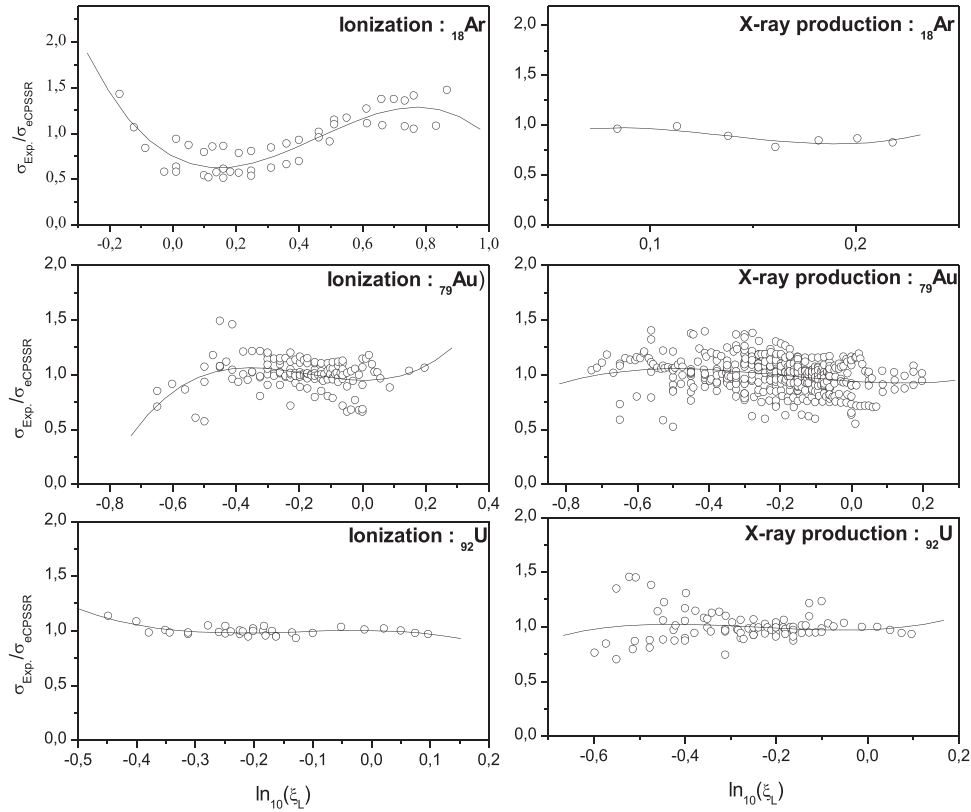


Fig. 3. Ratio to eCPSSR theory of experimental ionization (left side) and x-ray production (right side) cross sections as function of ξ_5 in a logarithmic scale for selected elements. Fitting is presented with a full line.

$$Q_{\min}^{\max} = \left(\frac{M}{m}\right)^2 \eta_s \left(1 \mp \sqrt{1 - \frac{mW}{\eta_s M}}\right)^2 \quad (2)$$

$$W_{\min} = \frac{\theta_5}{n^2} \quad (3)$$

$$W_{\max} = \frac{M}{m} \eta_s \quad (4)$$

where Z_1 is the projectile-charge number, n is the principal quantum number, ε is the energy loss of the projectile to the ejected electron, q is the transferred momentum of the projectile,

Table 2
 ϵ_{rms} (%) with the interpolation parameters (a_i) for semi-empirical cross sections.

X-ray production											
Z	a_0	a_1	a_2	a_3	ϵ_{rms}	Z	a_0	a_1	a_2	a_3	ϵ_{rms}
18	0.48822	13.42519	-114.09684	276.00255	4.43	55	1.11831	0.39557	-0.29608	-2.79431	2.63
24	0.8054	0.13761	3.34698	24.12211	2.22	56	0.99675	-0.24005	1.25581	0.71239	6.76
25	0.85962	-1.23326	9.6765	21.30642	1.33	57	1.00793	-0.25041	3.12339	7.19701	2.21
26	0.80204	-0.0899	2.96974	-1.77044	12.06	58	1.00902	-0.46651	2.22471	8.23366	1.74
27	0.64511	-0.9625	5.74996	7.60372	2.15	59	1.1145	-0.20322	1.39195	3.59891	1.5
28	0.68502	-0.03749	4.4348	-4.30635	11.39	60	1.04374	-0.08887	1.39028	4.16042	1.92
29	0.7831	-0.66015	2.70021	-0.6742	20.71	62	0.96328	-0.03467	3.58807	6.00233	1.12
30	0.86645	-0.72023	0.61449	3.49703	13.66	63	1.09634	-0.1066	2.62825	9.24059	1.14
31	0.8725	-0.56889	2.61903	-0.11158	3.74	64	1.10693	0.12146	-0.96415	-0.97372	2.49
32	0.73299	0.44354	1.32949	-0.37912	4.18	65	1.07751	0.09786	0.31228	0.26337	1.61
33	1.10114	-3.47913	15.20656	-15.289	1.76	66	1.0308	-0.0979	1.84951	5.85795	1.9
34	0.9855	-1.1224	4.71521	-3.59633	3.63	67	1.08145	0.01924	2.01241	5.04619	2.3
35	0.77674	-0.47364	1.66761	3.178	2.63	68	1.05864	-0.19012	0.96393	3.90882	1.61
36	0.78732	0.16145	4.3527	-4.18086	0.81	69	1.01641	-0.07751	2.1125	5.55393	1.16
37	0.82641	-1.01898	1.51992	6.76427	6.05	70	0.93822	0.3412	3.7887	5.4815	2.13
38	1.0005	-1.0837	1.62448	4.62067	2.4	71	1.04909	-0.45062	-1.20922	0.33191	0.75
39	0.85811	0.02541	0.84286	0.27057	3.64	72	0.93598	-0.82215	3.6837	12.74742	0.95
40	0.99538	-0.4998	2.11666	6.99599	2.72	73	0.91671	-0.81523	-0.84612	-0.59794	1.44
41	0.95151	0.28999	10.71262	18.0362	1.31	74	1.01484	-0.4427	1.48257	4.29474	1.53
42	0.81282	-0.6432	2.12919	2.96459	4.12	75	1.01041	0.70778	8.20268	16.40902	0.16
44	1.00375	4.35977	46.58787	116.20502	0.3	76	0.9928	1.20845	7.72075	10.65087	0.33
45	7.07568	0.09423	1.19507	-1.95232	3.34	77	1.14633	0.70092	1.15226	-0.0378	0.55
46	0.97496	-0.62978	-1.08965	-8.05976	3.93	78	0.92617	-0.31371	-2.04733	-4.47255	0.82
47	1.04362	-0.02902	1.61593	0.44034	5.33	79	0.94373	-0.21702	0.52494	1.0101	2.55
48	1.14584	0.80177	-0.57535	-3.7555	4.37	80	1.10112	2.51459	10.86256	12.82387	0.83
49	1.13041	0.29231	0.7815	-0.14254	3.33	81	1.28513	2.5807	7.20203	6.94003	0.56
50	1.13546	-0.01816	1.36332	1.39793	1.58	82	0.96652	-0.18508	-1.75462	-2.36503	2.03
51	1.06598	-0.03079	2.84703	-0.02139	1.77	83	0.86853	-0.38679	1.87234	4.56415	1.65
52	1.05239	0.24721	4.00764	-5.15059	2.49	90	0.5666	-5.07863	-16.92339	-17.2971	0.88
53	1.0772	-0.06932	0.65538	5.3853	1.47	92	0.97717	0.167520	1.61902	2.22163	0.96
54	0.54881	23.56936	-203.02748	538.088	0.09						
Ionization											
18	0.74674	-1.79457	7.38257	-5.37214	16.55	66	1.06069	-0.3216	-6.4505	-15.51836	1.49
40	9.09361	-53.23506	106.06262	-66.62338	0.62	67	1.00795	0.11645	2.69837	2.33188	1.22
41	-13.39811	104.17821	-260.68956	218.98715	0.51	68	1.27683	3.2874	12.69955	15.80415	0.6
47	1.3355	-0.98765	-1.18031	10.08929	1.01	70	1.03813	1.93779	11.46842	12.92983	0.71
48	1.22425	0.782	2.19312	-59.08813	0.67	71	1.58084	5.29068	17.63521	19.15657	0.41
49	1.27429	-0.06917	-1.39235	1.03074	1.1	72	1.18694	1.00057	5.76995	3.54117	0.24
50	1.20489	-0.08489	0.09821	2.83289	1.01	73	1.0713	0.23231	5.36787	9.7474	0.71
51	0.84867	-0.29743	6.20601	13.80325	0.89	74	0.98698	-0.61012	0.53619	1.78435	1.35
52	0.8312	0.50354	-2.27899	-31.54836	1.75	76	39.41263	273.2473	642.35239	497.44281	0.19
53	0.98734	-0.37517	1.97263	8.02567	1.4	77	0.99571	-0.85717	-3.19815	-4.66722	0.2
58	-0.65114	16.71042	-65.28842	86.70568	0.01	78	0.53093	-5.4058	-24.8799	-34.21699	0.44
59	-2.03744	-28.23327	-74.00385	-61.92339	0.07	79	0.95272	-0.03697	2.51103	4.77917	3.1
60	1.02792	0.1655	-0.31019	-11.37277	0.55	80	1.73191	6.88865	20.16391	17.14442	0.18
62	1.17763	-0.27287	0.69942	1.85871	0.43	82	0.99968	-0.19839	-0.15739	0.91001	1.45
63	0.99849	0.51771	1.67927	-8.88716	0.57	83	0.91515	0.35147	4.74679	7.15006	0.79
64	0.97817	0.75828	10.43785	14.34851	0.69	90	0.99568	-2.09114	-12.29257	-19.21832	0.93
65	1.14875	1.84351	8.2424	8.47722	1.41	92	1.00547	-0.07463	-1.90147	-5.10094	0.31

m is the mass of electron, U_s is the observed binding energy of the atomic electron, $Z_s = Z_2 - 4.15$ is an effective nuclear charge for the s-shell seen by an electron in an inner-shell of the target with charge number Z_2 , a_0 is the Bohr radius of hydrogen, E and M are the projectile energy and mass in the center of mass collision system, Ry is the Rydberg energy and $F_{W,s}(Q)$ is the form factor defined by Benka and Kropf (Benka and Kropf, 1978) for $s=K, L_1, L_2, L_3$.

Further development was introduced on the PWBA theory by Brandt and Lapicki (Brandt and Lapicki, 1981) to include the energy loss(E), Coulomb deflection (C) effects of the projectile, the perturbed stationary state (PSS) and relativistic (R) nature of the target's inner-shell. These effects are included in the PWBA cross section (Liu and Cipolla, 1996; Reis and Jesus, 1996) by multiplying it by Coulomb deflection factor C_s , changing θ_s to $\zeta_s \theta_s$, where ζ_s accounts for the changes in binding energy, multiplying m by the relativistic correction function $m_s^R(\xi_s)$, where ξ_s is the scaled

projectile velocity which distinguishes regimes of slow and fast collisions.

As indicated by Smit and Lapicki (Smit and Lapicki, 2014) that it would be wrong to evaluate Q_{\min} and Q_{\max} by replacing η_s in Eq. (2) with η_s^R given as

$$\eta_s^R = m_s^R \eta_s \quad (5)$$

To remedy this problem, the factor m_s^R should multiply electron rest mass m wherever it occurs. this led to the correct integration limits as

$$Q_{\min}^R = \left(\frac{M}{m_s^R m} \right)^2 \eta_s^R \left(1 \mp \sqrt{1 - \frac{m_s^R M W}{\eta_s^R M}} \right)^2 \quad (6)$$

since we use exact limits of integration in

Also, it is interesting to distinguish the ECPSSR theory of Brandt and Lapicki (Brandt and Lapicki, 1981), who incorporated

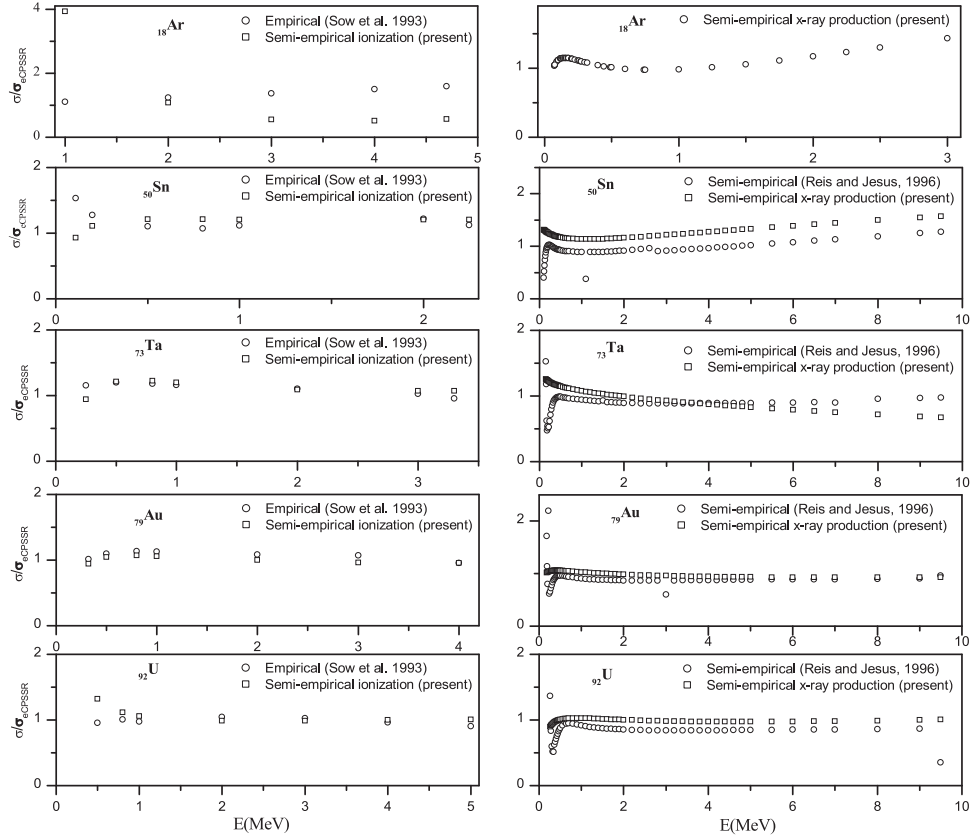


Fig. 4. Semi-empirical values of ionization (left side) and x-ray production (right side) cross section and other semi-empirical and empirical works as a function of the protons energy for selected elements. These results are normalized to their corresponding eCPSSR values.

f_S -functions to account for the energy loss, from the eCPSSR cross sections that are calculated here with exact limits for momentum transfers of integration in calculating form factors. This acronym is previously used by Smit and Lapicki (Smit and Lapicki, 2014).

3. Results and discussion

Results from eCPSSR model with correct (Eq. (6)) and wrong (Eqs. (2 and 5)) integration limits are summarized in Table 1 for selected elements. Also, to visualize the deviation of the correct results from the wrong ones, we present in Fig. 1 the ratio between them (wrong/correct) for elements with atomic number $18 \leq Z \leq 92$ by proton impact with energy up to 10.0 MeV. It is obvious that the results calculated from the ECPSSR model with correct and wrong exact integration limits are very close to each other for light and medium elements over the whole range of proton energy whereas a large difference is observed for lower energy of proton and heavy elements (up to a factor of 5 for ${}_{92}\text{U}$ at energy proton of 0.03 MeV).

Also, in the context of the eCPSSR model with correct integration limits (Eq. (6)), the semi-empirical L -shell ionization and x-ray production cross sections have been calculated by defining the normalized cross sections in the usual manner as $S = \sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{ECPSR}}$ where σ_{ECPSR} refers to our theoretical L -shell ionization or x-ray production cross sections calculated within the ECPSSR model with correct integration limits (Eq. (6): eCPSSR model) and σ_{exp} refers to their corresponding experimental ones at our disposal, for elements with atomic number $18 \leq Z \leq 92$ by proton impact from 0.02 to 10.0 MeV, collected from the compilation of Miranda and Lapicki (Miranda and Lapicki, 2014) and other experimental data extracted from curves (Miranda, et al.,

2013; Zhou, et al., 2013; Batyrbekov, et al., 2014; Bertol, et al., 2014; Mohan, et al., 2014). Fig. 2 displays a histogram of the available x-ray production and ionization experimental points for elements in the range $18 \leq Z \leq 92$ and the corresponding rejected data because of their dispersion from those calculated by using ECPSSR model with correct exact integration limits (noted previously as eCPSSR). In the present study the dispersion criterion is fixed within the interval [0.5–1.5].

The semi-empirical L -shell ionization and x-ray production (calculated from ionization cross sections and Krause atomic parameters: Krause, 1979) cross sections for each element are then deduced as $\sigma_{S\text{-emp}} = \sigma_{\text{ECPSR}} \times S$, where S is a third polynomial interpolating the behavior of the ratio $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{ECPSR}}$ as function of average reduced velocity parameters ξ_S in a logarithmic scale (defined as $\xi_L = (\xi_{L1} + \xi_{L2} + 2\xi_{L3})/4$ and $\xi_{L5} = 2n_S^{1/2}/4\theta_S$: Kahoul and Nekkab, 2005). This is presented in Fig. 3 with a full line for selected elements.

The quality of the calculated cross section is expressed in terms of the root-mean-square error (ϵ_{rms}) of the total deviation of the experimental cross sections (σ_{exp}) from their corresponding semi-empirical ($\sigma_{S\text{-emp}}$) values (Deghfel et al., 2013). The values of ϵ_{rms} with the interpolation parameters for both x-ray production and ionization semi-empirical cross sections, are listed in Table 2.

Generally, the values of ϵ_{rms} vary within an acceptable ranges: from 0.01% to 3.1% for the ionization cross section and from 0.09% to 13.66% for the x-ray production one. A large dispersion of experimental data is observed for ionization cross section of ${}_{18}\text{Ar}$ and x-ray production cross section of ${}_{29}\text{Cu}$. This makes their deviation (ϵ_{rms}) out of the ranges cited above: 16.55% for ${}_{18}\text{Ar}$ and 20.71% for ${}_{29}\text{Cu}$.

In order to well compare the various results graphically, our results of the semi-empirical L -shell ionization and x-ray

production cross sections are presented (Fig. 4) together with semi-empirical results tabulated by Reis and Jesus (Reis and Jesus, 1996) and empirical works deduced from fitting coefficient (Sow et al., 1993) as a function of the protons energy for selected elements (^{18}Ar , ^{50}Sn , ^{73}Ta , ^{79}Au and ^{92}U). All these values are normalized to their corresponding corrected ECPSSR calculations (eCPSSR).

Generally, the semi-empirical cross sections, for both ionization and x-ray production, agree with the eCPSSR calculations for the five elements over the whole range of the proton energy, except for the ionization cross section of ^{18}Ar where a ratio up to a factor of 1.5 is observed. This may be attributed to the large dispersion of experimental data from their corresponding theoretical values (see Fig. 3).

Also, our results of the semi-empirical cross sections close generally to both the semi-empirical values of Reis and Jesus (Reis and Jesus, 1996) and the empirical values deduced from fitting coefficient by Sow et al. (Sow et al., 1993) for x-ray production and ionization cross section, respectively. The situation is less satisfactory for x-ray production cross sections at low energy of proton where the semi-empirical values of Reis and Jesus (Reis and Jesus, 1996) present a large deviation from eCPSSR results.

4. Conclusion

A large difference (up to a factor 5) is observed between the results of ionization cross sections from ECPSSR model and those calculated with exact limits for momentum transfers of integration in calculating form factors in the region of lowest collision velocities covered by experiments. A semi-empirical approximation for both ionization and x-ray production cross section are then deduced from ECPSSR model with such limits and the updated experimental data for a wide range of elements ($18 \leq Z \leq 92$). Our results agree with the eCPSSR calculations over the whole energy range and close generally to other semi-empirical and empirical values except at low energy of proton where a large deviation is observed.

References

- Batyrbekov, E., Goralchev, I., Ivanov, I., Platov, A., 2014. K-, L- and M-shell x-ray production cross sections by 1–1.3 MeV protons. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 325, 84–88.
- Benka, O., Kropf, A., 1978. Tables for plane-wave Born-approximation calculations of K- and L-shell ionization by protons. *At. Data Nucl. Data Tables* 22, 220.
- Brandt, W., Lapicki, G., 1979. L-shell Coulomb ionization by heavy charged particles. *Phys. Rev. A: Mol. Opt. Phys.* 20, 465.
- Bertol, A.P.L., Trincavelli, J., Hinrichs, R., Vasconcellos, M.A.Z., 2014. L-shell X-ray production cross sections induced by protons and alpha-particles in the 0.7–2.0 MeV/amu range for Ru and Ag. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 318, 19–22.
- Brandt, W., Lapicki, G., 1981. Energy-loss effect in inner-shell Coulomb ionization by heavy charged particles. *Phys. Rev. A* 23, 1717.
- Choi, B.H., 1973. Cross section for M-shell ionization in heavy atoms by collision of simple heavy charged particles. *Phys. Rev. A: Mol. Opt. Phys.* 7, 2056.
- Deghfel, B., Kahoul, A., Heraiz, S., Belouadah, N., Nekkab, M., 2013. M x-ray production cross sections of heavy elements for low and high proton energy. *Radiat. Phys. Chem.* 85, 89.
- Kahoul, A., Nekkab, M., 2005. L1, L2 and L3 subshell ionization cross sections for elements with $71 \leq Z \leq 80$ for protons of 0.5 to 3.0 MeV. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 234, 412.
- Khandelwal, G.S., Merzbacher, E., 1966. Stopping power of M electrons. *Phys. Rev.* 144, 349.
- Krause, M.O., 1979. Atomic radiative and radiationless yields for K and L shells. *J. Phys. Chem. Ref. Data* 8, 307.
- Lapicki, G., 2009. Evaluation of cross sections for $L\alpha$ x-ray production by up to 4 MeV protons in representative elements from silver to uranium. *J. Phys. B: Mol. Opt. Phys.* 42, 145204.
- Liu, Z., Cipolla, S.J., 1996. ISICS: A program for calculating K-, L- and M-shell cross sections from ECPSSR theory using a personal computer. *Comp. Phys. Commun.* 97, 315.
- Miranda, J., Murillo, G., Mendez, B., Lopez-Monroy, J., Aspiazu, J., Villasenor, P., Pineda, J.C., Reyes-Herrera, J., 2013. Measurement of L X-ray production cross sections by impact of proton beams on Hf, Ir, and Tl. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 316, 113–122.
- Miranda, J., Lapicki, G., 2014. Experimental cross sections for L-shell x-ray production and ionization by protons. *At. Data Nucl. Data Tables* 100, 651.
- Miyagawa, Y., Nakamura, S., Miyagawa, S., 1988. Analytical formulas for ionization cross sections and coster-kronig corrected fluorescence yields of the L1, L2, and L3 subshells. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 30, 115.
- Mohan, H., Jain, A.K., Kaur, M., Singh, P.S., Sharma, S., 2014. Cross section for induced L X-ray emission by protons of energy < 400 keV. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 332, 103–105.
- Orlic, I., Sow, C.H., Tang, S.M., 1994. Semiempirical formulas for calculation of L subshell ionization cross sections. *Int. J. PIXE* 4 (4), 217.
- Reis, M.A., Jesus, A.P., 1996. Semiempirical approximation to cross sections for LX-ray production by proton impact. *At. Data Nucl. Data Tables* 63, 1.
- Smit, Z., Lapicki, G., 2014. Energy loss in the ECPSSR theory and its calculation with exact integration limits. *J. Phys. B: Mol. Opt. Phys.* 47, 055203.
- Sow, C.H., Orlic, I., Loh, K.K., Tang, S.M., 1993. New parameters for the calculation of L subshell ionization cross sections. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 75, 58.
- Zhou, X., Zhao, Y., Cheng, R., Wanga, Y., Lei, Y., Wang, X., Sun, Y., 2013. K and L-shell X-ray production cross sections for 50–250 keV proton impact on elements with $Z=26-30$. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 299, 61–67.

