



N° d'ordre :

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

Université de M'sila
Faculté des Sciences
Département de Physique

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

MASTER

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

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

Par

DECHOUCHA SAMIYA

THEME

**Sections efficaces semi-empiriques de production des couches M des
éléments de numéros atomiques $60 \leq Z \leq 90$ par des protons en vue des
applications analytiques.**

Soutenue le : 25/Juin/2013

Devant le jury composé de :

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

Promotion Juin 2013

Remerciements

*Je remercie **DIEU** le Tout puissant de m'avoir aidé et donné la volonté d'achever ce modeste travail.*

*Mes remerciements et ma reconnaissance vont particulièrement à mon directeur de mémoire et mon **Dr. Bahri DEGHEFEL** M.C.A à l'Université de M'sila, pour sa disponibilité, ses précieuses orientations, sa patience et surtout sa modestie, l'expression de ma profonde gratitude et mes respects.*

*Je tiens aussi à remercier Monsieur **Abdelhalim KAHOUL**, M.C.A à l'Université de MOHAMED BACHIR ELIBRAHIMI- BORDJ BOU ARRERIDJ, d'avoir accepté de faire partie de ce jury en tant que président.*

*Je suis à la fois honorée et heureuse que : **Monsieur Mohammed NAKKAB**, professeur à l'Université de M'sila, d'avoir accepté de faire partie de ce jury en tant qu'examineur.*

Je ne saurais oublier toutes les personnes qui m'ont encouragée et aidée de près et de loin, mes enseignants qui m'ont enseignée durant tout le cursus et mes collègues.

Dechoucha Samiya

Dédicaces

A mes chers parents.

A mes sœurs et mon frère.

A toutes ma famille.

A toute mes amies.

A tous ceux qui me sont chères et proches.

Je dédie ce travail.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GENERALE	01
CHAPITRE I : RAPPELS THEORIQUES.	.
I.1.Introduction	03
I.2.Production des rayons X	03
I.3. L'atome dans la mécanique quantique	04
I.4. Transitions électroniques	04
I.5. Règles de sélection	06
I.6. Emission de rayons X	07
I.7. Spectrométrie de fluorescence X	07
I.8. Section efficace	09
I.8.1. Section efficace d'ionisation	09
I.8.2. Section efficace de production	10
I.9. Modèle quantique PWBA	12
I.10. Facteur de forme de la couche M	17
CHAPITRE II :RESULTATS DES MODELES PWBA ET ECPSSR.	.
II.1.Introduction	19
II.2. Résultats du modèle PWBA	19
II.3. Modèle ECPSSR	20
II.3.1.Correction de l'énergie de liaison	20
II.3.2. Déflexion coulombienne	21
II.3.3.Correction relativiste	22
II.3.4.Correction de la perte d'énergie	22
II.3.5.Résultats du modèle ECPSSR	23
	.

CHAPITRE III : <i>SECTIONS EFFICACES SEMI-EMPIRIQUES DE</i>	.
<i>PRODUCTION DES COUCHES M.</i>	
III.1.Introduction	25
III.2. Section efficace semi-empirique "référence"	25
III.3.Résultats et discussions	34
III.3.1. Distribution des données expérimentales	34
III.3.2.Explication des figures	34
III.3.3.Discussion des résultats	42
CONCLUSION GENERALE	43
Références bibliographiques	44

INTRODUCTION GENERALE

Le processus d'excitation des rayons X par des particules chargées avec la matière présente un grand intérêt pratique et est dominé par l'ionisation directe de Coulomb par impact d'ions légers avec la cible, menant ainsi à la création des états électroniques vacants (lacunes). L'atome cible retrouve alors sa stabilité par émission radiative des rayons X ou par des processus non radiatifs d'Auger ou de Coster-Kronig [Me.58]. En raison de leur importance pour la technique d'analyse par émission des rayons X induite par des particules chargées (Particle Induced X-ray Emission - PIXE), l'ionisation des couches internes et la production des rayons X par des particules chargées ont été intensivement étudiées durant les quatre dernières décennies. La technique d'analyse PIXE est basée sur l'ionisation des couches internes (K , L ou M) de l'atome cible conduisant à la production des rayons X qui sont caractéristiques de l'élément ionisé en analysant le spectre X obtenu.

Durant les dernières années, plus de résultats expérimentaux pour l'ionisation de la couche M des éléments lourds bombardés par des ions légers sont devenus disponibles ([Pa.90] et [Pa.99]).

Les approches théoriques développées pour décrire l'ionisation des couches internes par des projectiles légers et chargés ont été concentrées sur la description des collisions asymétriques ($Z_1 \ll Z_2$), où la masse du projectile est plus petite que celle de la cible. Dans de telles collisions, les lacunes créées dans les couches internes sont produites principalement par le processus d'ionisation directe de Coulomb, où l'ionisation multiple et le processus de capture électronique jouent un rôle négligeable ; avec Z_1 et Z_2 sont les numéros atomiques du projectile et de la cible, respectivement.

L'ionisation directe de Coulomb peut être traitée en utilisant des approches quantiques basées sur la perturbation en premier ordre des états électroniques ; à savoir l'approximation de Born des ondes planes (**Plane Wave Born Approximation - PWBA**) [Me.58] .

L'approche d'ionisation la plus avancée tient compte du déroulement de l'interaction entre le projectile et la cible pour inclure ; l'effet de liaison-polarisation dans l'approximation des états stationnaires perturbés (**Perturbed Stationary State-PSS**) ; l'effet de la perte d'énergie du projectile (**Energy loss-E**) animé de grande vitesse pour lequel la durée de

l'interaction avec la cible est courte lors de son passage ; l'effet de déflexion Coulombienne (**Coulomb Deflection-C**) ; et la description relativiste des électrons des couches internes (**Relativistic Effect - R**). L'ensemble de ces corrections conduit à l'élaboration de ce qu'est connue sous le nom du modèle *ECPSSR* [Br.81].

Le premier chapitre du présent travail est consacré à l'étude théorique du modèle *PWBA* utilisé pour décrire l'ionisation d'un atome par une particule chargée.

Dans le deuxième chapitre nous avons calculé les sections efficaces dans le cadre du modèle *PWBA*. La comparaison entre les valeurs théoriques et expérimentales, montre bien un désaccord surtout à basse énergie. Pour palier les insuffisances du modèle *PWBA* à basses énergies; nous avons corrigé ce modèle en introduisant certains effets donnant naissance au modèle *ECPSSR*. Bien que ces améliorations successives aient été incorporées dans la théorie *ECPSSR*, des déviations continuent d'apparaître entre les données expérimentales et les prévisions théoriques.

Dans le troisième chapitre, nous avons adopté des méthodes semi-empiriques basées sur la normalisation des données expérimentales aux résultats correspondants de la théorie *ECPSSR* pour calculer les sections efficaces semi-empiriques de production de la couche *M* des éléments lourds de numéro atomique $60 \leq Z \leq 90$ par des protons d'énergie comprise entre 0.1 et 4.0 MeV.

CHAPITRE I

RAPPELS THEORIQUES

1.1. Introduction :

Le 28 décembre 1895, Röntgen publie sa découverte dans un article intitulé « À propos d'une nouvelle sorte de rayons » dans le bulletin de la Société physico-chimique de Wurtzbourg. Il tire quatre conclusions dans son article :

1. Les rayons X sont absorbés par la matière, leur absorption est fonction de la masse atomique des atomes absorbants .
2. Les rayons X sont diffusés par la matière, c'est le rayonnement de fluorescence.
3. Les rayons X impressionnent la plaque photographique.
4. Les rayons X déchargent les corps chargés électriquement.

En minéralogie, on peut identifier divers cristaux à l'aide de la diffraction des rayons X. Les rayons X caractéristiques proviennent de la transition de l'électron atomique de son état initial vers un autre état plus lié de l'atome. Les rayons X sont une forme de rayonnement électromagnétique à haute énergie dont la longueur d'onde est comprise approximativement entre 5 picomètres et 10 nanomètres. L'énergie de ces photons va de quelques à plusieurs dizaines de KeV. Ces rayonnements sont utilisés dans de nombreuses applications dont l'imagerie médicale et la cristallographie. Les rayons X ont été découverts en 1895 par le physicien allemand Wilhelm Röntgen, qui a reçu pour cela le premier prix Nobel de physique ; il les nomma ainsi car ils étaient d'une nature inconnue (la lettre *X* désigne l'inconnue en mathématiques).

1.2. Production des rayons X :

Les rayons X sont des rayonnements électromagnétiques comme les ondes radio, la lumière visible, ou les infrarouge. Cependant, ils peuvent être produits de deux manières très spécifiques :

- Les rayons X sont produits par des transitions électroniques faisant intervenir les couches internes, proches du noyau ; l'excitation donnant la transition peut être provoquée par des photons ou bien par un bombardement de particules chargées, c'est notamment le principe de la spectrométrie de fluorescence X.

- Par décélération de particules chargées dans la matière ; dans le cas d'un tube à rayons X, on a à la fois un rayonnement continu (*Bremsstrahlung*) et un phénomène de fluorescence de la cible.

1.3. L'atome dans la mécanique quantique:

Un atome est composé d'un ensemble d'électrons tournant autour d'un noyau. L'état d'un électron, *appelé orbitale*, est caractérisé par 4 nombres quantiques entiers :

- **nombre quantique principal n (positif)**, on nomme couches M,N,O,... l'ensemble des électrons caractérisés par $n = 3,4,5, \dots$ où les moments sont exprimés en unités de \hbar .
- **nombre quantique orbital l ($0 \leq l \leq n-1$)**, On appelle sous-couches s,p,d,f,... les états caractérisés par $l = 0,1,2,3,\dots$. Chaque sous-couche comprend, au maximum, $2(2l+1)$ électrons.
- **nombre quantique magnétique m ($-l \leq m \leq l$)** qui détermine l'orientation du volume de déplacement par rapport à une direction arbitraire $z'z$ appelé axe de quantification généralement du à un champ magnétique. Dans le modèle mécanique, ce nombre croît au fur et à mesure que le plan orbital devient normal à l'axe de quantification.
- **nombre quantique interne j** peut prendre toutes les valeurs entières positives de $|l - s|$ à $|l + s|$ où s est le nombre quantique de spin ($s = \pm 1/2$).

1.4. Transitions électroniques :

Le passage d'un état d'énergie à un autre s'effectue grâce à un saut énergétique. Pour faire passer un électron de son état fondamental à un autre état excité, il faut lui fournir une énergie égale, au minimum, à la différence entre les deux niveaux d'énergie impliqués dans cette transition. Cependant toutes les transitions ne sont pas possibles. Celles qui sont possibles peuvent être résumées par les règles de sélection basées sur les variations des nombres quantiques des états électroniques (bien que pour certains éléments, des raies interdites soient observées). Pour un atome d'hydrogène [Ba.72]:

- aucune restriction sur la variation de n
- $\Delta l = \pm 1 ; \Delta m = 0 \text{ ou } \pm 1 ; \Delta s = 0$ (I.4.1)

Pour une molécule diatomique:

- $\Delta n = \pm 1 ; \Delta j = \pm 1 ; \Delta m = 0 \text{ ou } \pm 1$ (I.4.2)

Le principe d'exclusion de Pauli exprime que 2 électrons ne peuvent avoir les mêmes nombres quantiques sur la même orbitale d'un atome (qui correspond aux 3 premiers nombres quantiques identiques), 2 électrons doivent avoir des « spins » opposés ou antiparallèles. On représente un tel état atomique par la notation : $n^{2S+1} X_J$ dans laquelle n est le nombre quantique principal de l'électron le plus extérieur et X , par analogie avec la notation s, p, d, f s'écrit S pour $L = 0$, P pour $L = 1$, D pour $L = 2$ et F pour $L = 3 \dots$, $2S+1$: est la multiplicité de spin, elle est à l'origine des lignes spectrales multiples (exemple du doublet à 5896 Å du sodium dont l'état fondamental est $3^2S_{1/2}$), on parle d'ailleurs d'état singlet, doublet ou triplet. L'état le plus stable d'un électron est appelé *état fondamental*. Les niveaux de transition sont donnés dans le tableau I.1 en utilisant les notations empirique et quantique.

Tableau I.1 : Niveaux de transition en notations empiriques et quantiques.

Notation empirique	L	j	Notation quantique
M_1	0	1/2	$3p_{1/2}$
M_2	1	1/2	$3p_{3/2}$
M_3	1	3/2	$3d_{3/2}$
M_4	2	3/2	$3d_{5/2}$
M_5	2	5/2	$4s_{1/2}$
N_1	0	1/2	$4p_{1/2}$
N_2	1	1/2	$4p_{3/2}$
N_3	1	3/2	$4d_{3/2}$
N_4	2	3/2	$4d_{5/2}$
N_5	2	5/2	$4f_{5/2}$
N_6	3	5/2	$4f_{7/2}$
N_7	3	7/2	

L'atome retrouve sa stabilité par «réorganisation interne» ; des électrons des couches plus externes que celles des électrons éjectés « ou primaires », vont venir combler les états vacants en libérant la différence d'énergie entre les couches de départ et d'arrivée de l'électron sous forme de rayonnement électromagnétique de haute énergie (photon X).

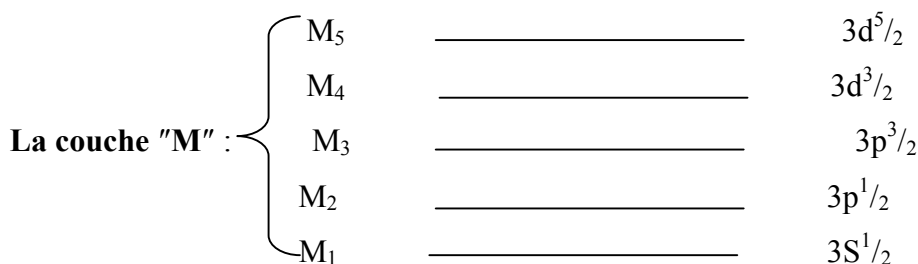
I.5. Règles de sélection :

Toutes les transitions électroniques ne sont pas équiprobables, les transitions permises sont d'origine dipolaire électrique et obéissent aux règles de sélection quantiques suivantes :

$$\begin{aligned} \Delta n &\geq 1 \\ \Delta j &= 0 \text{ ou } \pm 1 \\ \Delta l &= \pm 1 \end{aligned} \tag{I.5.1}$$

Pour la couche M qui comporte cinq sous-couches (M_1, M_2, M_3, M_4, M_5), on a $n = 3$ et $s = 1/2$ (I.5.2)

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



Pour la couche N qui comporte sept sous-couches ($N_1, N_2, N_3, N_4, N_5, N_6, N_7$), on a $n = 4$ et $s = 1/2$

- $0 \leq \ell \leq n-1, \quad \ell = 0, 1, 2, 3.$
- $|\ell - s| \leq j \leq |\ell + s|, \quad [j = 3/2, 5/2 \text{ (pour } \ell=3), j = 3/2, 1/2 \text{ (pour } \ell=1), j = 1/2 \text{ (pour } \ell=0), \dots].$
- $4S_{1/2}, 4P_{1/2}, 4P_{3/2}, 4d_{3/2}, 4d_{5/2}, 4f_{5/2}, 4f_{7/2}.$ (I.5.3)

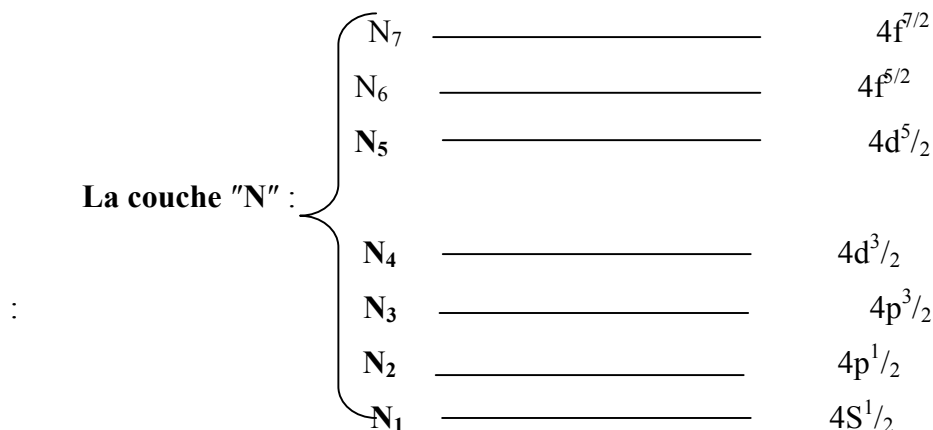


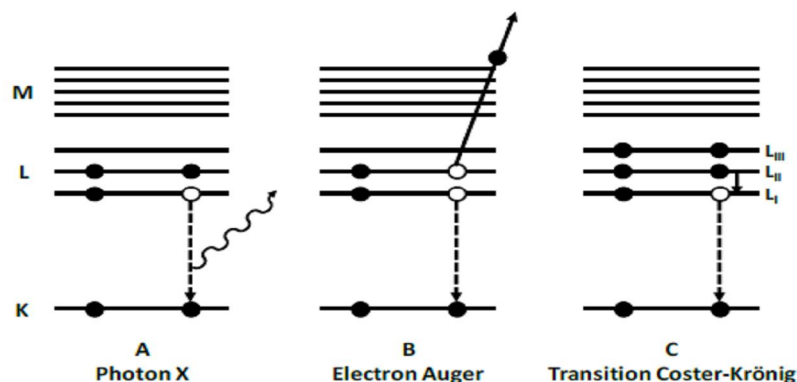
Figure (I.1) : Diagramme des niveaux d'énergie en notations empiriques et quantiques.

I.6. Emission de rayons X :

Le processus physique conduisant à l'émission des rayons X à lieu en trois étapes :

- Excitation et ionisation des niveaux atomiques internes.
- Transition d'un électron plus externe vers la lacune produite suite au réarrangement électronique.
- Dissipation de la différence d'énergie entre les deux niveaux impliqués dans la transition.

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



Figure(I.2): Désexcitation par A-émission d'un photon X, B-émission d'un électron Auger, C-transition de Coster-Kronig [So.10].

I.7. Spectrométrie de fluorescence X :

Elle est utilisée pour déterminer la composition élémentaire d'un échantillon car le spectre de fluorescence X obtenu dépend très peu de l'arrangement chimique des éléments. Il s'agit d'une méthode spectroscopique non destructive de l'échantillon. L'ionisation des atomes, préalable à l'émission de fluorescence, est assurée par bombardement de l'échantillon par un rayonnement X primaire ou par particules chargées.

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

$$\omega_x = I_x / n_x \tag{I.7.1}$$

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

$$\omega_i^X = I_i^X / n_i^X \quad (\text{I.7.2})$$

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

$$\bar{\omega}_X = \sum_{i=1}^k N_i^X \omega_i^X \quad (\text{I.7.3})$$

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

$$N_i^X = n_i^X / \sum n_i^X \text{ Et } \sum_{i=1}^k N_i^X = 1 \quad (\text{I.7.4})$$

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

$$\begin{aligned} V_1^X &= N_1^X \\ V_2^X &= N_2^X + f_{12}^X N_1^X \\ V_3^X &= N_3^X + f_{23}^X N_2^X + (f_{13}^X + f_{12}^X f_{23}^X) N_1^X, \\ V_k^X &= N_k^X + f_{k-1,k}^X N_{k-1}^X + (f_{k-2,k-1}^X f_{k-1,k}^X) N_{k-2}^X + \dots + (f_{1k}^X + f_{12}^X f_{2k}^X + f_{12}^X f_{23}^X f_{3k}^X + \dots) N_1^X \end{aligned} \quad (\text{I.7.5})$$

Les probabilités de transitions Coster-Kronig pour une sous-couche (M_1, M_2, M_3, M_4, M_5) de la couche M sont données comme suit :

$$\begin{aligned} V_1 &= N_1, \\ V_2 &= N_2 + f_{12} N_1, \\ V_3 &= N_3 + f_{23} N_2 + (f_{13} + f_{12} f_{23}) N_1, \\ V_4 &= N_4 + f_{34} N_3 + (f_{24} + f_{23} f_{34}) N_2 + (f_{14} + f_{13} f_{34} + f_{12} f_{24} + f_{12} f_{23} f_{34}) N_1, \\ V_5 &= N_5 + f_{45} N_4 + (f_{35} + f_{34} f_{45}) N_3 + (f_{25} + f_{24} f_{45} + f_{23} f_{35} + f_{23} f_{34} f_{45}) N_2 + \\ & (f_{15} + f_{14} f_{45} + f_{13} f_{35} + f_{12} f_{25} + f_{13} f_{34} f_{45} + f_{12} f_{24} f_{45} + f_{12} f_{23} f_{35} + f_{12} f_{23} f_{34} f_{45}) N_1 \end{aligned} \quad (\text{I.7.6})$$

I.8. Section efficace :

En physique nucléaire ou en physique des particules, la section efficace est une grandeur physique reliée à la probabilité d'interaction d'une particule pour une réaction donnée. L'unité de section efficace est le barn (b) : $1 \text{ b} = 10^{-24} \text{ cm}^2 = 10^{-28} \text{ m}^2$. La section efficace est peu dépendante de la taille réelle de la particule en question et varie surtout en fonction de la nature exacte de la collision ou de la réaction, et des interactions existantes entre les particules concernées. Ceci explique l'emploi de l'expression *section efficace* au lieu de *section* plus simplement.

I.8.1. Section efficace d'ionisation :

L'approximation de Born ([Ba.73b], [Be.78]) a été utilisée dans la théorie de la diffusion pour décrire l'interaction entre la particule chargée incidente (par exemple un proton) et l'atome cible. On considère que cette interaction se fait via la seule interaction coulombienne entre le noyau de la particule incidente et les électrons de la cible. Pour pouvoir appliquer l'approximation de Born, nous devons faire quelques hypothèses:

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

Si nous utilisons l'approximation de Born pour décrire l'ionisation d'un atome par une particule chargée l'expression de la section efficace différentielle d'ionisation pour des électrons d'énergie comprise entre ε et $\varepsilon + d\varepsilon$ prend la forme :

$$d^2\sigma = 8\pi Z_1^2 \left(\frac{e^2}{\hbar V_1} \right)^2 \frac{|F_{\varepsilon,s}(q)|^2 dq}{q^3} d\varepsilon \quad (\text{I.8.1})$$

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

Introduisons maintenant les variables sans dimensions :

$$W Z_{2S}^2 R = \varepsilon = T + I_S, \quad K = a_s k, \quad \text{et} \quad Q = (a_s q)^2 \quad (\text{I.8.2})$$

Où $a_s = a_0 / Z_{2S}$ représente le rayon de la couche atomique considérée, a_0 : rayon de Born,

Z_{2S} : est la charge effective moyen de l'atome cible vue par un électron de l'orbite

$S, T = \frac{t^2 k^2}{2m}$: 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, R : est la constante de Rydberg.

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

$$\begin{aligned}\sigma_S^{PWBA}(\eta_S, \theta_S) &= \frac{\sigma_{0S}}{\eta_S} \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} dW \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} |F_{W,S}(Q)|^2 \frac{dQ}{Q^2} \\ &= \frac{\sigma_{0S}}{\eta_S} f_S(\eta_S, \theta_S),\end{aligned}$$

Avec :

$$\sigma_{0S} = 8\pi a_0^2 \frac{Z_1^2}{Z_{2S}^4} \quad (\text{I.8.3})$$

et

$$\begin{aligned}f_S(\eta_S, \theta_S) &= \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} dW \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} |F_{W,S}(Q)|^2 \frac{dQ}{Q^2} \\ \eta_S &= \frac{m_e E}{M_1 Z_{2S}^2 R} = \frac{1}{Z_{2S}^2} \left(\frac{\hbar V_1}{e^2} \right)^2\end{aligned} \quad (\text{I.8.4})$$

$F_{W,S}(Q)$ 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 bornes d'intégration Q_{\min} , Q_{\max} , W_{\min} , W_{\max} sont déterminées pour une couche quelconque S par :

$$Q_{\min} = \frac{\mu^2 \eta_S}{m_e} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{m_e W}{\eta_S \mu}} \right)^2 \quad (\text{I.8.5})$$

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

$$W_{\min} = \frac{\varepsilon_{\min}}{Z_{2S}^2 R} = \frac{I_S}{Z_{2S}^2 R} = \frac{\theta_S}{n^2} \quad (\text{I.8.6})$$

$$W_{\max} = \frac{\varepsilon_{\max}}{Z_{2S}^2 R} = \frac{E}{Z_{2S}^2 R} = \frac{\mu}{m_e} \eta_S$$

Avec :

$$\theta_S = n^2 \frac{I_S}{Z_{2S}^2 R} \quad (\text{I.8.7})$$

1.8.2. Section efficace de production :

Les sections efficaces de production et les sections efficaces d'ionisation des sous-couches (M_1, M_2, M_3, M_4, M_5) de la couche M sont liées par des relations simples faisant

intervenir les rendements de fluorescence et les probabilités de transition de Coster-Kronig [Ch.84],[Mc.72] et[Ba.72]:

$$\begin{aligned}
\sigma_{M_1}^x &= \sigma_{M_1}^I \omega_1 \\
\sigma_{M_2}^x &= [\sigma_{M_2}^I + S_{12} \sigma_{M_1}^I] \omega_2 \\
\sigma_{M_3}^x &= [\sigma_{M_3}^I + S_{23} \sigma_{M_2}^I + (S_{13} + S_{12} S_{23}) \sigma_{M_1}^I] \omega_3 \\
\sigma_{M_4}^x &= [\sigma_{M_4}^I + S_{34} \sigma_{M_3}^I + (S_{24} + S_{23} S_{34}) \sigma_{M_2}^I + (S_{14} + S_{12} S_{24} + S_{13} S_{34} + S_{12} S_{23} S_{34}) \sigma_{M_1}^I] \omega_4 \\
\sigma_{M_5}^x &= [\sigma_{M_5}^I + f_{45} \sigma_{M_4}^I + (S_{35} + S_{34} f_{45}) \sigma_{M_3}^I + (S_{25} + S_{23} S_{35} + S_{24} f_{45} + S_{23} S_{34} f_{45}) \sigma_{M_2}^I \\
&\quad + (S_{15} + S_{12} S_{25} + S_{13} S_{35} + S_{14} f_{45} + S_{12} S_{23} S_{35} + S_{12} S_{24} f_{45} + S_{13} S_{34} f_{45} + \\
&\quad S_{12} S_{23} S_{34} f_{45}) \sigma_{M_1}^I] \omega_5
\end{aligned} \tag{I.8.8}$$

De plus, la section efficace totale de production de rayon X peut s'écrire :

$$\sigma_M^x = \sum_{i=1}^5 \sigma_{M_i}^x = \sum_{i=1}^5 v_i \sigma_{M_i}^I \tag{I.8.9}$$

avec :

$$\begin{aligned}
v_1 &= \omega_1 + S_{12} \omega_2 + (S_{13} + S_{12} S_{23}) \omega_3 + (S_{14} + S_{12} S_{24} + S_{13} S_{34} + S_{12} S_{23} S_{34}) \omega_4 + \\
&\quad (S_{15} + S_{12} S_{25} + S_{13} S_{35} + S_{14} f_{45} + S_{12} S_{23} S_{35} + S_{12} S_{24} f_{45} + S_{13} S_{34} f_{45} + S_{12} S_{23} S_{34} f_{45}) \omega_5, \\
v_2 &= \omega_2 + S_{23} \omega_3 + (S_{24} + S_{23} S_{34}) \omega_4 + (S_{25} + S_{23} S_{35} + S_{24} f_{45} + S_{23} S_{34} f_{45}) \omega_5, \\
v_3 &= \omega_3 + S_{34} \omega_4 + (S_{35} + S_{34} f_{45}) \omega_5, \\
v_4 &= \omega_4 + f_{45} \omega_5, \\
v_5 &= \omega_5,
\end{aligned} \tag{I.8.10}$$

D'autre part, la section efficace de production de la couche M peut être liée à la section efficace totale d'ionisation par la relation suivante:

$$\sigma_M^x = \bar{\omega}_M \sigma_M^I \tag{I.8.11}$$

Où $\bar{\omega}_M$ est le rendement moyen de fluorescence de la couche M défini comme :

$$\bar{\omega}_M = \sum_{i=1}^5 w_i v_i \tag{I.8.12}$$

et

$$w_i = \sigma_{M_i}^I / \sigma_M^I \tag{I.8.13}$$

I.9. Modèle quantique PWBA :

On considère une collision élastique entre un faisceau de particules incidentes (projectiles), de masse M_1 et de charge Z_1 , et un atome de masse M_2 et de charge Z_2 , c'est-à-dire l'état final est composé des mêmes particules que l'état initial.

La particule incidente pénètre dans la zone d'action de la cible où le système passe d'un état initial composé de projectile comme une onde plane et de l'électron lié à l'atome cible à un état final composé de projectile comme une onde diffusée et de l'électron éjecté dans le continuum. Donc, la fonction d'onde du système peut être écrite comme le produit de la fonction d'onde du projectile, $\varphi(\vec{r}_1)$, et celle de l'électron cible, $\phi(\vec{r}_2)$, on pose alors :

$$\psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_i(\vec{r}_1) \phi_i(\vec{r}_2)$$

et

$$\psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_f(\vec{r}_1) \phi_f(\vec{r}_2) \quad (\text{I.9.1})$$

Où \vec{r}_1 et \vec{r}_2 sont, respectivement, les vecteurs positions du projectile et de l'électron atomique par rapport à l'atome cible supposé fixe. De plus, on se place dans le système du centre de masse, c'est-à-dire que l'on considère la diffusion d'une particule unique par le potentiel $\mathbf{V}(\mathbf{r})$ dont la masse est μ (masse réduite du système) définie comme :

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \quad (\text{I.9.2})$$

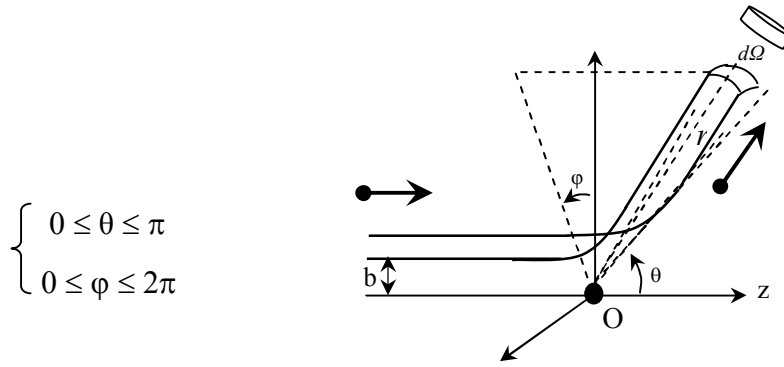
Où M_1 et M_2 sont respectivement la masse de la particule incidente et celle de la cible.

On définit alors la section efficace différentielle de diffusion $\sigma(\theta, \varphi)$ comme:

$$dn = F_i \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \quad (\text{I.9.3})$$

Avec dn étant le nombre de particules détectées, F_i le flux incident de particules et $d\Omega$ l'angle solide de détection donnée par la relation :

$$d\Omega = \sin\theta \, d\theta \, d\varphi \quad (\text{I.9.4})$$



$$\begin{cases} 0 \leq \theta \leq \pi \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi \end{cases}$$

Figure (I.3) : Processus de diffusion .

Comme il s'agit d'une collision élastique, l'énergie de la particule diffusée dans le référentiel du centre de masse reste constante et elle est égale à l'énergie de la particule incidente :

$$E = \hbar^2 k^2 / 2\mu \quad (\text{I.9.5})$$

Nous allons maintenant calculer la section efficace de diffusion en résolvant l'équation de Schrödinger qui s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) \right] \quad (\text{I.9.6})$$

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

$$\chi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})e^{\frac{iEt}{\hbar}} \quad (\text{I.9.7})$$

Où $\varphi(\vec{r})$ est solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

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

$$\varphi_i(\vec{r}) = e^{ik_i\vec{r}} \quad (\text{I.9.8})$$

Solution de l'équation :

$$(\Delta + k_i^2)\varphi_i(\vec{r}) = 0 \quad (\text{I.9.9})$$

On pose:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad \text{et} \quad V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2\mu} U(\vec{r}) \quad (\text{I.9.10})$$

L'équation de Schrödinger devient alors

$$(\Delta + k^2)\varphi(\vec{r}) = U(\vec{r})\varphi(\vec{r}) \quad (\text{I.9.11})$$

La solution de l'équation (I.9.11) s'écrit :

$$\varphi(\vec{r}) = \varphi_i(\vec{r}) + \int G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \varphi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{I.9.12})$$

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

$$(\Delta + k^2)G(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{I.9.13})$$

Le problème essentiel réside maintenant dans la détermination de la fonction de Green, solution de l'équation (I.9.13). L'examen de cette équation nous montre que la fonction de Green doit être nulle pour toutes les valeurs de \vec{r} différentes de zéro.

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

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{e^{ik_i |\vec{r} - \vec{r}'|}}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (\text{I.9.14})$$

On utilisera la relation suivante :

$$\Delta\left(\frac{1}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|}\right) = -\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{I.9.15})$$

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

$$\Delta G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{k_i^2 e^{ik_i |\vec{r} - \vec{r}'|}}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} - \frac{ik_i e^{ik_i |\vec{r} - \vec{r}'|}}{2\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2} + \delta(\vec{r} - \vec{r}') e^{ik_i |\vec{r} - \vec{r}'|} + \frac{2}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2} (ik_i e^{ik_i |\vec{r} - \vec{r}'|}) \quad (\text{I.9.16})$$

Ce qui conduit à la relation :

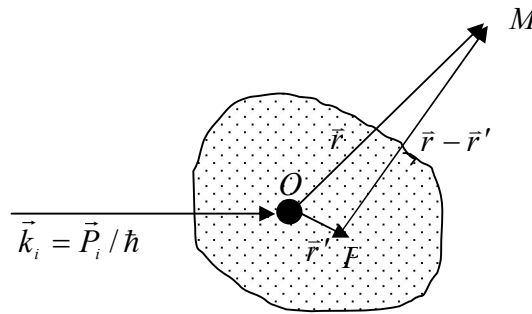
$$\Delta G(\vec{r} - \vec{r}') = -k_i^2 G(\vec{r} - \vec{r}') + \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{I.9.17})$$

Donc, la solution choisie est bien une solution de l'équation (I.9.13).

En utilisant les équations (I.9.12) et (I.9.14), la solution de l'équation (I.9.11) prend forme :

$$\varphi(\vec{r}) = \varphi_i(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik_i|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \varphi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{I.9.18})$$

Le phénomène de diffusion est schématisé sur a figure(I.4); la particule incidente diffuse à l'extérieur de la zone d'action du potentiel créé par la particule cible où:



Figure(I.4): zone d'action du potentiel créé par la cible.

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

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

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

La zone d'action précédemment définie est petite par rapport à la distance \vec{r} (position du détecteur), ceci nous permet de prendre une valeur approchée du dénominateur de l'équation (I.9.18):

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = [r^2 + r'^2 - 2\vec{r}\vec{r}']^{1/2} = r \left[\mathbf{1} + \frac{r'^2}{r^2} - \frac{2\vec{r}\vec{r}'}{r^2} \right]^{1/2} \approx r \left[\mathbf{1} - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2} \right] \quad (\text{I.9.19})$$

L'onde sphérique de l'intégrand devient ainsi :

$$\frac{e^{ik_i|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = \frac{e^{ik_i r \left(1 - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2}\right)}}{r \left(1 - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2}\right)} \approx \frac{e^{ik_i r}}{r} e^{-ik_i \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r}} \quad (\text{I.9.20})$$

Le vecteur impulsion émergeant est défini comme suit :

$$\vec{k}_f = k_i \frac{\vec{r}}{r} \quad (\text{I.9.21})$$

L'onde émergente prend la forme suivante :

$$\varphi(\vec{r}) = \varphi_i(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_i r}}{r} \int e^{-i\vec{k}_f \vec{r}'} V(\vec{r}') \varphi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{I.9.22})$$

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

$$\varphi(\vec{r}) = \varphi_i(\vec{r}) + f \frac{e^{ik_i r}}{r} \quad (\text{I.9.23})$$

Où f est l'amplitude de diffusion exprimée en fonction du vecteur d'onde \vec{k}_f de la particule diffusée :

$$f = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}_f \vec{r}'} V(\vec{r}') \varphi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{I.9.24})$$

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

$$f = f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \varphi_f | V | \varphi_i \rangle \quad (\text{I.9.25})$$

I.10. Facteur de forme de la couche M :

Les facteurs de forme $F_{W,S}(Q)$ pour les sous-couches M_i ont été calculés en utilisant des fonctions d'onde hydrogénoïdes non relativistes. Conformément au calcul de Choi [Ch.73], ils peuvent être construits sous la forme :

$$\frac{dQ}{Q^2} |F_{W,3l}(Q)|^2 = A(Q,k) S_{3l}(W,Q), \quad (\text{I.10.1})$$

où $S = 3l = 3s, 3p, 3d$.

Les notations spectroscopiques, en adoptant la représentation $3lj$, des états propres d'énergie sont $3s_{1/2}$, $3p_{1/2}$, $3p_{3/2}$, $3d_{3/2}$, $3d_{5/2}$, correspondant aux M_1 , M_2 , M_3 , M_4 , M_5 , respectivement. D'ailleurs, les fonctions universelles $F_{W,3lj}(Q)$ pour $(2j+1)$ électrons dans les sous-couches M_i sont obtenues à partir des fonctions $F_{W,3l}(Q)$ des états propres du moment angulaire orbital, $3s$, $3p$ et $3d$ et peuvent prendre la forme suivante :

$$|F_{W,3lj}(Q)|^2 = \frac{2j+1}{2(2l+1)} |F_{W,3l}(Q)|^2, \quad (\text{I.10.2})$$

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

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

$$A(Q,k) = \frac{2^7 \exp \left[-\frac{2}{k} \arctan \left(\frac{2k/3}{Q - k^2 + 1/9} \right) \right]}{9 \left[1 - \exp \left(\frac{-2\pi}{k} \right) \right] \left[\left(Q - k^2 + 1/9 \right)^2 + \frac{4}{9} k^2 \right]^7}. \quad (\text{I.10.3})$$

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

$$\exp \left[-\frac{2}{k} \arctan \left(\frac{2k/3}{Q - k^2 + 1/9} \right) \right] = \left[\frac{Q + k_1^2 + 1/9 - 2k_1/3}{Q + k_1^2 + 1/9 + 2k_1/3} \right]^{1/k_1}, \quad (\text{I.10.4})$$

où $k = ik_1$.

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

$$\begin{aligned}
 S_{M_1} &= \frac{1}{Q} \sum_{i=0}^9 \sum_{j=0}^9 C_{ij}^{3s} k^{2i} Q^j, \\
 S_{M_2} &= \frac{1}{3Q} \sum_{i=0}^8 \sum_{j=0}^8 C_{ij}^{3p} k^{2i} Q^j, \\
 S_{M_3} &= \frac{2}{3Q} \sum_{i=0}^8 \sum_{j=0}^8 C_{ij}^{3p} k^{2i} Q^j, \\
 S_{M_4} &= \frac{2}{5Q} \sum_{i=0}^7 \sum_{j=0}^7 C_{ij}^{3d} k^{2i} Q^j, \\
 S_{M_5} &= \frac{3}{5Q} \sum_{i=0}^7 \sum_{j=0}^7 C_{ij}^{3d} k^{2i} Q^j,
 \end{aligned} \tag{I.10.5}$$

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

Le changement de coordonnées d'intégration, en utilisant des transformations logarithmiques ($X = \ln W$ et $Y = \ln Q$) [Li.96], rend aisé le calcul du facteur de forme et donc l'exécution du programme devient plus rapide. Les limites exactes de l'intégration du facteur de forme deviennent alors:

$$f_s((\eta_s, \theta_s)) = \int_{\ln W_{\min}}^{\ln W_{\max}} dX \int_{\ln Q_{\min}}^{\ln Q_{\max}} e^X \frac{dy}{e^Y} |F_{X,s}(Y)|^2, \tag{I.10.6}$$

avec

$$\ln Q_{\min} = \ln \left(M^2 \eta_s \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\ln W}{\eta_s M}} \right)^2 \right), \tag{I.10.7}$$

et

$$\ln Q_{\max} = \ln \left(M^2 \eta_s \left(1 + \sqrt{1 - \frac{\ln W}{\eta_s M}} \right)^2 \right). \tag{I.10.8}$$

CHAPITRE II

RESULTATS DES MODELES PWBA ET ECPSSR

II.1.Introduction:

Les interactions coulombiennes entre un faisceau de particules chargées et la matière donnent lieu à l'éjection d'électrons liés à l'atome. Ce sont ces interactions et leurs sections efficaces qui sont importantes pour la méthode d'analyse PIXE. Le modèle théorique le plus utilisé pour décrire l'ionisation d'un atome par une particule chargée est l'approximation d'onde plane de Born (PWBA - Plane Wave Born Approximation). Le modèle PWBA, qui applique la théorie de la perturbation pour la transition d'un état initial (projectile décrite par une onde plane et un électron lié à l'atome) à un état final (projectile décrite par une onde diffusée et un électron éjecté dans le continuum), a été développé principalement par Basbas et al. [2]. Ces auteurs ont incorporé une série de modifications afin de corriger la théorie PWBA donnant naissance au modèle ECPSSR. Ce dernier prend en compte la déviation du projectile par le champ coulombien dû au noyau (C), la perturbation des états stationnaires atomiques par le projectile (PSS), les effets relativistes (R) et la perte d'énergie de l'ion incident durant la collision (E).

II.2. Résultats du modèle PWBA :

Sur la figure (II.1) est représenté le rapport des sections efficaces totales de production expérimentales ([Se.80], [Me.82], [Me.83], [Pa.90a], [Pa.06], [Ci.95], [Sh.86] [Ro.02], [Go.06], [Ph.09]) et théoriques, calculées dans le cadre du modèle PWBA, de la couche M pour différents atomes cibles de numéros atomiques $60 \leq Z \leq 90$ en fonction de l'énergie du proton incident allant de 0.1 à 4.0 MeV.

On remarque que nos résultats théoriques surestiment les sections efficaces expérimentales et ceci augmente surtout à basse énergie des protons pour atteindre quelques ordres de grandeur.

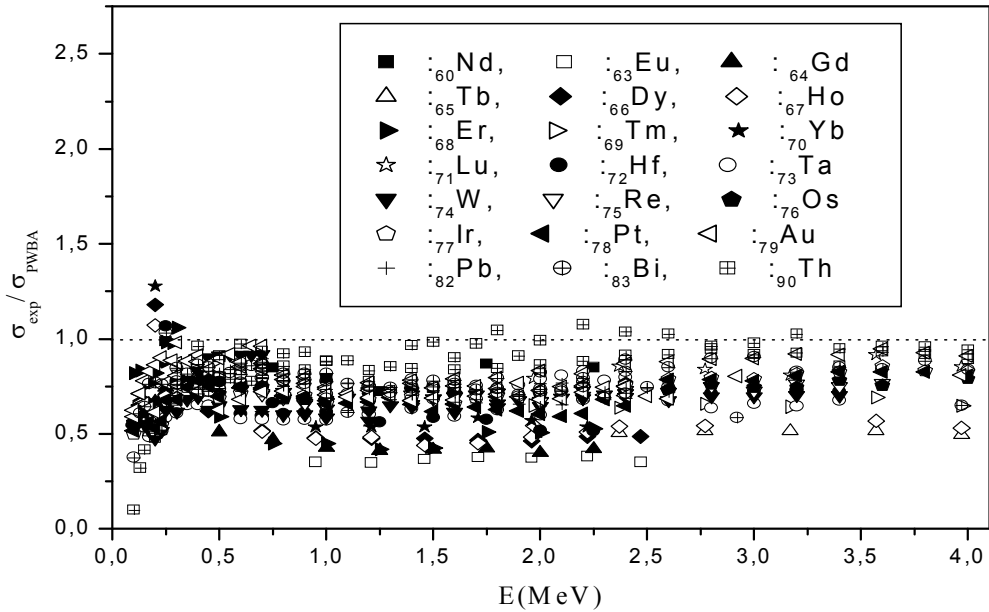


Figure (II.1) : Rapport entre les sections efficaces totales de production expérimentales et théoriques (PWBA) dans la couche M pour différents cibles en fonction de l'énergie des protons.

La surestimation peut être réduite si on tient compte d'effets qui n'apparaissent pas directement dans l'approximation de Born : l'augmentation de l'énergie de liaison des électrons atomiques (PSS-Perturbed Stationary-State) ; la déviation coulombienne du projectile due à son interaction avec le noyau (C) ; les effets dus au caractère relativiste des électrons (R) et à la perte d'énergie de la particule incidente lors de l'ionisation (E). Toutes ces corrections successives ont mené à la formulation du modèle ECPSSR (Energy loss, Coulomb deflection, Perturbed Stationary State and Relativistic effects).

II.3. Modèle ECPSSR :

II.3.1. Correction de l'énergie de liaison :

Lors du processus d'ionisation, les états atomiques sont perturbés par le passage des particules chargées incidentes. Dans le régime à basse vitesse, c'est-à-dire pour $\xi_{M_i} \ll 1$, les états stationnaires perturbés de l'électron de l'atome cible deviennent ceux d'une molécule diatomique avec une distance internucléaire changeante. Quand $z_1 \ll z_2$, les états électroniques se rapprochent de ceux d'un atome de numéro atomique $z_1 + z_2$ qui peut

être décrit par l'approximation de Born[Ba.73a]. L'énergie de liaison des électrons atomiques augmente alors, ce qui a pour conséquence une diminution de la section efficace d'ionisation. Toutefois, pour les régimes de vitesse intermédiaire ($\xi_{M_i} \approx 1$) et élevé ($\xi_{M_i} \gg 1$), la contribution principale pour la section efficace d'une orbite s provient de particules se trouvant dans des zones extérieures à cette orbite. Cette particule chargée va perturber l'état stationnaire et entraîner un effet dit de polarisation qui aura comme conséquence une augmentation de la section efficace. On peut prendre en considération ces deux effets en corrigeant la section efficace de Born comme suit : [Ba.73], [Co.85]

$$\sigma_{M_i}^{PSS} = \sigma_{M_i}^{PWBA}(\xi_{M_i} / \zeta_{M_i}, \theta_{M_i} \zeta_{M_i}) \quad (II.2.1)$$

où le facteur ζ_{M_i} est défini comme suit [Ch.85], [Ch.83] et [Ch.89]:

$$\zeta_{M_i} = (1 + z_1 / z_{2M_i})^2 \quad (II.2.2)$$

II.3.2. Déflexion coulombienne :

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 (Fig. II.1). Cette différence énorme à basse énergie provient du fait que l'approximation de Born néglige l'influence de la répulsion entre le noyau de la particule incidente et de l'atome cible. Cette répulsion a pour conséquences un ralentissement de la particule incidente et une modification de sa trajectoire. On ne peut donc pas considérer la trajectoire des particules incidentes comme étant en ligne droite mais plutôt hyperbolique. On définit alors le coefficient $C_{M_i}(dq_{0M_i})$ qui représente la correction coulombienne [Ba.73], [Br.74] par la relation :

$$C_{M_i}(dq_{0M_i}) = (9 + 2l_2)E_{10+2l_2}(\pi dq_{0M_i}) \quad (II.2.3)$$

où d : est la demi-distance minimale d'approche dans une collision frontale, $l_2 = 0$ pour la sous couche M_1 , $l_2 = 1$ pour les sous-couche M_2 et M_3 , $l_2 = 2$ pour les sous couches M_4 et M_5 .

$d = \frac{2z_1 z_2 e^2}{\mu V_1^2}$, est la distance minimale d'approche du projectile au noyau cible, $q_{0M_i} = \frac{U_{M_i}}{V_1}$

est le moment minimal transféré à l'électron durant la collision et $E_m(y)$ représente l'intégrale exponentielle d'ordre m qui est évaluée par la relation :

$$E_m(y) = \frac{e^{-y}}{(y+m)} \left[1 + \frac{m}{(y+m)^2} + \frac{m(m-2y)}{(y+m)^4} + \frac{m(6y^2 - 8my + m^2)}{(y+m)^6} + \dots \right] \quad (\text{II.2.4})$$

La quantité q_{0M_i} peut être interprétée comme étant le rapport entre le temps caractéristique de diffusion coulombienne d/v_1 et le temps de transition électronique $1/w_{2s}$. La section efficace d'ionisation $\sigma_{M_i}^{CPSS}$ s'écrit alors :

$$\sigma_{M_i}^{CPSS} = C_{M_i} (dq_{0M_i}) \sigma_{M_i}^{PWBA} (\xi_{M_i} / \zeta_{M_i}, \theta_{M_i} \zeta_{M_i}) \quad (\text{II.2.5})$$

II.3.3. Correction relativiste :

Pour la couche M , il n'y a aucune formulation publiée au sujet de la correction relativiste de la masse de l'électron de la cible. Cette correction tient compte du caractère relativiste de l'électron des orbites internes des atomes de numéro atomique élevé. Une fois qu'on détermine la formulation de cette correction, $m_{M_i}^R(\xi_{M_i})$, il est facile de l'incorporer dans le programme de calcul et d'écrire la section efficace d'ionisation sous la forme :

$$\sigma_{M_i}^{ECPSSR} = C_{M_i}^E (dq_{0M_i} \zeta_{M_i}) \sigma_{M_i}^{PWBA} (\sqrt{m_{M_i}^R(\xi_{M_i})} \xi_{M_i} / \zeta_{M_i}, \theta_{M_i} \zeta_{M_i}). \quad (\text{II.2.6})$$

II.3.4. Correction de la perte d'énergie :

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

$$C_{M_i}^E (dq_{0M_i}) = (9 + 2l_2) E_{10+2l_2} \left(\frac{2\pi d q_{0M_i}}{z_{M_i} (1 + z_{M_i})} \right), \quad (\text{II.2.7})$$

où z_s , argument représente le rapport entre la perte d'énergie de la particule incidente et son énergie cinétique, est donné par [Ba.73]:

$$z_{M_i} = \sqrt{1 - \frac{4}{\mu \zeta_{M_i} \theta_{M_i}} \left(\frac{\xi_{M_i}}{\zeta_{M_i}} \right)^2}, \quad (II.2.8)$$

avec $\xi_{M_i} = 2V_1/\theta_{M_i} v_{M_i}$, appelée la vitesse réduite de la particule incidente, et V_1 et v_{M_i} sont les vitesses de la particule incidente et de l'électron de l'atome cible, respectivement.

On obtient finalement la section efficace d'ionisation dans la théorie ECPSSR:

$$\sigma_{M_i}^{ECPSSR} = C_{M_i}^E (dq_{0M_i}) \sigma_{M_i}^{PWBA} (\xi_{M_i} / \zeta_{M_i}, \theta_{M_i} \zeta_{M_i}) \quad (II.2.9)$$

Cette expression a été employée ici, pour calculer la section efficace d'ionisation et de production dans le cadre du modèle ECPSSR.

II.3.5. Résultats du modèle ECPSSR :

La figure (II.2) représente le rapport entre les sections efficaces totales de production expérimentales ([Se.80], [Me.82], [Me.83], [Pa.90a], [Pa.06], [Ci.95], [Sh.86] [Ro.02], [Go.06], [Ph.09]) et théoriques calculé dans un cadre du modèle ECPSSR pour des cibles de numéro atomique comprise entre 60 et 90 (${}_{60}\text{Nd}$, ${}_{65}\text{Tb}$, ${}_{68}\text{Er}$, ${}_{71}\text{Lu}$, ${}_{72}\text{Hf}$, ${}_{73}\text{Ta}$, ${}_{74}\text{W}$, ${}_{75}\text{Re}$, ${}_{76}\text{Os}$, ${}_{77}\text{Ir}$, ${}_{78}\text{Pt}$, ${}_{79}\text{Au}$, ${}_{82}\text{Pb}$, ${}_{83}\text{Bi}$ et ${}_{90}\text{Th}$) en fonction de l'énergie des protons pour la couche M. On peut remarquer que :

- les valeurs théoriques sont proches aux résultats expérimentaux pour les hautes énergies.
- les valeurs théoriques s'éloignent de façon significative des valeurs expérimentales pour les basses énergies.

Les données expérimentales proviennent de différentes sources, donc mesurées dans différentes conditions expérimentales ; ce qui explique leur dispersion. Les déviations observées à basse énergie sont attribuées probablement à plusieurs effets ; l'utilisation d'une expression approximative pour la correction de l'énergie de liaison ; l'effet relativiste, où il n'y

a aucune formulation a été publiée au sujet de cette correction ; le type des fonctions d'onde utilisées pour le calcul du facteur de forme (fonctions hydrogénoïdes). De plus, malgré les améliorations intégrées dans la théorie ECPSSR, des écarts persistent dans la gamme des basses énergies. Ceci a conduit les auteurs à adopter des méthodes semi-empiriques basées sur l'ajustement des données expérimentales disponibles et des résultats théoriques.

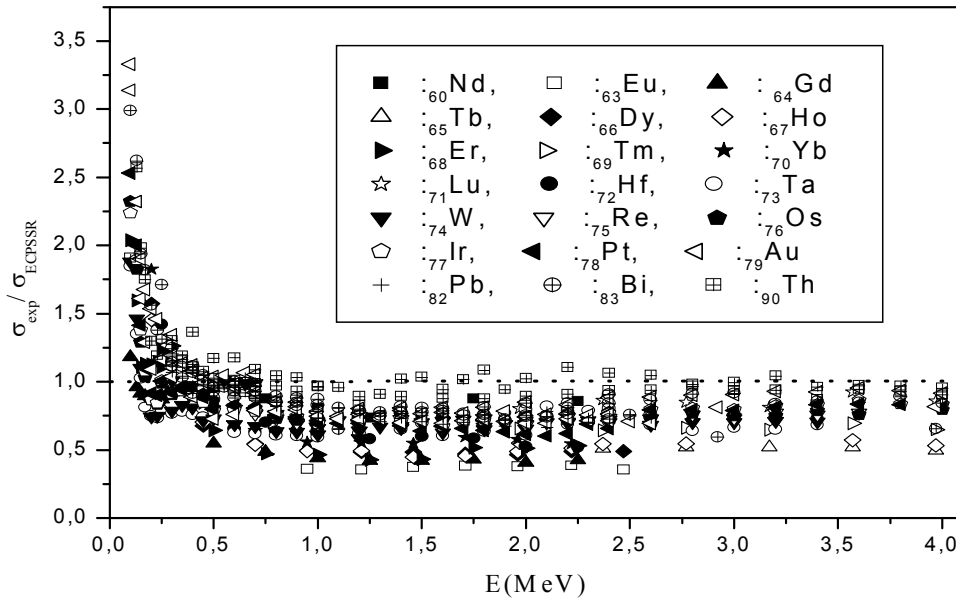


Figure (II.2) : Rapport entre les sections efficaces totales de production expérimentales et théoriques (ECPSSR) dans la couche M pour différents cibles en fonction de l'énergie des protons (présent travail).

CHAPITRE III

SECTIONS EFFICACES SEMI-EMPIRIQUES DE PRODUCTION DES COUCHES M

III.1.Introduction:

Avec le développement des détecteurs à semi-conducteur, des données expérimentales plus précises sont devenues disponibles pour les sections efficaces d'ionisation ou de production des raies M par impact d'ions légers [Bu.73] et lourds [Me.83]. Plus récemment, Pajek et al. [Pa.99] et Jaskola et al. [Ja.00] présentèrent leurs résultats pour la couche M pour des protons et des deutérons, respectivement, en traçant les sections efficaces mesurées de production des rayons X pour les raies M pour différents groupes du numéro atomique en fonction de la vitesse réduite ξ_M . L'utilisation des cibles minces dans ces expériences conduit à l'amélioration de la qualité de données expérimentales. Dans le chapitre précédent, nous avons comparé nos résultats du modèle ECPSSR avec ceux de l'expérience disponibles dans la littérature où l'accord est relativement bon à haute énergie du projectile alors qu'à basse énergie une grande déviation a été observé. Dans ce travail nous essayons de déduire des sections efficaces semi-empiriques de production des rayons X des raies M , basées sur l'ajustement direct des données expérimentales normalisées à leurs valeurs théoriques correspondantes calculées dans le cadre de la théorie ECPSSR de Brandt et Lapicki [Br.81], pour des éléments de numéros atomiques dans la gamme 60-90 par des protons d'énergie de 0.1 à 4.0 MeV.

III.2. Section efficace semi-empirique "référence" :

Tout d'abord, on définit les sections efficaces expérimentales normalisées de production des rayons X des raies M de la façon suivante :

$$S = \sigma_{\text{exp}} / \sigma_{\text{ECPSSR}} \quad (\text{III.2.1})$$

Où σ_{ECPSSR} : représente nos résultats théoriques de la section efficace de production de la couche M calculée dans le cadre de la théorie ECPSSR et σ_{exp} : est la section efficace de production expérimentale, à notre disposition, des éléments de numéros atomiques $60 \leq Z \leq 90$ qui sont rassemblées de différents sources ([Pa.06], [Pa.90], [Me.83], [Me.82], [Ci.95], [Sh.96], [Ro.02], [Go.06], [Se.80], [Ph.09] et [Sh.96] ; 658 données) par des protons

d'énergie allant de 0,1 à 0,4 MeV. Puis, on trace le rapport S entre les sections efficaces de production expérimentales et théoriques en fonction de la vitesse réduite de proton ξ_M de la couche M pour la gamme entière des éléments étudiés (fit collectif). Le paramètre ξ_M est donné par l'expression suivante [Ro.02] :

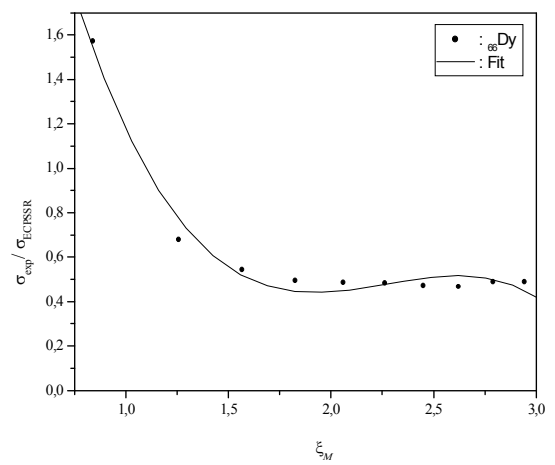
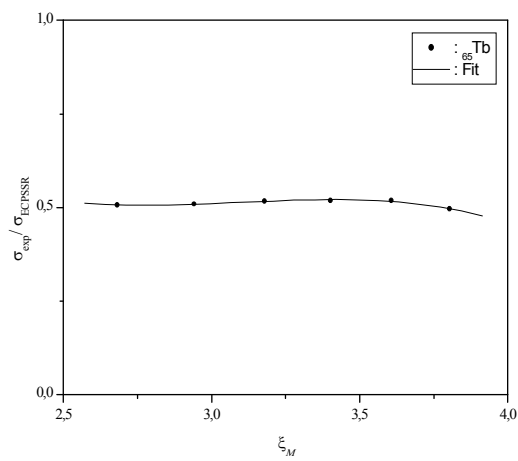
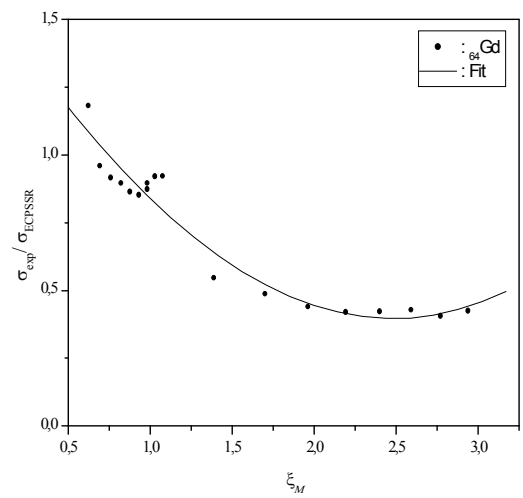
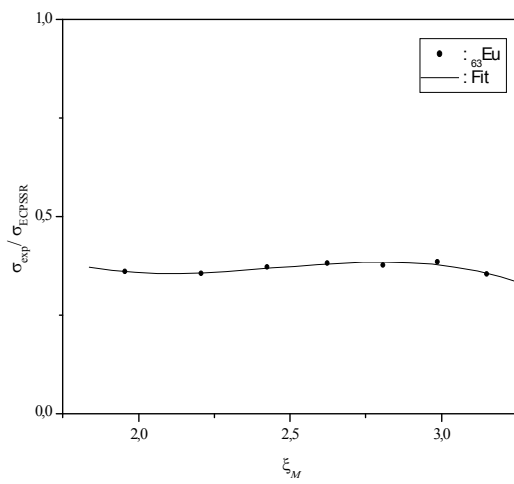
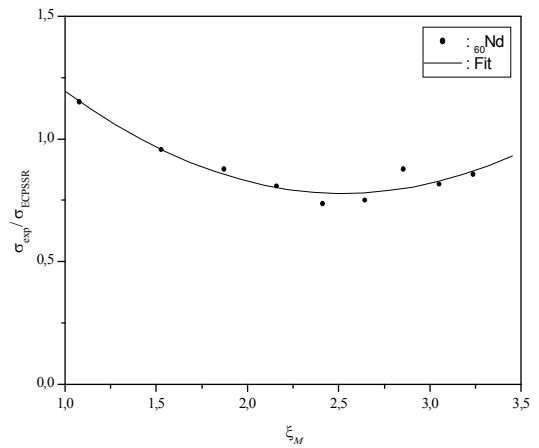
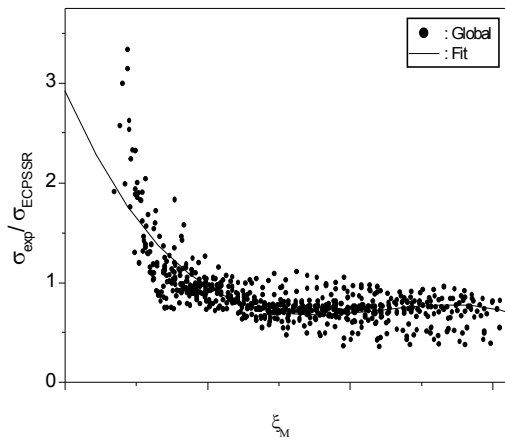
$$\xi_M = (\xi_{M_1} + \xi_{M_2} + 2\xi_{M_3} + 2\xi_{M_4} + 3\xi_{M_5})/9 \quad (\text{III.2.2})$$

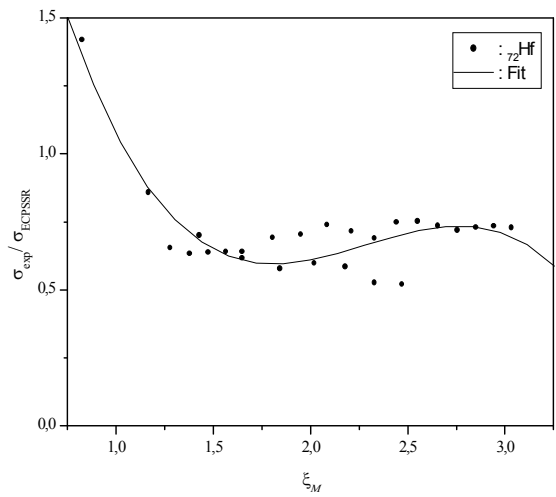
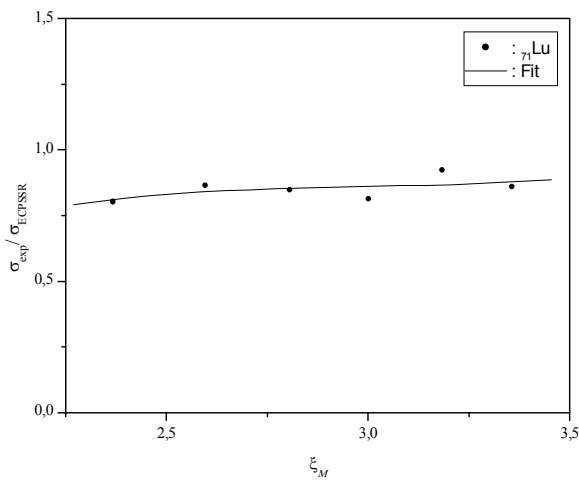
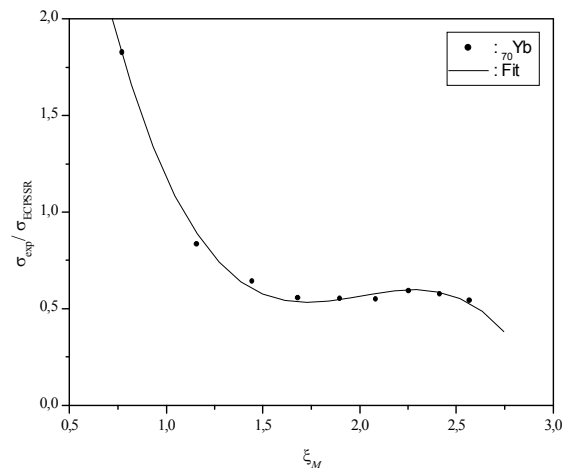
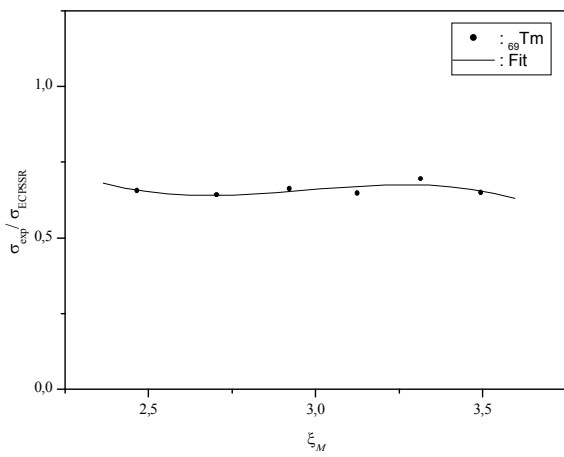
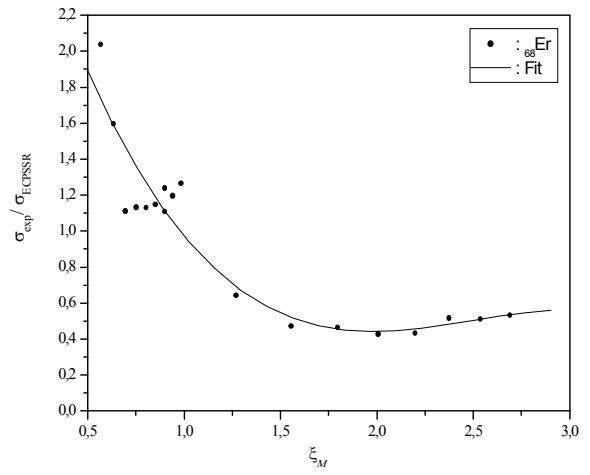
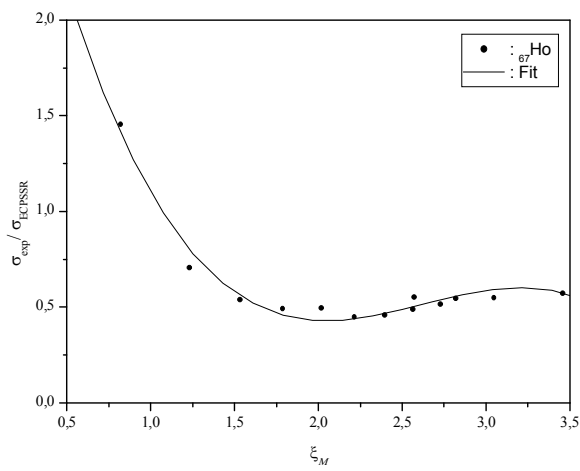
L'ensemble de ces rapports est ajusté par un polynôme d'ordre trois comme suit :

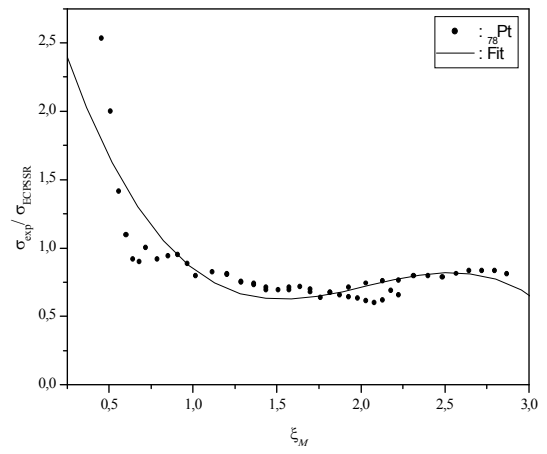
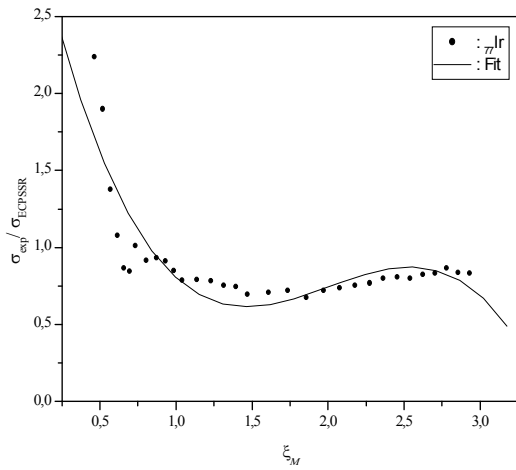
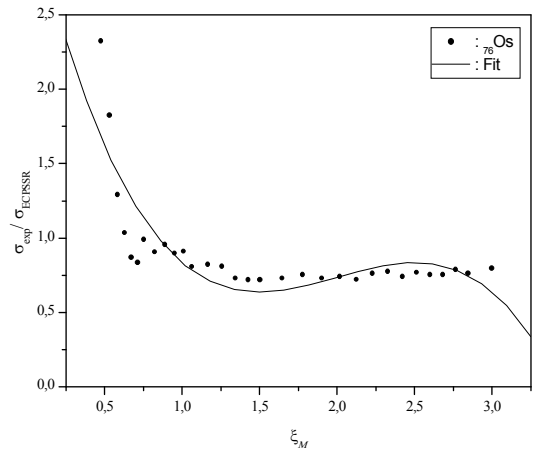
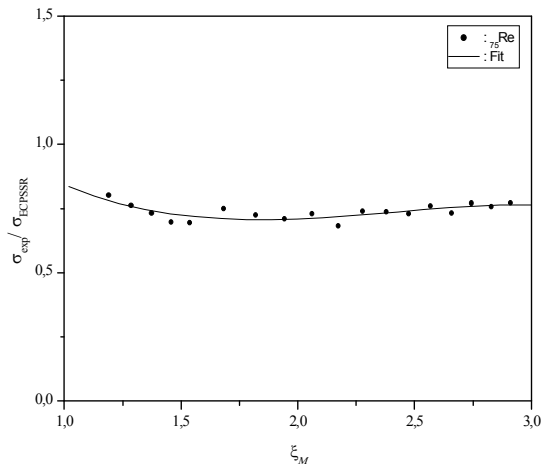
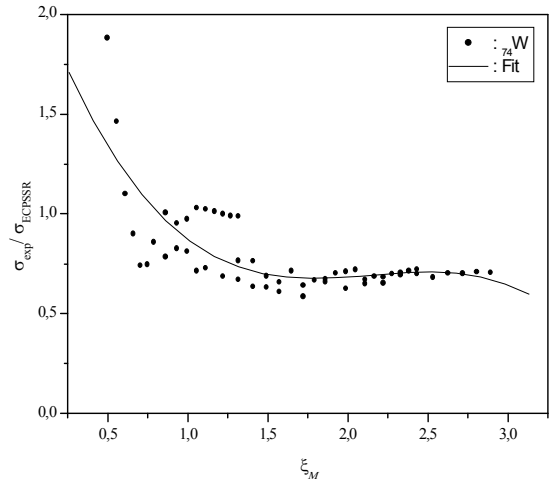
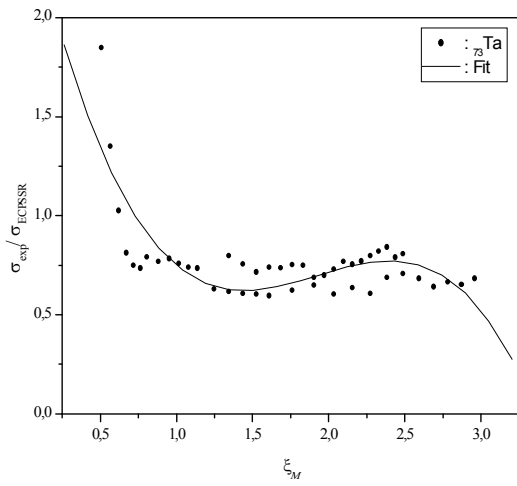
$$S = \sum_{i=0}^3 \alpha_i (\xi_M)^i \quad (\text{III.2.3})$$

Le résultat de fit est également représenté sur la figure (III.2.1) et un ensemble de quatre coefficients est alors généré tableau III.2.1.

D'autre part, nous avons essayé de calculer les sections efficaces semi-empiriques de production de la couche M pour chaque élément séparément avec les mêmes données expérimentales. Les résultats d'ajustement tableau (III.2.2), par le même ordre de polynôme (ordre trois) , pour les éléments (${}_{60}\text{Nd}$, ${}_{63}\text{Eu}$, ${}_{64}\text{Gd}$, ${}_{65}\text{Tb}$, ${}_{66}\text{Dy}$, ${}_{67}\text{Ho}$, ${}_{68}\text{Er}$, ${}_{69}\text{Tm}$, ${}_{70}\text{Yb}$, ${}_{71}\text{Lu}$, ${}_{72}\text{Hf}$, ${}_{73}\text{Ta}$, ${}_{74}\text{W}$, ${}_{75}\text{Re}$, ${}_{76}\text{Os}$, ${}_{77}\text{Ir}$, ${}_{78}\text{Pt}$, ${}_{79}\text{Au}$, ${}_{82}\text{Pb}$, ${}_{83}\text{Bi}$ et ${}_{90}\text{Th}$) sont aussi représentés par des lignes continues sur la figure (III.2.1).







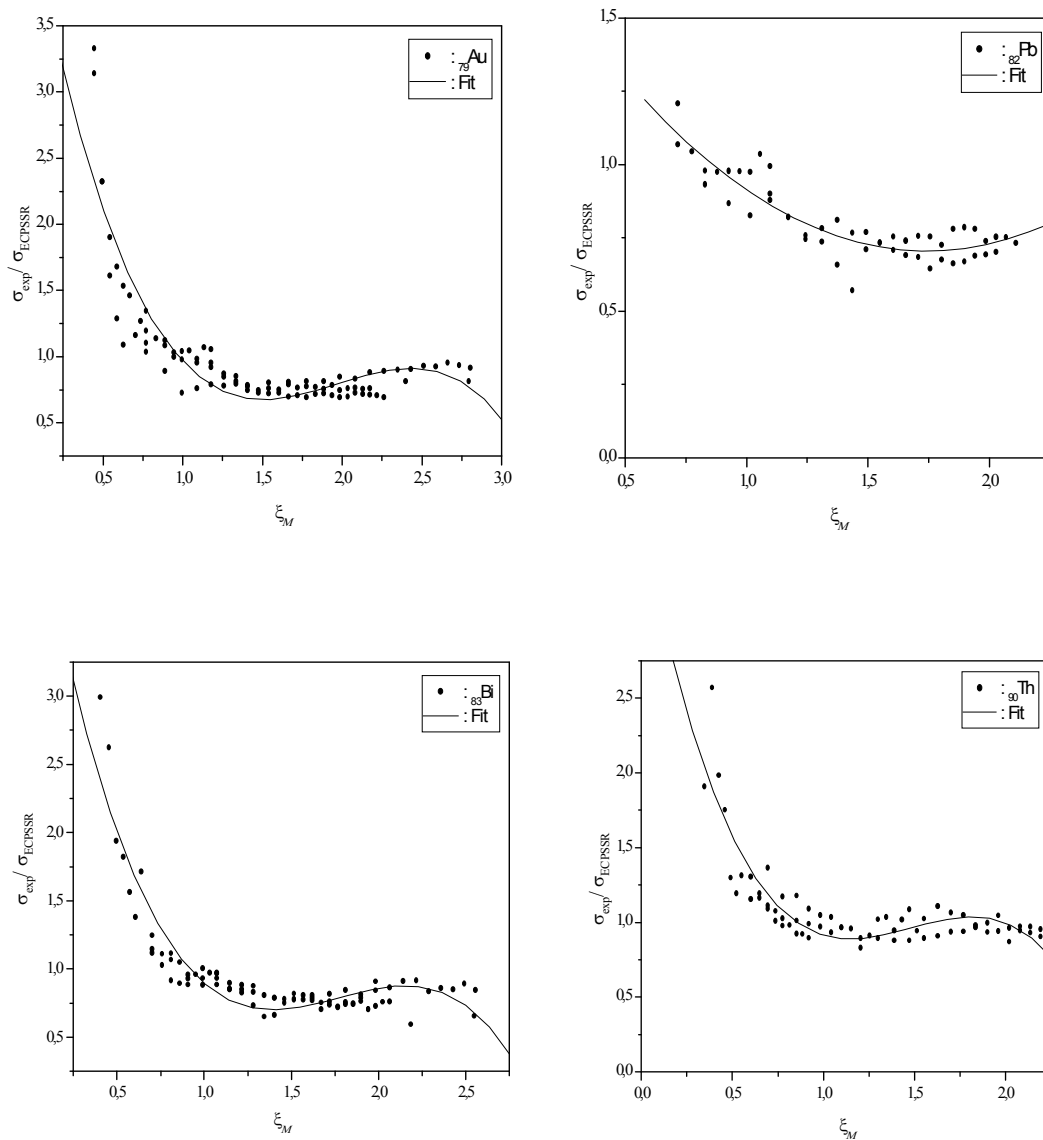


Figure (III.2.1) : rapport entre les sections efficaces de production expérimentales et théoriques (ECPSSR) de la couche M en utilisant les données expérimentales globalement et pour chaque élément séparément (^{60}Nd , ^{63}Eu , ^{64}Gd , ^{65}Tb , ^{66}Dy , ^{67}Ho , ^{68}Er , ^{69}Tm , ^{70}Yb , ^{71}Lu , ^{72}Hf , ^{73}Ta , ^{74}W , ^{75}Re , ^{76}Os , ^{77}Ir , ^{78}Pt , ^{79}Au , ^{82}Pb , ^{83}Bi et ^{90}Th) en fonction de ζ_M .

La section efficace dite section efficace semi-empirique "Référence" pour la couche M est alors déduite par la relation suivante :

$$\sigma_{S-emp} = \sigma_{ECSSR} \times S \quad (\text{III.2.4})$$

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

$$\varepsilon_{rms} = \left[\sum \frac{1}{N} \left(\frac{\sigma_{exp} - \sigma_{s-emp}}{\sigma_{s-emp}} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (\text{III.2.5})$$

où N est le nombre de données expérimentales.

Les valeurs de ε_{rms} des sections efficaces semi-empiriques déduites selon le traitement individuel et le traitement collectif sont regroupés dans le tableau III.2.3 pour tous les éléments étudiés.

Tableau III.2.1 : Coefficients d'ajustement individuel des éléments étudiés pour les sections efficaces semi-empiriques de production des rayons X par des protons d'énergie allant de 0.1 à 4.0 MeV.

Semi-emp (Eq. III.2.4)				
Élément	a_0	a_1	a_2	a_3
^{60}Nd	1,93157	-0,91873	0,18454	-6,42423E
^{63}Eu	2,71355	-2,99311	1,24645	-0,16947
^{64}Gd	1,59820	-0,92993	0,16390	0,00629
^{65}Tb	3,84475	-3,30709	1,08197	-0,11671
^{66}Dy	5,28972	-6,69269	3,02458	-0,44486
^{67}Ho	3,90986	-4,31959	1,72789	-0,21911
^{68}Er	3,46317	-3,90602	1,63336	-0,21776
^{69}Tm	9,39726	-8,99549	3,05504	-0,34244
^{70}Yb	6,50466	-9,23821	4,69283	-0,77949
^{71}Lu	-2,50774	3,31121	-1,09494	0,12183
^{72}Hf	4,0495	-4,87964	2,22921	-0,32473
^{73}Ta	2,67074	-3,55105	1,96986	-0,34167
^{74}W	2,22417	-2,27206	1,08935	-0,16918
^{75}Re	1,61875	-1,25031	0,54987	-0,07599
^{76}Os	3,29709	-4,4382	2,36769	-0,3945
^{77}Ir	3,36844	-4,64862	2,50012	-0,41608
^{78}Pt	3,37673	-4,49699	2,35275	-0,38522
^{79}Au	4,59854	-6,57194	3,53636	-0,59912
^{82}Pb	1,87344	-1,35924	0,40722	-0,0068
^{83}Bi	4,65724	-7,22510	4,26279	-0,80004
^{90}Th	3,69433	-6,18642	4,39489	-0,98794

Tableau III.2.2: coefficients d'ajustement collectif des sections efficaces de production des rayons X semi-empiriques par des protons d'énergie allant de 0.1 à 4.0 MeV.

Fit collectif	a_0	a_1	a_2	a_3
	2.92945	-3.29199	1.55155	-0.23258

Tableau III.2.3 : valeurs de ε_{rms} (%) des sections efficaces semi-empiriques déduites selon le traitement individuel et le traitement collectif pour tous les éléments étudiés ; ${}_{60}\text{Nd}$, ${}_{63}\text{Eu}$, ${}_{64}\text{Gd}$, ${}_{65}\text{Tb}$, ${}_{66}\text{Dy}$, ${}_{67}\text{Ho}$, ${}_{68}\text{Er}$, ${}_{69}\text{Tm}$, ${}_{70}\text{Yb}$, ${}_{71}\text{Lu}$, ${}_{72}\text{Hf}$, ${}_{73}\text{Ta}$, ${}_{74}\text{W}$, ${}_{75}\text{Re}$, ${}_{76}\text{Os}$, ${}_{77}\text{Ir}$, ${}_{78}\text{Pt}$, ${}_{79}\text{Au}$, ${}_{82}\text{Pb}$, ${}_{83}\text{Bi}$ et ${}_{90}\text{Th}$.

Élément (N ^o de data)	Individuel	Collectif	Élément (N ^o de data)	Individuel	Collectif
${}_{60}\text{Nd}$ (09)	04.20	23.13	${}_{73}\text{Ta}$ (29)	13.22	16.72
${}_{63}\text{Eu}$ (07)	01.20	49.60	${}_{74}\text{W}$ (29)	14.55	15.56
${}_{64}\text{Gd}$ (09)	07.72	29.32	${}_{75}\text{Re}$ (18)	02.71	04.04
${}_{65}\text{Tb}$ (06)	00.39	31.46	${}_{76}\text{Os}$ (31)	15.16	14.65
${}_{66}\text{Dy}$ (10)	07.61	32.46	${}_{77}\text{Ir}$ (32)	14.00	14.68
${}_{67}\text{Ho}$ (09)	06.88	37.16	${}_{78}\text{Pt}$ (32)	13.65	13.05
${}_{68}\text{Er}$ (09)	11.96	25.38	${}_{79}\text{Au}$ (30)	14.75	18.88
${}_{69}\text{Tm}$ (06)	01.97	22.44	${}_{82}\text{Pb}$ (51)	07.17	09.15
${}_{70}\text{Yb}$ (09)	03.89	25.00	${}_{83}\text{Bi}$ (32)	12.28	15.74
${}_{71}\text{Lu}$ (06)	03.77	27.51	${}_{90}\text{Th}$ (68)	09.75	28.95
${}_{72}\text{Hf}$ (17)	10.40	12.43			

III.3. Résultats et discussions

III.3.1. Distribution des données expérimentales :

Nous avons présenté sur la figure (III.3.1) la distribution des valeurs expérimentales de la section efficace de production de la couche M (568 données expérimentales) rassemblées de différentes sources ([Pa.06], [Pa.90], [Me.83], [Me.82], [Ci.95], [Sh.86], [Ro.02], [Go.06], [Se.80], [Ph.09] et [Sh.96]) pour des protons d'énergie allant de 0.1 à 4.0 MeV, où l'Or (^{79}Au) paraît l'élément le plus intensivement étudié (91 valeurs expérimentales). Nous disposons de valeurs expérimentales seulement pour 21 éléments. Pour les autres éléments, les valeurs sont soit inexistantes, soit disponibles pour des énergies en dehors de la gamme d'énergie considérée dans ce travail.

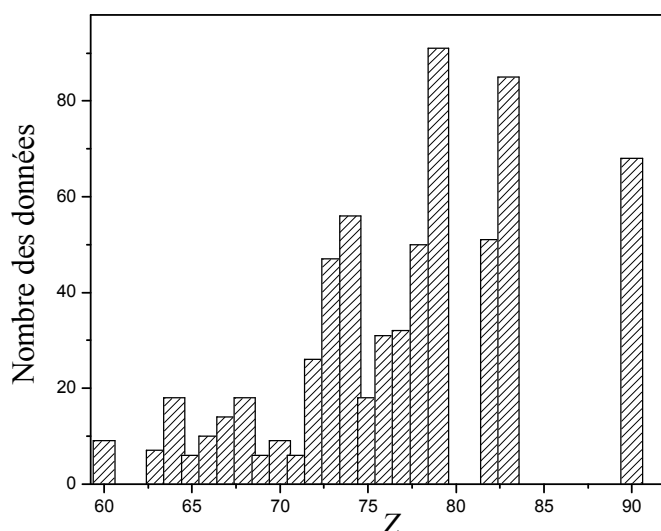
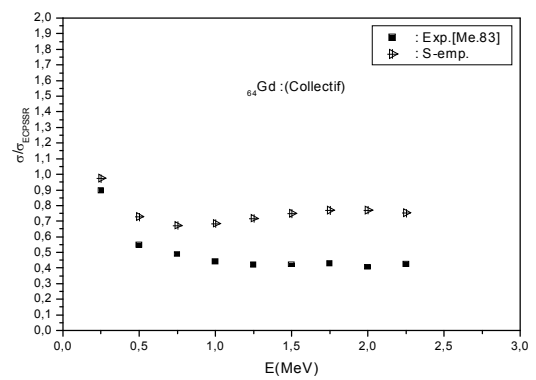
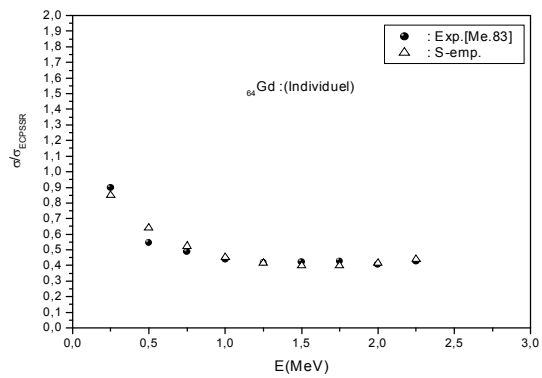
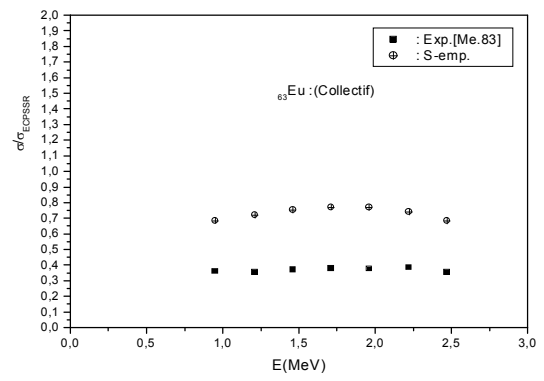
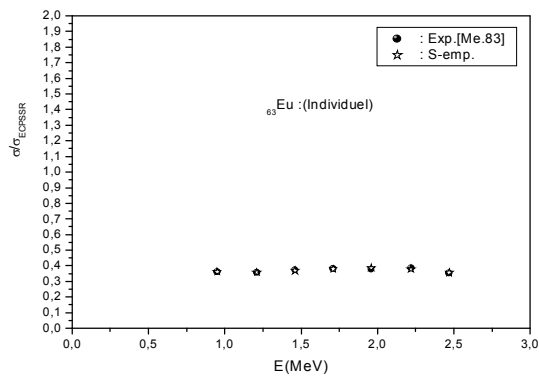
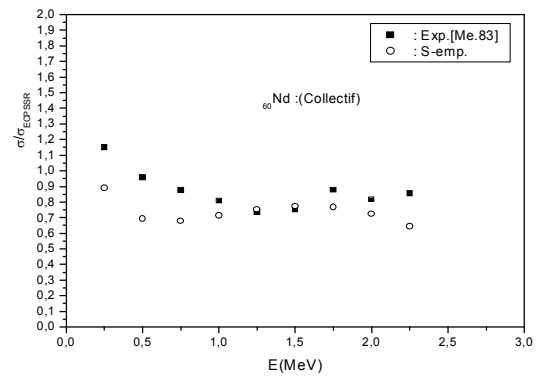
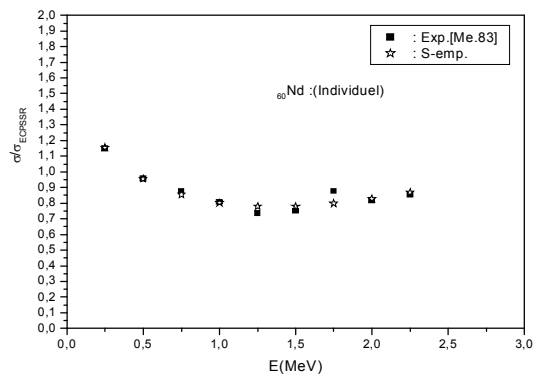
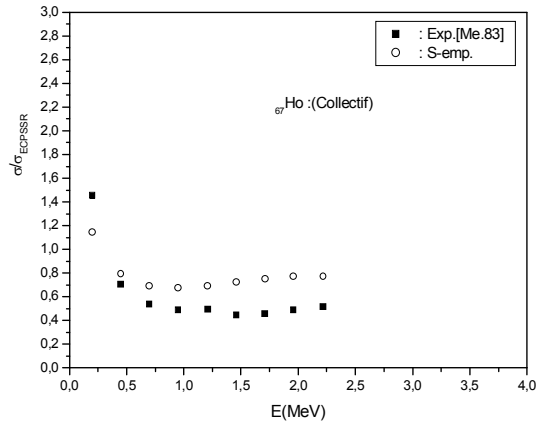
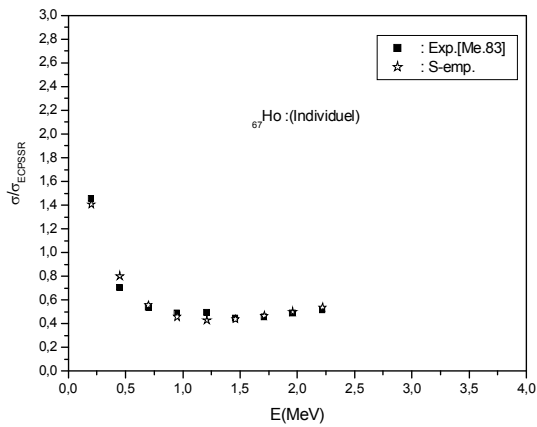
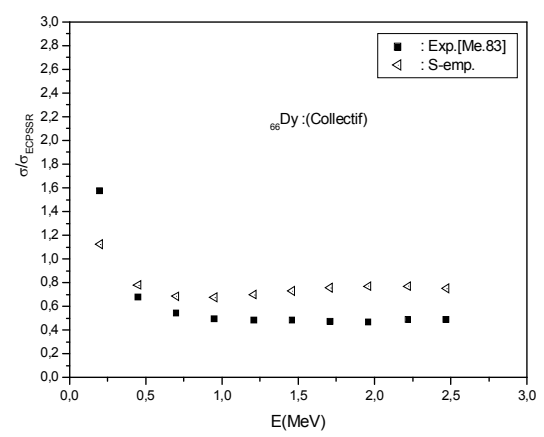
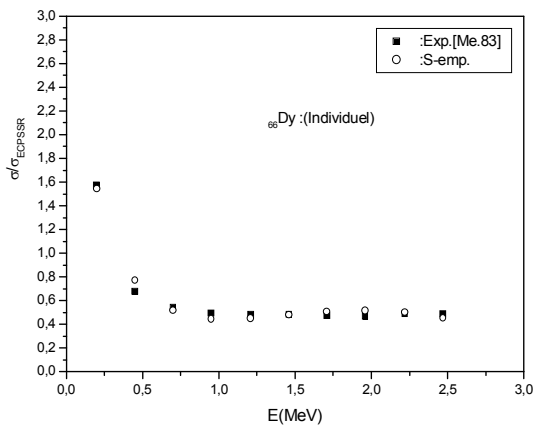
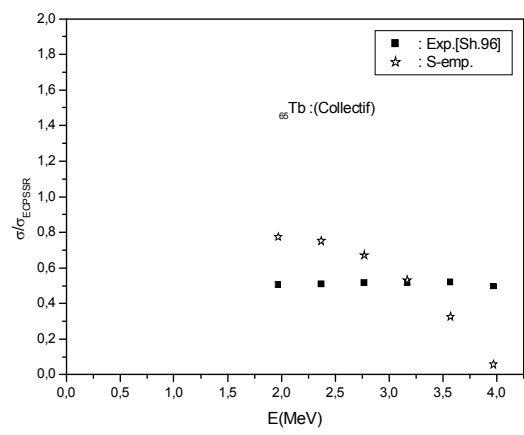
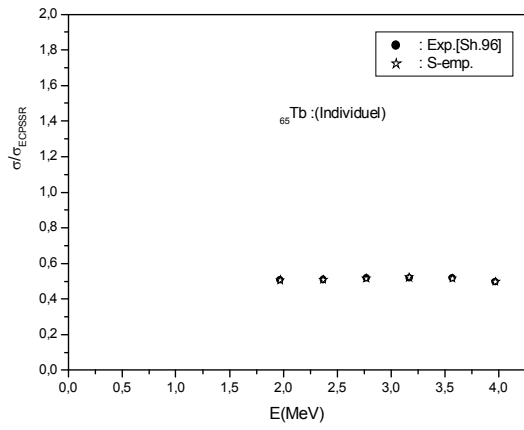


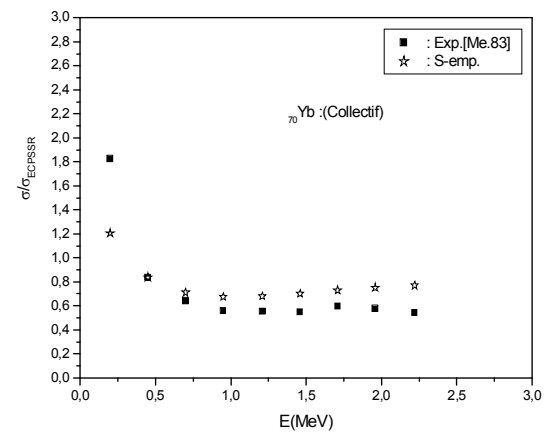
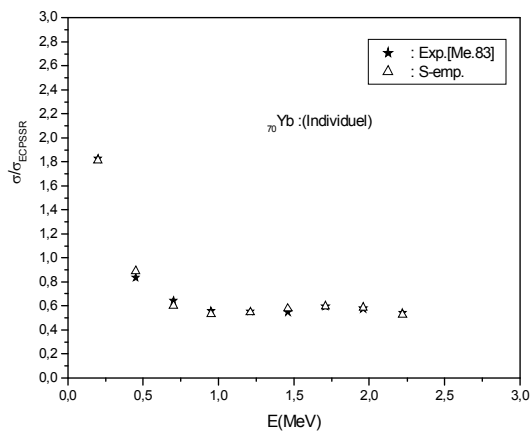
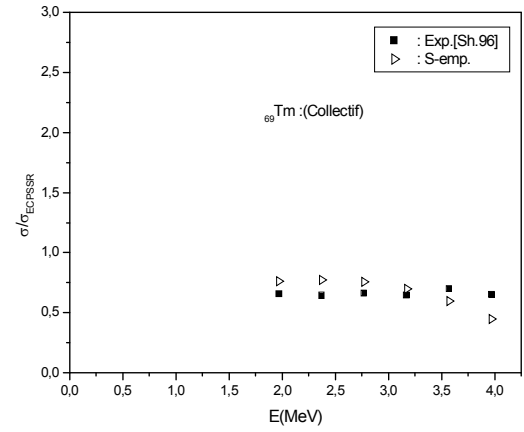
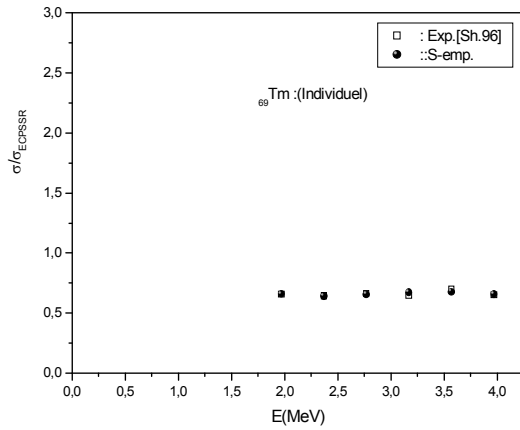
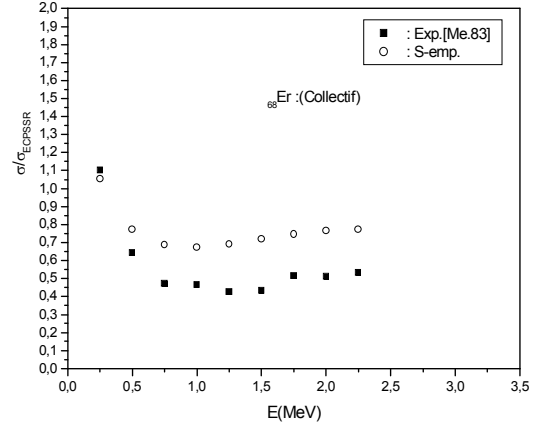
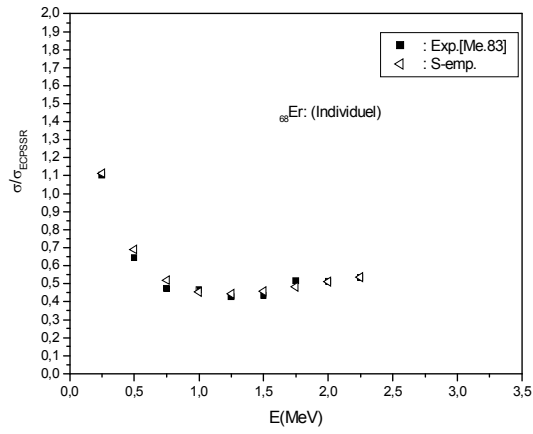
Figure (III.3.1): Distribution des valeurs expérimentales de la section efficace de production de la couche M en fonction du numéro atomique Z des éléments étudiés.

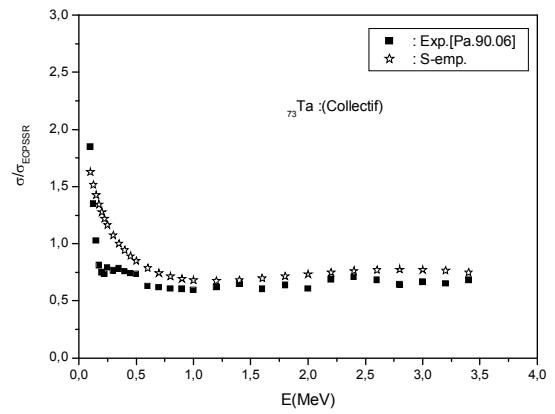
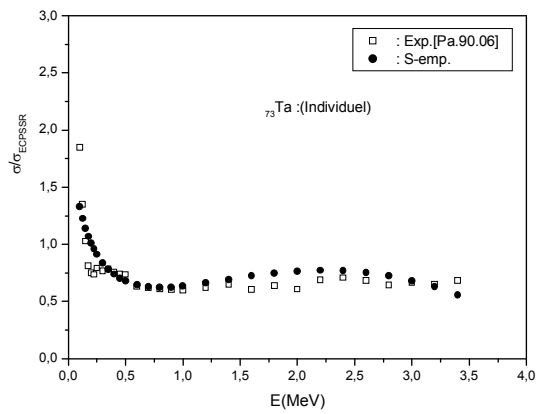
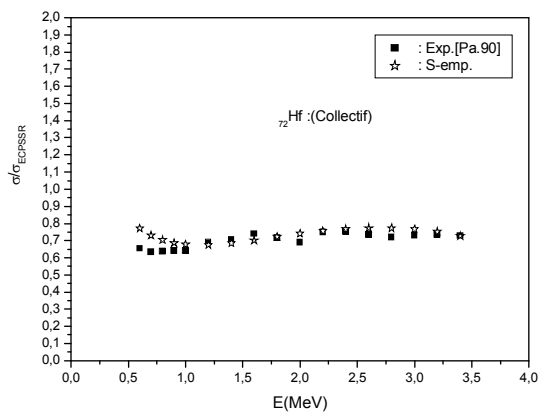
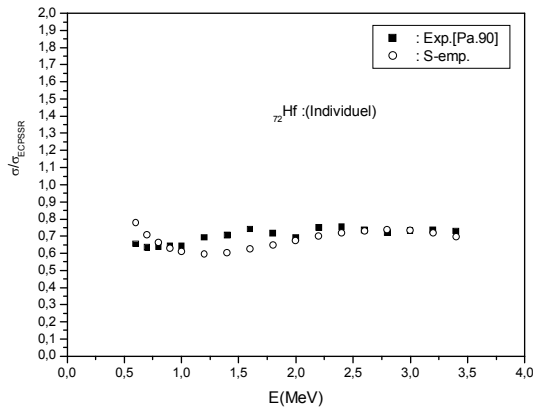
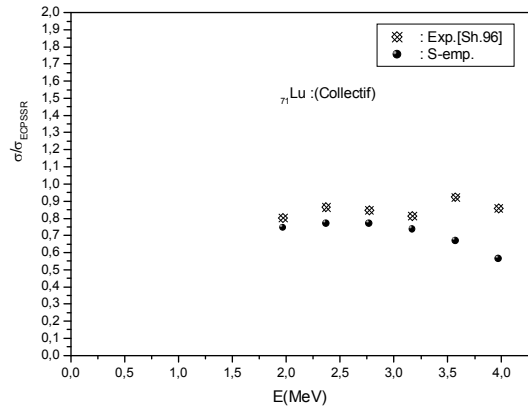
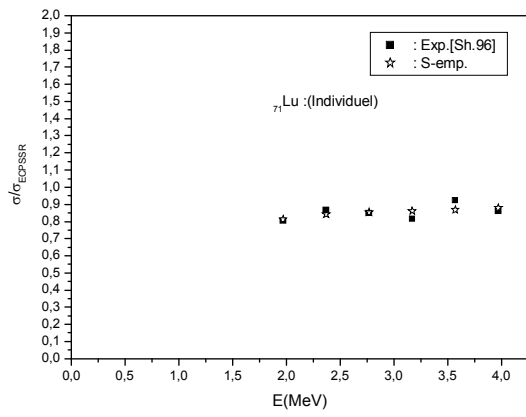
III.3.2. Explication des figures :

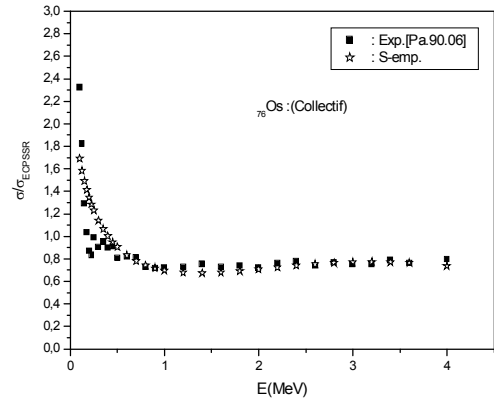
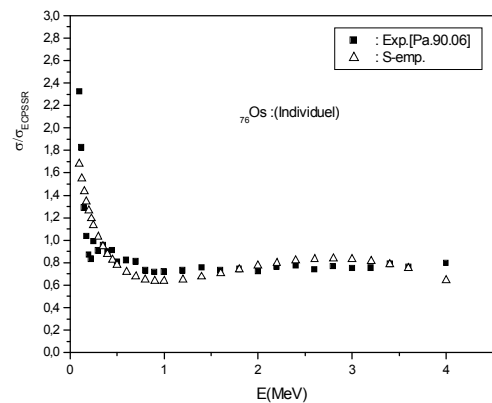
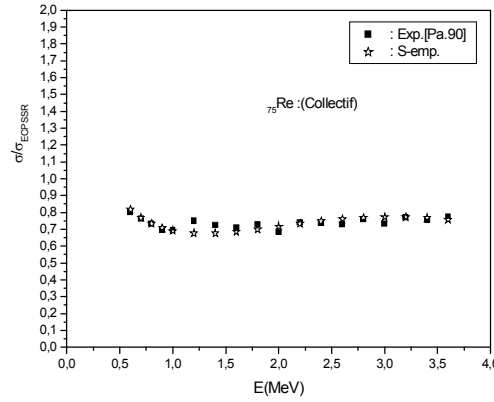
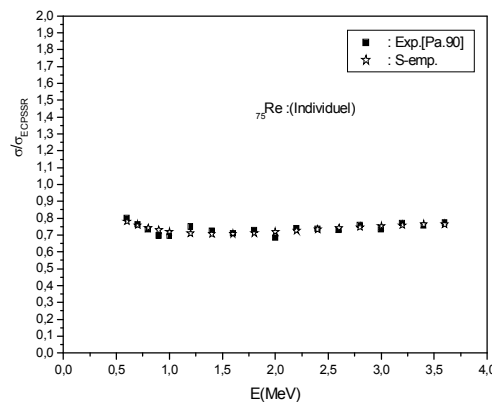
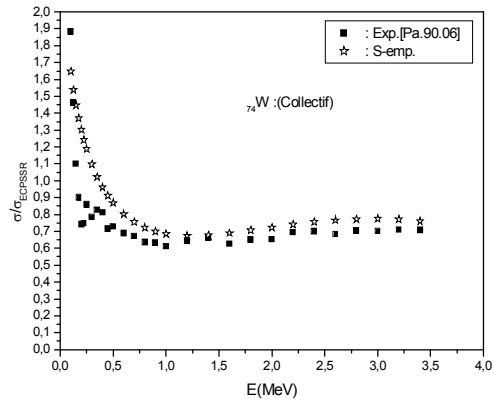
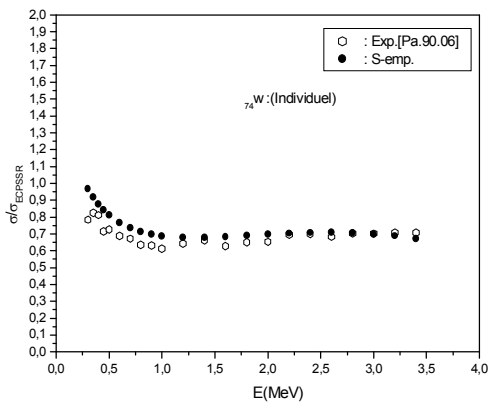
Nous avons représenté sur les figures (III.3.2) les rapports des sections efficaces de production expérimentales et ceux des sections efficaces de production semi-empiriques par rapport aux résultats correspondants calculés dans le cadre du modèle ECPSSR pour des protons d'énergie allant de 0,1 à 4,0 MeV dans les cas individuel et collectif pour 21 éléments de numéros atomiques compris entre 60 et 90 (^{60}Nd , ^{63}Eu , ^{64}Gd , ^{65}Tb , ^{66}Dy , ^{67}Ho , ^{68}Er , ^{69}Tm , ^{70}Yb , ^{71}Lu , ^{72}Hf , ^{73}Ta , ^{74}W , ^{75}Re , ^{76}Os , ^{77}Ir , ^{78}Pt , ^{79}Au , ^{82}Pb , ^{83}Bi et ^{90}Th).

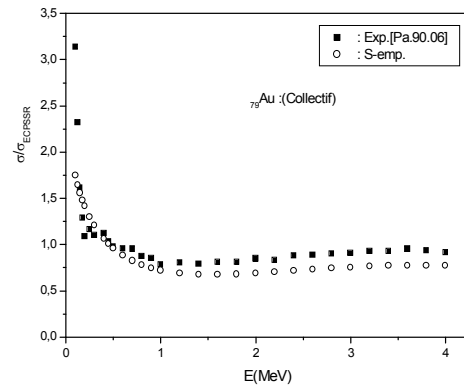
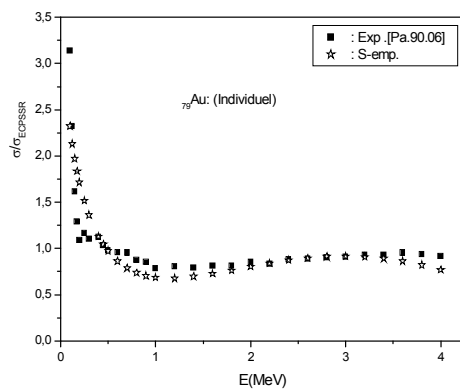
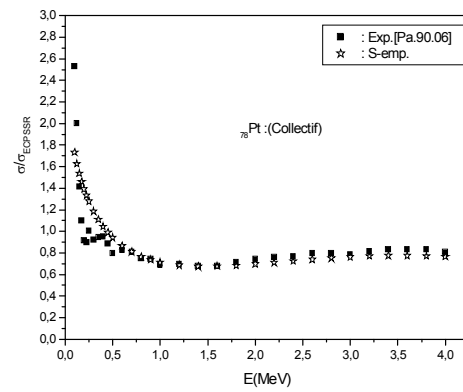
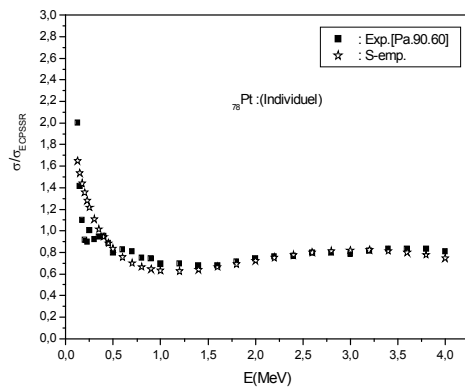
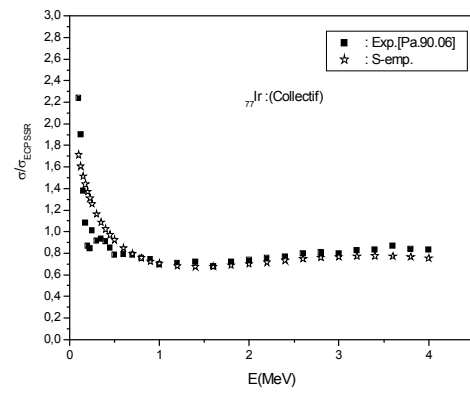
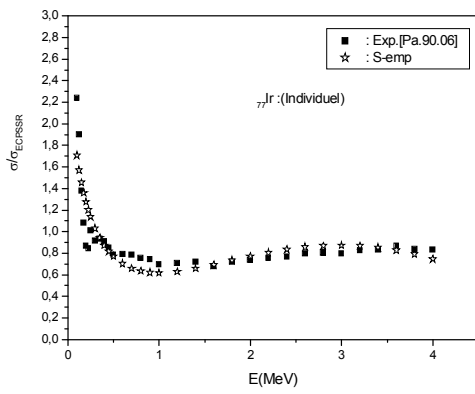












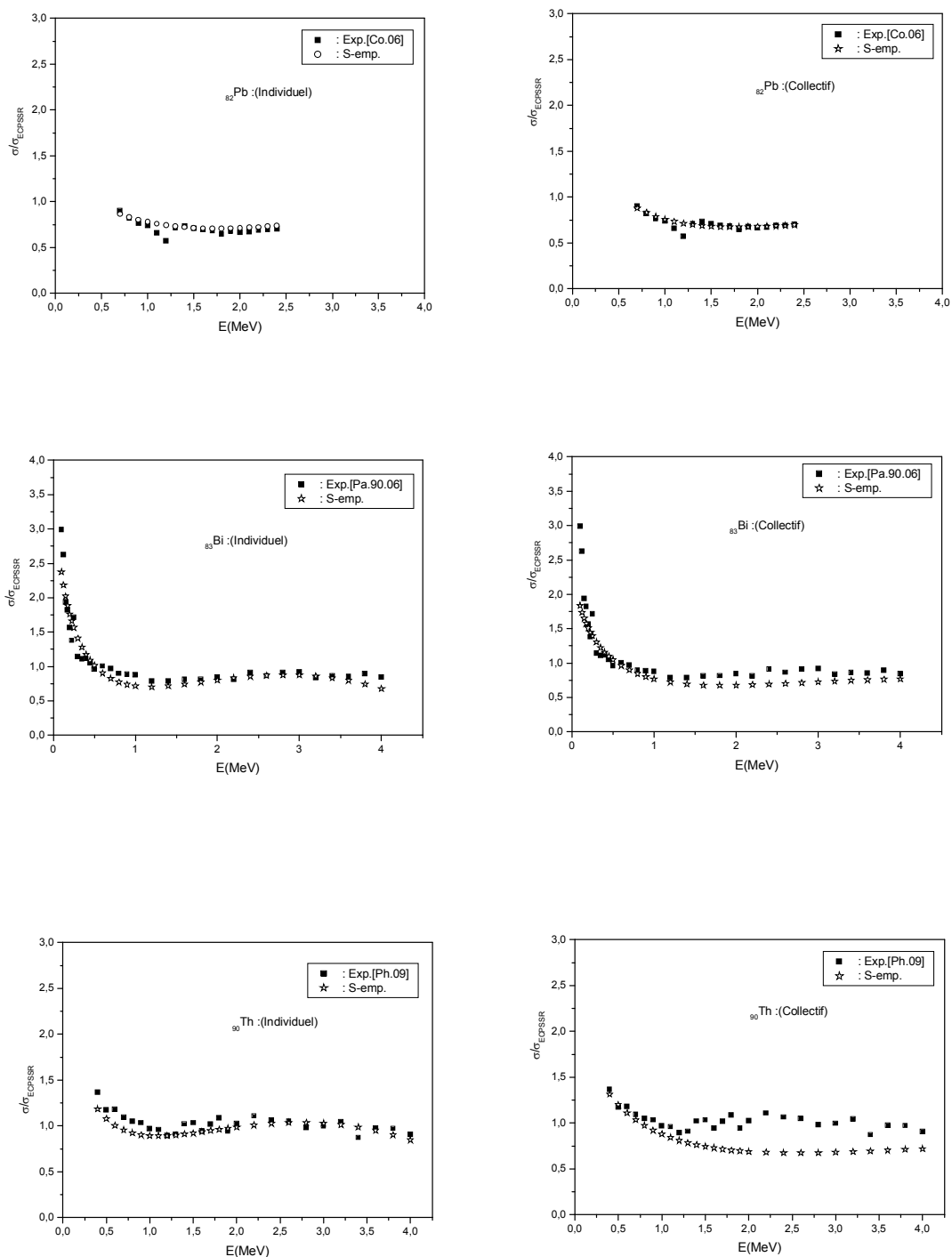


Figure (III.3.2) :Rapport des sections efficaces de production semi-empiriques et expérimentales par rapport aux résultats correspondants du modèle ECPSSR en fonction de l'énergie des protons allant de 0.1 à 4.0 MeV pour les éléments (^{60}Nd , ^{63}Eu , ^{64}Gd , ^{65}Tb , ^{66}Dy , ^{67}Ho , ^{68}Er , ^{69}Tm , ^{70}Yb , ^{71}Lu , ^{72}Hf , ^{73}Ta , ^{74}W , ^{75}Re , ^{76}Os , ^{77}Ir , ^{78}Pt , ^{79}Au , ^{82}Pb , ^{83}Bi et ^{90}Th).

III.3.3. Discussion des résultats :

L'analyse des résultats obtenus des sections efficaces de production semi-empiriques en comparaison avec les sections efficaces de production expérimentales ([Go.06], ([Me.83], [Pa.90], [Pa.06], [Ph.09] et [Sh.96]) par rapport aux résultats correspondants calculés dans le cadre du modèle *ECPSSR* pour tous les éléments étudiés (^{60}Nd , ^{63}Eu , ^{64}Gd , ^{65}Tb , ^{66}Dy , ^{67}Ho , ^{68}Er , ^{69}Tm , ^{70}Yb , ^{71}Lu , ^{72}Hf , ^{73}Ta , ^{74}W , ^{75}Re , ^{76}Os , ^{77}Ir , ^{78}Pt , ^{79}Au , ^{82}Pb , ^{83}Bi et ^{90}Th) en utilisant les données expérimentales de chaque élément séparément (Individuel) d'une part, et la gamme entière des données expérimentales (Collectif ou Global) d'autre part, en fonction de l'énergie du proton, nécessite quelques commentaires :

- Il apparaît de la figure (III.3.2) que le rapport $\sigma/\sigma_{\text{ECPSSR}}$ n'est pas le même pour chaque élément aussi bien dans le cas du fit individuel que dans le cas du fit collectif.
- De plus, en considérant que la précision des sections efficaces déduites dépend de la valeur de l'erreur quadratique moyenne, on peut dire que la section efficace semi-empirique à l'état individuel donne la meilleure représentation des données expérimentales.
- En outre, à haute énergie du projectile le rapport entre les sections efficaces déduites en utilisant les différentes procédures citées dans ce chapitre et celle de la théorie pour les 21 éléments sont, généralement, inférieurs à 1, c.-à-d. il y a une sous-estimation de la théorie.
- Les sections efficaces semi-empiriques déduites de l'utilisation des données expérimentales de chaque élément séparément (individuel) s'approchent, généralement, les unes des autres alors qu'il y a une dispersion remarquable entre elles lors de l'utilisation de la gamme entière des données expérimentales.
- Les valeurs des *rms* observées pour l'ajustement collectif sont plus grandes que celles pour l'ajustement individuel. Ce qui nous permet de dire que les résultats obtenus par un fit individuel des données expérimentales sont plus fiables que ceux obtenus par un fit collectif pour tous les éléments.
- Nous devons signaler que les ajustements des données expérimentales normalisées par l'équation (III.2.4) et ses coefficients associés sont valables seulement dans la gamme d'énergie et de numéros atomiques spécifiée dans cette étude. Leurs extensions en dehors de cette gamme peuvent conduire à des valeurs erronées.

CONCLUSION GENERALE

Les sections efficaces d'ionisation et de production des différentes raies qui composent un spectre de rayons X des raies M sont calculées dans le cadre du modèle *ECPSSR*. Bien que les améliorations successives aient été incorporées dans la théorie *PWBA* pour donner naissance au modèle *ECPSSR*, 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. Donc, il est nécessaire d'adopter des méthodes semi-empiriques pour mieux ajuster les données expérimentales disponibles.

Dans ce présent travail, nous avons présenté les résultats des sections efficaces semi-empiriques, basées sur le fit des données expérimentales normalisées à leurs valeurs théoriques correspondantes calculées dans le cadre de la théorie *ECPSSR*, des raies M des éléments de numéros atomiques $60 \leq Z \leq 90$ pour des protons d'énergie comprise entre 0.1 et 4.0 MeV.

Nous avons essayé de calculer, en premier lieu, les sections efficaces semi-empiriques de production de rayons X des raies M pour la gamme entière des éléments à étudier (60-90).

Les grandes valeurs des écarts quadratiques obtenues dans la première partie pour les sections efficaces de production semi-empiriques nous ont motivé pour essayer de déterminer, en second lieu, des sections efficaces de production de rayons X plus fiables basées sur l'ajustement des données expérimentales de chaque élément séparément.

Les sections efficaces semi-empiriques en ajustant les données expérimentales pour chaque élément séparément donnent des sections efficaces plus fiables.

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

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [Ba.09] Bahri DEGHFEL, détermination des sections efficaces d'ionisation et de production des aies M des éléments lourds, thèse doctorat de l'université Ferhat abbas-Sétif, (2009).
- [Ba.02] Yves. BARBOTTEAU, recherché des modification de caractéristique dans des biomatériaux en verre bioactif par des méthodes nucléaire et physico-chimiques, combinaison de la cartographie PIXE et de l'histopathologie. Essai de modélisation par la théorie de la percolation de la résorption de biomatériaux, thèse doctorat, CNRS, Laboratoire de physique corpusculaire __ (2002).
- [Ba.72] W. Bambynek, B. Crasemann, R. Fink, H. Freund, H. Mark, C. Swift, R. Price, and P. Rao, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 716 (1972).
- [Ba.73a] G.Basbas,W.Brandt,R.H.Ritchie.*phys.Rev.A* 7,1971 (1973).
- [Ba.73a] G.Basbas,W.Brandt,R.H.Ritchie.*phys.Rev.A* 7,1971 (1973).
- [Ba.73b] G.Basbas,W.Brandt,R.Laubert,*phys.Rev A*7,983(1973).
- [Be.78] O.Benka and A.Kropf,*atom.Data Nucl.Data Tables* 22,219 (1978).
- [Br.74] W. Brandt and G. Lapicki, *Phys. Rev.* **A10**, 474 (1974).
- [Br.81] W. Brandt, G. Lapicki, *Phys Rev* ,1981,A23:1717-1729
- [Bu.73] C. E. Busch, A. B. Baskin, P. H. Nettles, S. M. Shafroth, and A. W. Waltner, *Phys. Rev.* **A7**, 1601 (1973).
- [Ch.73] B. Choi, *Phys. Rev.* **A7**, 2056 (1973).
- [Ch.83] M. Chen, B. Crasemann, and H. Mark, *Phys. Rev.* **A27**, 2358 (1983).
- [Ch.84a] M. Chen and B. Crasemann, *Phys. Rev.* **A30**, 170 (1984).
- [Ch.85] M. Chen and B. Crasemann, *At, Data & Nucl. Data Tables* **33**, 217 (1985).
- [Ch.89] M. Chen and B. Crasemann, *At, Data & Nucl. Data Tables*, **41**, 257 (1989).
- [Ci.95] S. Cipolla, *Nucl. Instr. and Meth.* **B99**, 22 (1995).
- [Co.85] D.Cohen and M.Harrigan *At.Data1 Nucl. Data Tables* 33,255 (1985).
- [Go.06] M. Goudarzi, F. Shokouhi, M. Lamehi-Rachti, P. Oliairy, *Nucl. Instr. and Meth.* **B247**, 217 (2006).
- [Ja.00] M. Jaskóła, T. Czyżewski, L. Głowacka, D. Banaś, J. Braziewicz, M. Pajek, W. Kretschmer, G. Lapicki, and D. Trautmann, *Nucl. Instr. and Meth.* **B161**, 191(2000).
- [La.80] G. Lapicki , R. Laubert, and W. Brandt and , *Phys. Rev.* **A22**, 1889 (1980).

- [**Li.96**] Z.Liu and S.J.Cipolla,comp.phys.com.97,315.(1996).
- [**Mc.72**] E. J. McGuire, Phys. Rev. **A5**, 1043 (1972).
- [**Me.58**] E. Merzbacher and H.W.Lewis Encyclopedia of physics Springer Verlag Berlin, Vol.34 166 (1958).
- [**Me.82**] R.Mehta, J.Duggan, J. Price, F.McDaniel, and G. Lapicki, Phys.Rev.A26, 1883(1982).
- [**Me.83**] R. Mehta, J. L. Duggan, F. D. McDaniel, M. C. Andrews,G.Lapicki,P.D.Miller,L.A. Rayburn, and A. R. Zander, Phys. Rev. A 28, 2722 (1983).
- [**Ne.06**] M. Nekab and A. Kahoul. Nucl. Instr. and Meth. B 245, 395 (2006).
- [**Pa.06**] M. Pajek, D. Banaś, J. Braziewicz, M. Czarnota, A. Braziewicz, M. Jaskóła, A. Korman, D. Trautmann, and G. Lapicki, Phys. Rev. **A73**, 1 (2006).
- [**Pa.90a**] M. Pajek, A. Kobzev, R. Sandrik, A. Skrypnik, R. Ilkhamov, S. Khusmurodov, and G. Lapicki, Phys. Rev. **A 42**, 5298 (1990); 6582 (1990).
- [**Pa.99**] M. Pajek, M. Jaskóła, T. Czyżewski, L. Głowacka, D. Banaś, J. Braziewicz, W. Kretschmer, G. Lapicki, and D. Trautmann, Nucl. Instr. and Meth. **B150**, 33(1999).
- (**PIXE**) : théorie » techniques de l'ingénieur TI 630 ; 2003 |
- [**Ph.09**] LC Phinney, JL Duggan, G Lapicki, FU Naab, K Hossain and FD Mc Daniel.J.Phys.B : At.Mol.opt.phys.42 (2009).
- [**Ro.02**] L. Rodriguez-Fernández, J. Miranda, J. Ruvalcaba-Sil, E. Segundo, and A. Olivier, Nucl. Instr. and Meth. **B189**, 27 (2002).
- [**Sa.94**] J.J.Sakurai,Modern Quantum Mechnics,Addison-Wesley publishing company (1994).
- [**Se.80**] K. Sera, K. Ishii, A. Yamadera, A. Kuwako, M. Kamiya, M. Sebata, S. Morita, and T. C. Chu, Phys. Rev. **A22**, 2536 (1980)
- [**Sh.96**] F. Shokouhi, S. Fazinić, I. Bogdanović, M. Jakšić, V. Valković, and H. Afarideh, Nucl. Instr. and Meth. **B109/110**, 15 (1996).
- [**So.10**] Jérémy .SOULIÉ. «*Synthèse par voie sol-gel et réactivité in vitro de verres bioactifs dopés, mésostructurés et macrostructuré Caractérisation par micro-faisceaux d'ions*». Thèse doctorat de l'université CLERMONT II - BLAISE PASCAL(2010).

Abstract

We present in this work our theoretical values of *M*-shell X-ray production cross sections calculated in the framework of the *ECPSSR* model. Although these successive improvements incorporated in the *ECPSSR* model, yet some discrepancies were continuing to appear between the theoretical values (*ECPSSR*) and the experiment especially at low energy of proton. This motivated us to adopt semi empirical methods based on fitting of the available experimental cross sections normalized to their corresponding values of *ECPSSR* model. Our results of the semi-empirical *M*-shell x-ray cross sections for elements with atomic number $60 \leq Z \leq 90$ by proton energy from 0.1 to 4.0 MeV are presented and a comparative study has been done with experiment where a good agreement is observed.

Key words: *ECPSSR* model, semi-empirical cross section

Résumé

Nous présentons dans ce travail nos valeurs théoriques des sections efficaces de production des rayons X de la couche *M* calculées dans le cadre du modèle *ECPSSR*. Malgré les améliorations intégrées dans le modèle *ECPSSR*, des écarts persistent entre les valeurs théoriques (*ECPSSR*) et l'expérience surtout à basse énergie du proton. Ceci nous a conduit à adopter des méthodes semi-empiriques basées sur l'ajustement des données expérimentales disponibles normalisées à leurs valeurs correspondantes du modèle *ECPSSR*. Nos résultats des sections efficaces semi-empiriques de production des raies *M* des éléments de numéro atomique $60 \leq Z \leq 90$ par des protons d'énergie allant de 0.1 à 4.0 MeV sont présentés et une étude comparative a été faite avec les données de l'expérience où un bon accord a été observé.

Mots clés : modèle *ECPSSR*, section efficace semi-empirique.

ملخص

عرضنا في هذه الأطروحة المقاطع المستعرضة للأشعة السينية *X* للطبقة *M* محسوبة في النموذج *ECPSSR*. على الرغم من التحسينات المدرجة في النموذج *ECPSSR* ، فإن بعض التعارض يبقى قائم بين التوقعات النظرية (*ECPSSR*) و النتائج التجريبية خاصة في الطاقات المنخفضة للبروتونات و هذا أدى بنا إلى اعتماد الطرق النصف تجريبية المتأسسة على محاكاة النتائج التجريبية المتوفرة طبيعيا في القيم المتماثلة في نموذج *ECPSSR* . تم مقارنة نتائج المقطع الفعال النصف تجريبي الناتج في الطبقات *M* للعناصر التي رقمها الذري $60 \leq Z \leq 90$ لبروتونات ذات طاقة من 0,1 إلى 4,0 MeV مع النتائج التجريبية حيث نلاحظ الترابط الجيد بينهما.

الكلمات المفتاحية : المقاطع العرضية الشبه تجريبية , نموذج *ECPSSR* .