

# 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<sup>ème</sup> CYCLE (LMD)**

Spécialité: Physique

Option: Matière et Rayonnement

## THEME

**Calcul des paramètres de la fluorescence X des couches  
atomiques internes pour des éléments de numéros atomiques  
6 Z 99**

Présenté Par

**DERRADJ Imane**

Soutenue le : 16./01/2019.

Devant le jury composé de :

<u>Nom &amp; Prénom</u>	<u>Grade</u>	<u>Etablissement</u>	<u>Qualité</u>
LATELLI H'mida	Pr.	Université Mohamed Boudiaf - M'sila	Président
KAHOUL Abdelhalim	Pr.	Université Mohamed El Bachir El Ibrahimi-BBA	Rapporteur
BOUSSENDEL Abdelmadjid	MCA	Université Mohamed Boudiaf - M'sila	Examineur
BAADJI Nadjib	MCA	Université Mohamed Boudiaf - M'sila	Examineur
KASRI Yazid	Pr.	Université Abderrahmane Mira - Bejaia	Examineur

Année Universitaire : 2017/2018

## Dédicace

*Je dédie ces quelques pages de mon histoire à celui sans qui je ne serais sûrement pas arrivée aussi loin et sans qui je ne serais pas qui je suis aujourd'hui : mon cher père, qui me manque tous les jours.*

*Je fais également un clin d'œil aux autres hommes de ma vie : mes frères, mes sœurs KARIMA et ASSIA, et surtout à ma mère qui ont toujours été là pour me faire rire, me reconforter et me nourrir.*

*Je dédie aussi mon amie ABDEZAK*

*Que dieu les garde tous*

*Derradj Imane.*

## Remerciements

*Avant tout propos, je remercie Allah le Tout-Puissant de m'avoir donné le courage et la volonté pour pouvoir élaborer ce travail et le présenter.*

*En effet, le présent mémoire de Doctorat n'aurait pu avoir le jour sans la contribution de nombreuses personnes, dont je me fais aujourd'hui un plaisir et un devoir de les remercier.*

*Je suis reconnaissant à mon encadreur **KAHOUL Abdelhalim** qui m'a aidée à progresser dans ma recherche grâce à ses conseils, directifs, son esprit critique et son soutien tout long de la réflexion de cette recherche. Et qui a bien voulu assurer le suivi de mon étude à travers son encouragement et ses précieux conseils qui m'ont été très utiles dans l'élaboration de cette recherche et à mon professeur **Deghfel Bahri**, pour m'avoir guidé grâce à leur précieux conseils et leur encouragements lors de la réalisation de ce mémoire.*

*je remercie vivement les membres de jury qui ont accepté de juger ce travail mes professeurs :*

**LATELLI H'mida**  
**BOUSSENDEL Abdelmajid**  
**KASRI Yazid**  
**BAADJI Nadjib**

*Je tiens à remercier vivement tous mes enseignants de l'université qui nous ont aidés à l'accumulation des connaissances nécessaires durant le cursus universitaire ainsi Aux membres du département des sciences de l'université de M'sila.  
Mes vifs remerciements s'adressent à toute ma famille.*

*Tous ceux qui ont participé de près ou loin dans la réalisation de ce travail trouve ici l'expression de ma profonde gratitude et remerciements.*

MERCI

DERRADJ IMANE

**TABLE DES MATIERESE**

**INTRODUCTION GENERALES.....1**

**CHAPITRE I**

**Paramètres atomiques et la fluorescence X**

I.1. Introduction.....7

I.2. Organisation des couches électroniques... ..7

I.3. Règles de sélections .....9

I.4. Transitions électroniques .....10

I.4.1. Transitions entre niveaux.....10

I.5. Notation de Siegbahn .....10

I.6. Loi de Moseley .....11

I.7. Le rayonnement .....12

I.7.1. Les rayons X .....13

I.8. Interactions matière-rayons X.....13

I.8.1. Excitation.....14

I.8.2. Désexcitation .....15

I.9. Fluorescence X .....15

I.9.1. Principes de la fluorescence X .....16

I.10. Effet Auger .....16

I.10.1. Principes de l'effet Auger.....16

I.11. Rendement de fluorescence .....18

I.11.1. Transitions de Coster-Kronig.....19

I.11.2. Le rendement de fluorescence en absence et en présence de transitions de Coster-Kronig .....20

I.11.3. La probabilité totale .....22

Références bibliographiques.....23

## *Table des matières*

---

### **CHAPITRE II**

#### **Modèles théoriques**

II.1. Introduction.....	25
II.2. Section efficace d'ionisation par particules chargées .....	26
II.2.1. Modèle PWBA (Plane Wave Born Approximation) .....	26
II.2.2. Modèle RPWBA-BC (Rlativistic Plane Wave Born Approximation – Binding Correction) .....	26
II.2.3. Modèle SCA (Semi-Classical Approximation).....	27
II.2.4. Modèle BEA (Binary Encounter Approximation) .....	27
II.2.5. Modèle PSSA (Perturbed Stationary State Approximation) .....	27
II.3. Modèle PWBA (Plane Wave Born Approximation).....	28
II.3.1. Théorie de la diffusion - Approximation de Born.....	29
II.4. La théorie ECPSSR (modèle PWBA modifié).....	35
II.4.1. L'augmentation de l'énergie de liaison de l'électron atomique.....	36
II.4.2. Déflexion coulombienne du projectile.....	37
II.4.3. Effets relativistes.....	38
II.4.4. Correction de la Perte d'énergie de l'ion incident.....	38
II.5. La théorie ECPSSR corrigé.....	39
II.6. Section efficace de production de rayons X.....	41
Références Bibliographiques.....	45

### **CHAPITRE III**

#### **Calculs théoriques et semi-empiriques des sections efficaces d'ionisation et de production des rayons X des éléments atomiques $18 \leq Z \leq 92$ par des protons**

III.1. Introduction.....	48
III.2. Base des données des sections efficaces d'ionisation des couches L.....	49
III.3. Méthode et résultats.....	53
III.3.1. Calcule théorique de section efficace d'ionisation et de production.....	53
III.3.2. Calcul semi-empirique.....	56

## *Table des matières*

---

III.4. Résultats et duscusion.....	76
III.4.1. Erreur quadratique moyenne.....	76
III.4.2. Comparaison.....	76
Références Bibliographiques.....	78
<b>CONCLUSION.....</b>	<b>81</b>
<b>LEGENDES DES FIGURES ET DES TABLEAUX.....</b>	<b>83</b>
<b>PUBLICATIONS.....</b>	<b>87</b>

## **Introduction générale**

La physique atomique a été développée à partir du XX<sup>ème</sup> 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 premier 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.

Un effort considérable a été dirigé depuis les années cinquante du siècle passé vers l'étude de l'ionisation des orbites internes des atomes par des photons ou des particules chargées. Le progrès a été publié non seulement dans des études théoriques mais également dans le domaine des applications de ce phénomène. Une partie substantielle de cet effort a été consacrée à l'application des rayons X résultant de l'ionisation des orbites internes par des photons. Un atome est formé d'un noyau de charge  $+Ze$  ( $Z$  est le numéro atomique de l'élément) et de  $Z$  électrons de charge  $-e$ . Chaque électron, caractérisé par plusieurs nombres quantiques, a une énergie bien déterminée (négative car il est lié). Les électrons sont répartis par ordre d'énergie croissante en couches K, L, M, N, ..., correspondant au nombre quantique principal. Chaque couche comprend différentes sous-couches d'énergies voisines correspondant aux autres nombres quantiques. Les niveaux énergétiques des couches et sous-couches sont caractéristiques de chaque élément.

L'interaction coulombienne des particules chargées avec la matière se traduit globalement par un ralentissement des électrons, et l'énergie cinétique perdue se manifeste sous différentes formes : L'émission radiative des rayons X ou par des processus non radiatifs d'Auger ou de Coster-Kronig [1]. Le processus de l'ionisation des couches internes et la production des rayons X par des particules chargées ont été intensivement étudiées durant les quatre dernières décennies, principalement en raison des nombreux domaines d'application; tant en physique qu'en biologie ou en médecine ainsi en raison de leur importance pour la technique d'analyse par émission des rayons X induite par des particules

chargées (Particle Induced X-ray Emission - PIXE). Cette méthode d'analyse est basée sur l'ionisation des couches internes (K, L ou M) de l'atome cible par des particule chargée et sur la détection des rayons X caractéristique de l'élément ionisé [2]. Cette technique permet d'obtenir des informations quantitatives et qualitatives sur tous les éléments présents dans l'échantillon à étudier.

De nombreuses expériences sur la fluorescence X ont été élaboré, particulièrement à partir des années 1960, à cause du développement considérable au accélérateurs du type Van du Graaf ont connu un dans cette époque, pour l'ionisation des couches K et L. Les premières expériences concernant l'ionisation des couches L et M ont été effectuées pour des ions légers, principalement les particules alpha [3]. Avec le développement des détecteurs à semi-conducteur, des données plus précises et fiables sont devenues disponibles pour l'ionisation de la couche L et M par des ions légers et lourds [4-7].

Les modèles théoriques décrivant 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  $Z_1$  et  $Z_2$  sont les numéros atomiques du projectile et de la cible, respectivement. Les lacunes créées dans les couches internes sont produites principalement par le processus d'ionisation directe de Coulomb. Le modèle théorique le plus utilisé pour calculer la section efficace d'ionisation (de production) des couches internes est le modèle PWBA, ces modèles décrit par Merzbacher et Lewis [8] et Khandelwal et al. [3]. L'ensemble de ces calculs surestiment les valeurs expérimentales surtout à basse énergie de projectile [9]. La comparaison entre les valeurs théoriques calculées en utilisant le modèle PWBA et les valeurs expérimentales, montre bien le désaccord surtout à basse énergie. Pour améliorer l'accord entre la théorie et l'expérience, Brandt et Lapicki [10], et Lapicki et Mc Daniel [11], ont intégré quelques effets pour corriger le modèle PWBA, qui donne naissance au modèle ECPSSR. Ce modèle a été proposé dans le but de pallier aux insuffisances du modèle PWBA afin de rapporter un meilleur accord théorie-expérience. Il consiste à prendre en considération quelques effets correctifs non pris en compte dans la théorie PWBA (Plane Wave Born Approximation). Un des effets les plus importants qui a été négligé est : la

correction de l'énergie de liaison des électrons de l'atome cible. 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. Ceci nous a motivé d'adopter, dans le troisième chapitre, des méthodes semi-empiriques pour calculer les sections efficaces de production et d'ionisation totale de la couche L des éléments de numéros atomiques  $18 \leq Z \leq 92$ .

Le but de ce travail que nous apportons ici est de présenter une étude comparative des résultats expérimentaux et théoriques des sections efficaces d'ionisation et de production des rayons X pour les couches et les raies L par un faisceau de protons d'énergie comprise entre 0.02 et 10 MeV, pour les éléments de  $18 \leq Z \leq 92$ . Cette étude permet d'obtenir une relation analytique simple, basée sur une compilation des données expérimentales [12-14].

Dans un premier temps nous avons construit une nouvelle base des données des sections efficaces d'ionisation et de production expérimentales qui sera par la suite utilisée pour déduire les sections efficaces semi-empiriques à l'aide d'un programme numérique. Ensuite, un programme numérique, basé sur les corrections introduites sur le modèle PWBA (ECPSSR) et ECPSSR (eCPSSR), a été développé par notre équipe de recherche pour calculer les sections efficaces de production et d'ionisation totale de rayons X de la couche L.

Dans ce travail, nous avons présenté les résultats de calcul des sections efficaces de production et d'ionisation de la couche L des éléments de numéro atomique  $18 \leq Z \leq 92$  par des protons d'énergie comprise entre 0.02 MeV et 10 MeV. Cette thèse est divisée en trois chapitres:

- Dans le premier chapitre de ce travail nous avons présenté une étude sur les différents paramètres atomiques de la fluorescence X.
- Le second chapitre est consacré à la description des différents modèles théoriques pour décrire l'ionisation d'un atome par une particule chargée: les modèles théoriques PWBA, ECPSSR et le modèle ECPSSR corrigé nommé eCPSSR.
- Une comparaison entre les sections efficaces théoriques calculées dans le cadre du modèle ECPSSR et le modèle corrigé eCPSSR basé sur les données expérimentales a été effectuée. En suite en raison d'un écart important entre les sections efficaces

## *Introduction générale*

---

théoriques et les sections efficaces expérimentale il nous a semblait de rechercher des compromis entre les deux séries de valeurs nous utilisons des expressions semi-empiriques basés sur nos valeurs théoriques calculés par le modèle corrigé eCPSSR et les donnés expérimentales rassemblées. C'est le but du chapitre III.

## **Références Bibliographiques**

- [1] D. Coster and R. De L. Kronig, *Physica* 2 (1935) 13.
- [2] T.B. Johansson, K.R. Axelsson and S.A.E. Johansson, *Nucl. Instr. Meth.* 84 (1970) 141.
- [3] G.S. Khandelwal, B.H. Choi and E. Merzbacher, *Atom. Data and Nucl. Data Tables* 1 (1969) 103.
- [4] C. Busch, A. Bashkin, P. Nettles, S. Shafroth and A. Waltner, *Phys. Rev. A* 7 1601 (1973).
- [5] 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).
- [6] S. Thornton, R. McKnight and R. Karlowicz, *Phys. Rev. A* 10 219 (1974).
- [7] M. C. Andrews, F. D. McDaniel, J. L. Duggan, P. D. Miller, P. L. Pepmiller, H. F. Krause, T. M. Rosseel, L. A. Rayburn, R. Mehta and G. Lapicki, *Phys. Rev. A* 36, 3699 (1987).
- [8] E. Merzbacher and H.W.Lewis, *Encyclopedia of physics* Vol.34 Springer Veslag Berlin. (1958) 166.
- [9] W. Brandt and G. Lapicki, *Phys.Rev. A* 20 (1979) 465.
- [10] W. Brandt and G. Lapicki, *Phys. Rev. A* 23 (1981) 1717.
- [11] G. Lapicki and F.D. McDaniel, *Phys. Rev. A* 22 (1980) 1896 (Erratum *Phys. Rev. A* 23 (1981) 975).
- [12] A. Kahoul and M. Nekab, *Nucl. Instr. and Meth. B* 234 (2005) 412.
- [13] M. Nekab and A. Kahoul, *Nucl. Instr. and Meth. B* 245 (2006) 395.
- [14] I. Derradj, A. Kahoul, B. Deghfel, A. Bendjedi, F. Khalfallah, Y. Sahnoune, A. Bentabet and M. Nekkab, *Rad. Phys. Chem.* 121 (2016) 81.

**Chapitre I**  
**Paramètres atomiques et la fluorescence X**

## I.1. Introduction:

Le concept d'atome est particulièrement bien admis par le grand public. L'atome est donc un modèle essentiellement théorique. Bien que ce modèle ne soit plus aujourd'hui remis en cause, il a beaucoup évolué au cours du temps pour répondre aux exigences des nouvelles théories physiques et correspondre avec les différentes expérimentations effectuées. Les particules chargées et non chargées interagissent différemment avec la matière. Les particules chargées peuvent directement provoquer des excitations ou des ionisations, alors que les particules non chargées doivent d'abord subir une interaction créant une particule chargée qui pourra ensuite exciter ou ioniser la matière. C'est pourquoi les particules chargées sont dites directement ionisantes alors que les particules non chargées sont dites indirectement ionisantes. L'excitation des rayons X par des particules chargées présente un grand intérêt pratique. Ce processus d'interaction rayonnement-matière est dominé par l'ionisation directe de Coulomb par impact d'ions légers avec la cible, menant ainsi à la création des lacunes (états électroniques vacants). L'atome cible retrouve alors sa stabilité (désexcitation) par émission radiative des rayons X ou par des processus non radiatifs d'Auger ou de Coster-Kronig.

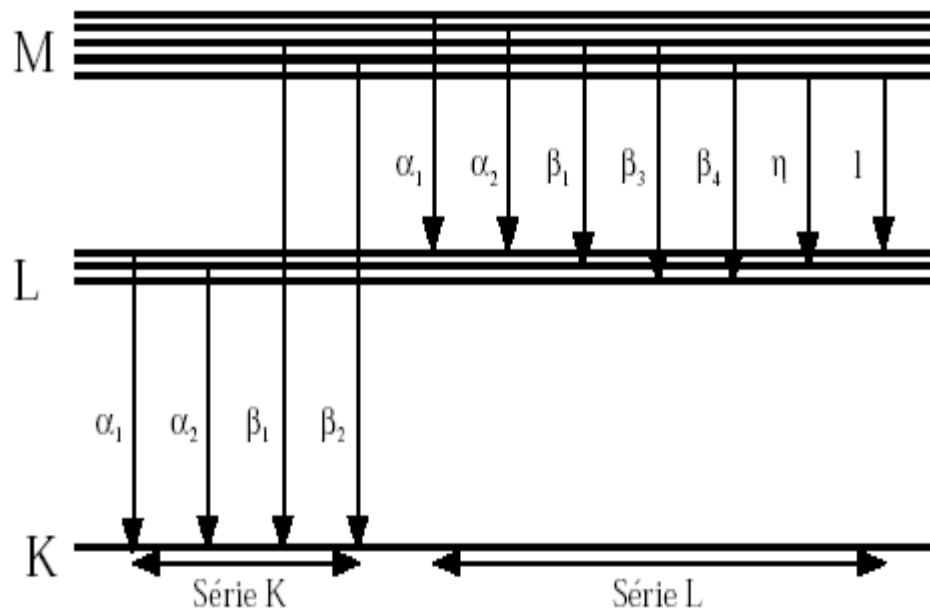
## I.2. Organisation des couches électroniques:

Pour un atome  ${}^A_Z X$  nous utiliserons pour décrire le comportement des électrons considéré, des fonctions semblables à celles obtenues dans le cas de l'atome d'hydrogène. A partir des fonctions hydrogénoïdes (charge  $Ze$  du noyau), on construit par produit tensoriel la fonction d'onde totale de l'atome, Ces fonctions ne sont pas identiquement les mêmes puisque les noyaux atomiques diffèrent et qu'il faudra tenir compte de la présence des autres électrons, mais elles ont la même forme.

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 [1].

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 réparti 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  $2n^2$ , le 2 provient du principe de Pauli [2].

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



**Figure I.1:** Transitions permises entre électrons les couches K L et M

Tableau I.1: La configuration électronique et le moment angulaire total.

Couche	Sous-couche	Caractéristique de l'électron
K	K	1s ( $j=1/2$ )
L	L <sub>1</sub>	2s ( $j=1/2$ )
	L <sub>2</sub>	2p ( $j=1/2$ )
	L <sub>3</sub>	2p ( $j=3/2$ )
M	M <sub>1</sub>	3s ( $j=1/2$ )
	M <sub>2</sub>	3p ( $j=1/2$ )
	M <sub>3</sub>	3p ( $j=3/2$ )
	M <sub>4</sub>	3d ( $j=3/2$ )
	M <sub>5</sub>	3d ( $j=5/2$ )
N	N <sub>1</sub>	4s ( $j=1/2$ )
	N <sub>2</sub>	4p ( $j=1/2$ )
	N <sub>3</sub>	4p ( $j=3/2$ )
	N <sub>4</sub>	4d ( $j=3/2$ )
	N <sub>5</sub>	4d ( $j=5/2$ )
	N <sub>6</sub>	4f ( $j=5/2$ )
	N <sub>7</sub>	4f ( $j=7/2$ )

### I.3. Règles de sélections:

L'émission de rayons X obéit à un certain nombre de règles découlant de la mécanique quantique. Toutes les transitions électroniques possibles ne sont pas "permises"; celles qui le sont doivent satisfaire aux règles de sélection suivantes :

$$\begin{aligned} n &\neq 0 \\ l &= \pm 1 \\ j &= 0, \pm 1 \end{aligned} \quad (\text{I.1})$$

Où  $l$  et  $j$  sont respectivement les nombres quantiques associés aux moments angulaires orbitaux et totaux de l'électron en transition [3]. La figure (I.2) illustre quelques transitions permises.

### I.4. Transitions électroniques:

#### I.4.1. Transitions entre niveaux:

Sous l'influence d'un événement venant de l'extérieur (arrivée d'une particule chargée ou d'un rayonnement d'énergie suffisante), un électron du cortège électronique d'un atome, situé sur un certain niveau d'énergie  $E_x$  (rappelons que cette énergie est négative), peut être arraché de la couche à laquelle il appartient [4]. La place libre est susceptible d'être comblée par un électron situé sur un autre niveau d'énergie  $E_y > E_x$ , avec émission d'un rayonnement électromagnétique; la fréquence  $\nu$  de celui-ci, est telle que :

$$h \nu = E_y - E_x \quad (\text{I.2})$$

Avec  $h$  est la constante de Planck ( $6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ ).

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 discontinues.

Si un électron de la couche K est arraché et remplacé par un électron de la couche L, une raie appelée  $K_\alpha$  est émise, et pour l'électron qui arrive sur la couche K provient de la couche M, la raie correspondante est appelée  $K_\beta$  et  $K_\gamma$  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.5. Notation de Siegbahn:**

Cette notation empirique est très utilisée en spectrométrie des rayons X. Dans une série donnée en nomenclature, l'émission X correspondant à la transition d'un électron d'une couche quelconque vers une autre couche A telle que  $A = K, L, M, N \dots$ , constitue la raie A.

Pour identifier les différentes raies A qui correspondent à différentes transitions électroniques vers une même couche, deux notations sont généralement utilisées: la notation de Siegbahn et la notation IUPAC [2].

La notation de Siegbahn consiste à utiliser la lettre correspondante à la raie A 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  $K_{\alpha 1}$ . Tandis que 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 [5].

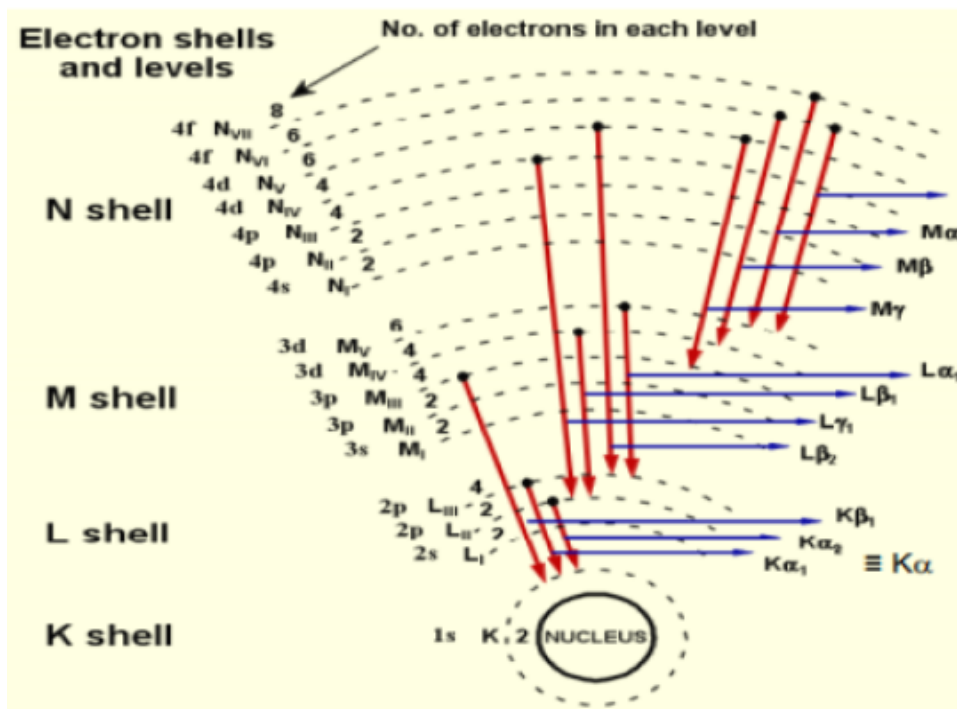


Figure I-2: Niveaux d'énergies et quelques transitions électroniques permises.

**I.6. 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 a montré que la fréquence d'une raie donnée (par exemple  $K_{\alpha 1}$ ) était proportionnelle au carré du nombre atomique, suivant la relation:

$$=K_1 (Z-K_2)^2 \tag{I.3}$$

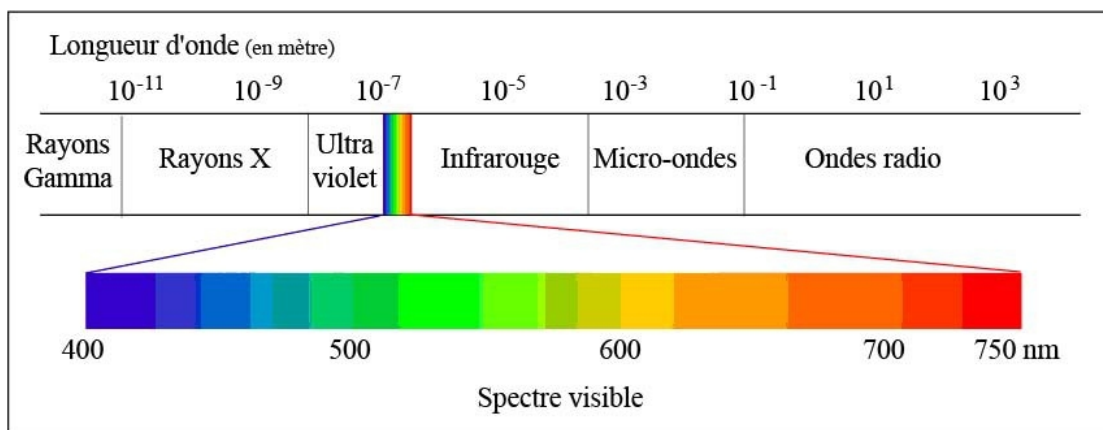
Où  $K_1$  et  $K_2$  sont des constantes ayant des valeurs définies pour chaque raie (constantes d'écran) [2].

**I.7. Le rayonnement:**

Le rayonnement est une énergie qui traverse l'espace où la matière est transportée sous forme d'ondes ou de particules [6]. Il existe deux types de rayonnements :

- Électromagnétique : rayonnement qui est issu de différents champs électromagnétiques comme les ondes radioélectriques, les ondes lumineuses, visibles ou invisibles et les rayons X et gamma.
- Corpusculaire : radiations dues aux particules : protons, électrons ou neutrons.

Les rayonnements sont caractérisés par leur longueur d'onde, leur fréquence et leur énergie, ils peuvent être des ondes radio, TV, micro-ondes, infrarouge, visible, ultraviolet, rayons X ou gamma.



**Figure I.3:** Les rayonnements électromagnétiques.

Certaines formes de ce rayonnement peuvent détacher les électrons des atomes, c'est-à-dire les ioniser, lorsqu'elles traversent la matière. Ce processus s'appelle le rayonnement ionisant comme Les particules alpha et bêta et les rayons X et gamma; par contre d'autres types de rayonnements, comme les micro-ondes et les ondes radio, ne changent pas la structure des atomes et produisent un rayonnement non ionisant [7].

### I.7.1. Les rayons X:

Les rayons X ont été découverts en 1895 par le physicien allemand W. Röntgen à Würzburg. Il baptise les rayons qu'il a découverts "Rayons X" avec le "X" comme l'inconnue en Mathématiques. Le pouvoir des rayons X, qui a semblé merveilleux, de traverser des parois opaques et de révéler l'intérieur du corps humain a immédiatement donné un grand retentissement populaire à cette découverte scientifique. Les premières applications ont été tournées vers l'étude des cristaux car on espérait mettre en évidence les atomes constitutifs des molécules et confirmer ainsi la justesse du nombre d'Avogadro [8].

Donc les rayons X sont des ondes électromagnétiques (OEM), de même nature que les ondes radio, la lumière ou les micro-ondes, Ce sont des perturbations des champs électriques et magnétiques ambiants qui se propagent. La longueur d'onde est de l'ordre de  $10^{-8}$  à  $10^{-12}$  m avec une énergie comprise entre 40 et  $4 \cdot 10^5$  eV.

Ces ondes sont en fait découpées en petits paquet d'onde, appelés photons. Elles sont caractérisées par sa fréquence de vibration et par leur amplitude. La longueur d'onde  $\lambda$  est la distance que parcourt l'onde pendant une période, soit:

$$\lambda = c \times T = \frac{c}{\nu} \quad (1.4)$$

Où T est la période :  $T = \frac{c}{\nu}$

L'énergie portée par ces photons est donnée par:

$$E = h \nu = h \frac{c}{\lambda} \quad (1.5)$$

### I.8. Interactions matière-rayons X:

Lorsqu'un faisceau de rayons X traverse la matière, il est atténué suite à différentes interactions; l'ionisation où l'excitation du rayonnement électromagnétique avec les atomes de la matière traversée. 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, à chaque transition correspond l'émission d'une raie caractéristique [2].

#### I.8.1. Excitation:

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 [8]. 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  $E_c$  est l'atome se retrouve ionisé, on a alors :

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

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.

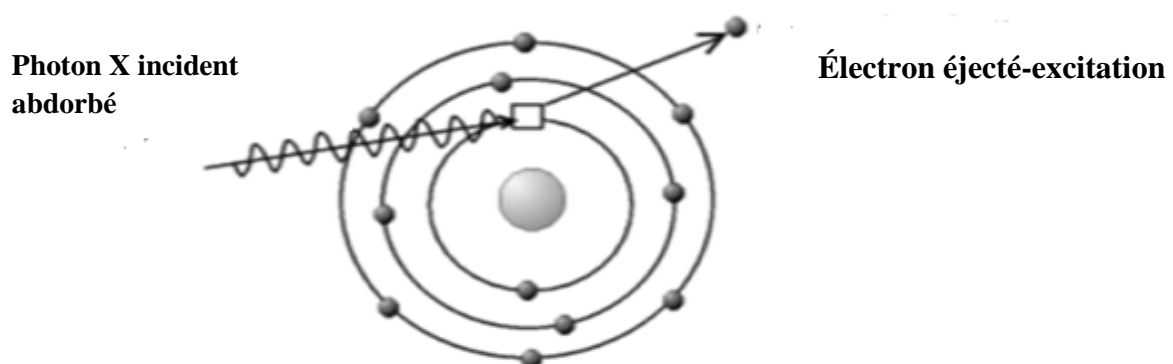
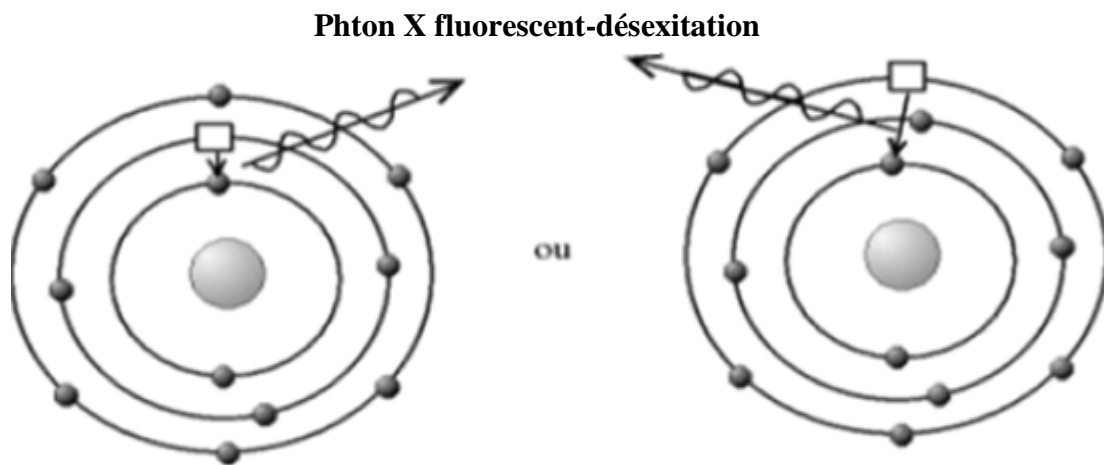


Figure I.4 : Ionisation par effet photoélectrique

### I.8.2. Désexcitation:

L'atome ionisé se trouve dans un état excité et instable. Le retour à l'état fondamental se fait par des transitions électroniques depuis les niveaux d'énergie supérieure vers le niveau vacant, en suivant soit une désexcitation radiative (fluorescence), soit une désexcitation non radiative (effet Auger).



**Figure I.5:** Désexcitation par émission fluorescente

### I.9. Fluorescence X:

Un électron d'une couche périphérique va redescendre pour combler la place laissée vide par l'électron qui a été éjecté. L'électron va perdre de l'énergie, qui va être émise sous la forme d'un photon. L'énergie de ce photon, qui est aussi dans le domaine X, est égale à la différence d'énergie entre la couche périphérique et la couche au cœur, donc chaque atome va émettre des photons d'une énergie propre. C'est le phénomène de « fluorescence », où « d'émission caractéristique » [8].

Il peut y avoir plusieurs transitions électroniques possibles; donc, pour un élément donné peut émettre plusieurs types de photons. Pour nommer ces différents types de photons, on utilise la notation donnée par Karl Siegbahn en 1927. Ainsi, on parle de photon  $K_{\alpha 1}$ ,  $K_{\alpha 2}$ ,  $K_{\beta 1}$ ,  $K_{\beta 2}$ ,  $L_{\alpha 1}$  ...

### I.9.1. Principes de la fluorescence X:

Dans un analyseur FRX, 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 interagissent 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 [9].

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 d'élément :

$$E = E_X - E_Y \quad (I.7)$$

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 :

$$E = E_K - E_{L_2} \quad (I.8)$$

La transition est alors dite radiative [10].

### I.10. Effet Auger:

Le photon de fluorescence est émis lorsqu'un électron des couches supérieures prend la place laissée vacante par l'électron éjecté. Parfois, le photon de fluorescence produit un nouvel effet photoélectrique avec émission d'un électron: c'est l'effet Auger.

D'autres transitions non radiatives, appelées transitions "Coster- Kronig", peuvent avoir lieu entre les sous niveaux d'une même couche. Il existe un cas très rare dit transition super Coster-Kronig où les trois électrons (celui émis par interaction, celui qui comble la lacune et celui qui est émis par des excitations) appartiennent au même niveau énergétique [11].

#### I.10.1. Principes de l'effet Auger:

Le principe de l'émission Auger dans un atome pour une transition ABC est symbolisé sur la figure (I.6). Une excitation extérieure (rayons X, faisceau d'électrons) arrache un

électron de la couche A. L'atome passe alors de son état d'énergie fondamental à un état d'énergie excité correspondant à l'ionisation de la couche A [12]. La désexcitation peut alors se faire de deux manières, soit par émission d'un photon, soit par émission d'un électron Auger, cette dernière étant la plus probable dans la gamme d'énergie 0-3 KeV. Dans ce cas, un électron de la couche B comble le trou de la couche A et l'énergie ainsi libérée est communiquée à un électron de la couche C qui est alors émis: c'est l'électron Auger.

L'énergie de l'électron Auger correspond à la différence d'énergie entre les états énergétiques sous la forme :

$$E_{cin}(ABC) = E_L(A) - E_L(B) - E_L(C) \quad (I.9)$$

Où  $E_L(A)$  et  $E_L(B)$  sont les énergies de liaison respectivement de l'électron A et de l'électron B.  $E_L(C)$  est l'énergie nécessaire à l'émission de l'électron C quand il y a déjà un trou sur B.

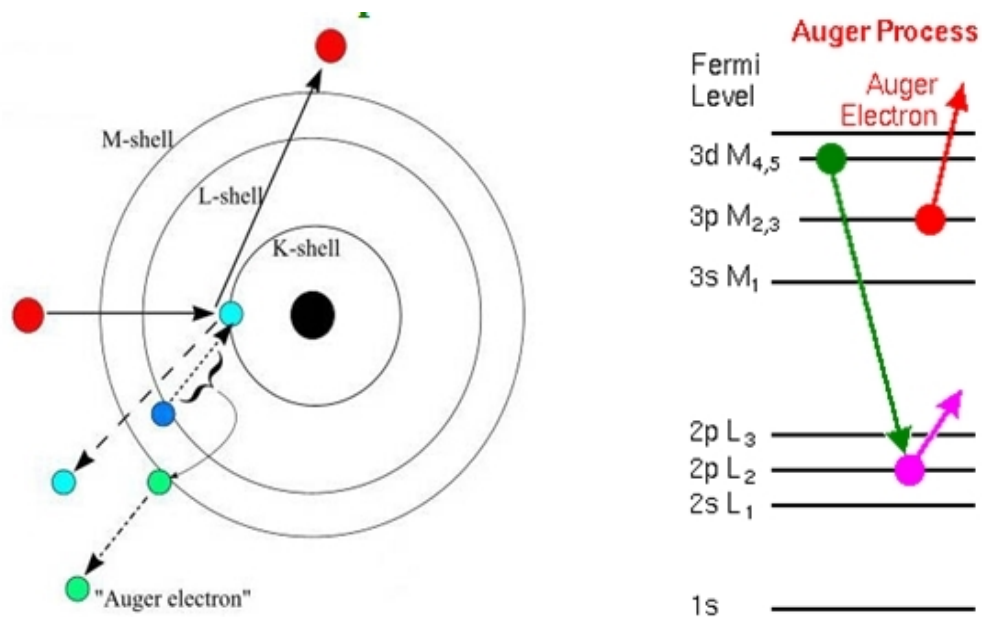


Figure I-6: Représentation schématique d'une transition Auger.

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, ces derniers induisent une ionisation dans une couche plus externe  $L_3$ ; qui consiste en une émission d'électron avec une énergie cinétique :

$$E_{\text{cin}} = E_K - E_{L_2} - E_{L_3} \quad (\text{I.10})$$

Et on note une transition de type  $KL_2L_3$  [10].

Les transitions Auger de type LMM et MNN, conséquences une ionisation des couches L et M respectivement. Or, il y a une forte probabilité pour que ces deux derniers types de transition se produisent dans les éléments de numéro atomique élevés [13].

### I.11. Rendement de fluorescence:

Soit un atome ionisé en couche X ( $X=K, L_1, L_2, \dots$  etc). L'ionisation a libéré un électron atomique, à la photo-ionisation en particulier correspond une photo électron. Mais, le cortège électronique de l'atome se réorganise avec l'émission de rayonnements (fluorescence X dans le cas de la photo-ionisation) et aussi avec émission d'électrons dits « électrons Auger », par référence aux travaux de Pierre Auger (effet Auger) [14].

On définit le rendement de fluorescence  $\omega_K$  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 :

$$\omega_k = \frac{N_X}{N} = \frac{N_X}{N_X + N_A} \quad (\text{I.11})$$

Où  $N$  est le nombre initial de lacunes électroniques,  $N_X$  et  $N_A$  étant le nombre de transitions radiatives et nombre de transitions Auger respectivement.

Cette définition n'est cependant vraie que pour la couche K [3].

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

$$\tau_K = \frac{\sigma_K^X}{\sigma_K^I} \tag{I.12}$$

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

En 1955, Burhop proposa une expression empirique de ce rendement tenant compte des effets relativistes :

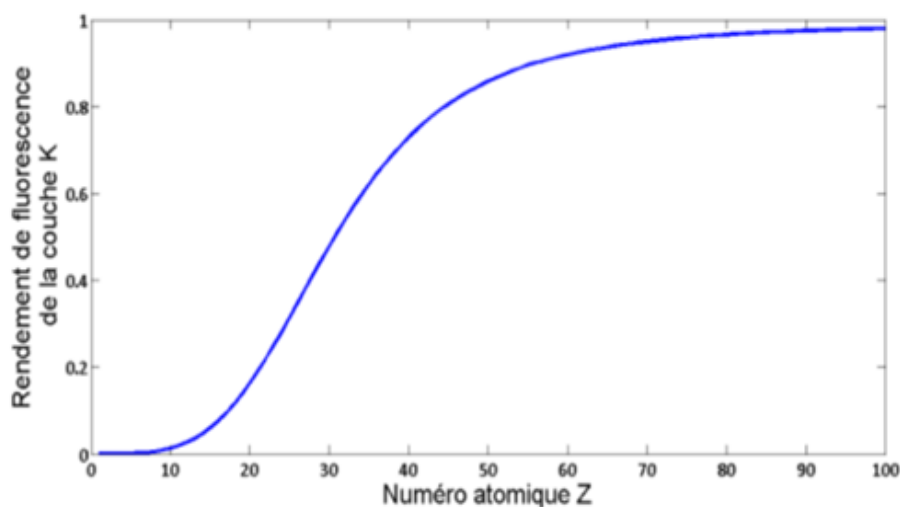
$$\left(\frac{\omega_K}{1-\omega_K}\right)^{1/4} = A + BZ + CZ^3 = p(Z) \tag{I.13}$$

Où Z est le numéro atomique et A, B, C des coefficients constants.

En 1972, Bambynek précisa les valeurs des coefficients du modèle de Burhop à partir de mesures expérimentales. Le rendement de fluorescence  $\omega_K$  est donc fourni de manière semi-empirique par :

$$\tau_K = \frac{p^4(Z)}{1+p^4(Z)} \text{ avec } p(Z) = A + BZ + CZ^3 \text{ et } \left. \begin{array}{l} A = 0.015 \pm 0.01 \\ B = 0.0332 \pm 0.0005 \\ C = -(0.64 \pm 0.07) \cdot 10^{-6} \end{array} \right\} \tag{I.14}$$

L'expression du rendement de fluorescence pour les orbites supérieures est plus compliquée car celles-ci sont composées de plusieurs sous orbites.



**Figure I.7:** Le rendement de fluorescence en fonction du numéro atomique Z pour la couche K [15].

**I.11.1. Transitions de Coster-Kronig:**

Pour les couches L, M,...etc, la définition précédente du rendement de fluorescence n'est plus valable [16]. 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 ou Auger n'ait lieu. 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.11.2. Le rendement de fluorescence en absence et en présence de transitions de Coster-Kronig:**

L'expression du rendement de fluorescence pour les orbites supérieures est plus compliquée, car les transitions de Coster-kronig peuvent se produire. Ces transitions sont de type non radiatif et se déroulent entre les sous couches d'une couche ayant le même nombre quantique principal. En effet, les transitions de Coster-Kronig modifient la distribution des sous couches ionisées en transférant l'ionisation d'une sous couche à une autre moins énergétique [17].

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

$$\omega_{ji} = \frac{\sigma_{ji}^X}{\sigma_{ji}^I} \quad (\text{I.15})$$

Et le rendement totale de la couche  $j$  est égal à :

$$\omega_j = \sum_{i=1}^K N_{ji} \omega_{ji} \quad (\text{I.16})$$

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

$$N_{ji} = \frac{\sigma_{ji}^X}{\sum_i \sigma_{ji}^I} \quad (\text{I.17})$$

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

$$\eta_j = \sum_{i=1}^K V_{ji} \eta_{ji} \quad (I.18)$$

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 est supérieure à 1 et ils sont égaux à :

$$\begin{aligned} V_{j1} &= N_{j1} \\ V_{j2} &= N_{j2} + f_{12}^j N_{j1} \\ V_{j3} &= N_{j3} + f_{23}^j N_{j2} + (f_{13}^j + f_{12}^j f_{23}^j) N_{j1} \end{aligned} \quad (I.19)$$

Où les  $f_{ij}^j$  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 s'appellent transition de Coster-Kronig, et elles sont liées comme suit:

$$\begin{aligned} V_{L1} &= N_{L1} \\ V_{L2} &= N_{L2} + f_{12}^L N_{L1} \\ V_{L3} &= N_{L3} + f_{23}^L N_{L2} + (f_{13}^L + f_{12}^L f_{23}^L) N_{L1} \end{aligned} \quad (I.20)$$

Où  $f_{12}, f_{13}$  et  $f_{23}$  sont respectivement les probabilités des transitions Coster-Kronig entre  $L_1L_2$ ,  $L_1L_3$  et  $L_2L_3$ .

De plus, la largeur totale  $\Gamma_{Ti}$  d'un niveau d'énergie (l'atome avec une lacune est dans un état excité) est la somme de largeur de rayonnements (radiatifs)  $\Gamma_{Xi}$ , la largeur non-radiative  $\Gamma_{ai}$  et la largeur de Coster-Kronig  $\Gamma_{ki}$ . Alors, le rendement de fluorescence est donc donné par :

$$\eta_i = \frac{\Gamma_{Xi}}{\Gamma_{Ti}} \quad (I.21)$$

Le rendement d'Auger est :

$$a_i = \frac{\Gamma_{ai}}{\Gamma_{Ti}} \quad (I.22)$$

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

$$f_{ik} = \frac{\Gamma_{k_i}}{\Gamma_{T_i}} \tag{I.23}$$

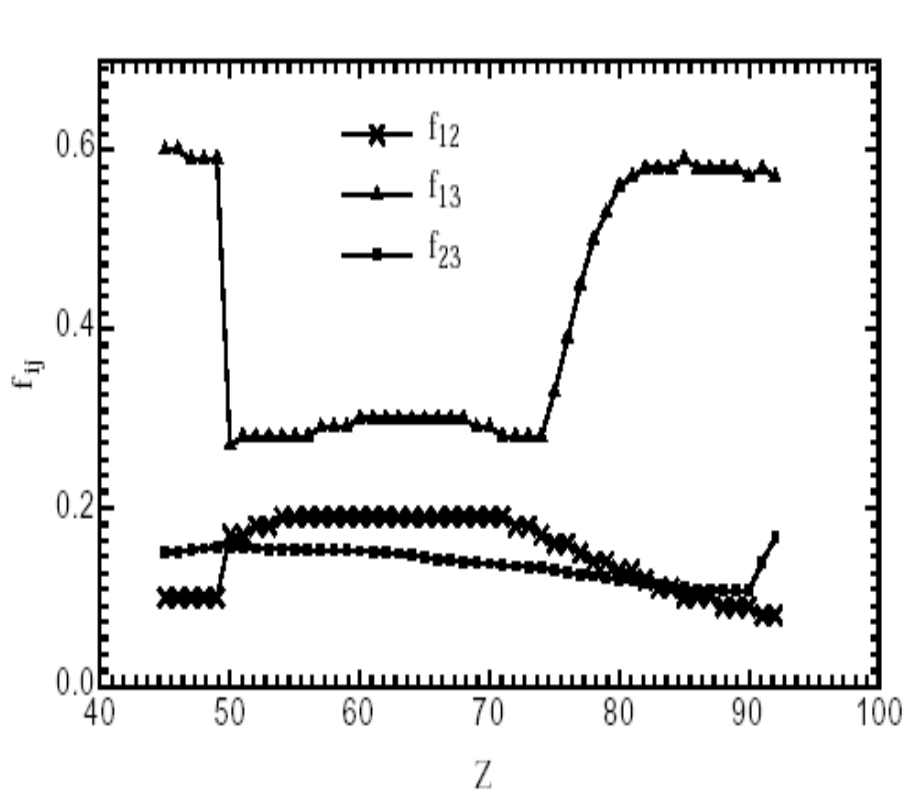


Figure I.8: Transition de Coster-Kronig [18].

### I.11.3. La probabilité totale:

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

$$= \omega_i^k + a_i^k + \sum_{j=i+1}^k f_{ij}^k = 1 \tag{I.24}$$

$\omega_i^k$  rendement de fluorescence,  $a_i^k$  rendement d'émission Auger et  $f_{ij}^k$  est le rendement Coster-Kronig [17].

**Références Bibliographiques**

- [1] M. Ayadim and J. L. Habib, Chimie Générale, Presses universitaires de Louvain Edition, Paris, 1oct 2013.
- [2] D. Benoit, F. Grillon, F. Maurice, J. Ruste and R. Tixier, Microanalyse par sonde électronique : Spectrométrie de Rayons X, Hoggar Edition, Paris, 1987.
- [3] B. Beladel, Thèse de Doctorat, Ouargla, 2/12/2015.
- [4] S. Boufas, Thèse de Magister de l'université Constantine, 09/11/2004.
- [5] M. O. Krause, J. Phys. Chem. Ref. Data 8, 1979.
- [6] M. Souques, Champs électromagnétiques, environnement et santé, Springer Science & Business Media Edition, 2 févr 2011.
- [7] W. K. Belgium, Rayonnements Ionisants, Hans Suijkerbuijk Edition, 2014.
- [8] M. Benslimane, Thèse de Magister de l'université Constantine 2004.
- [9] J. Lynch, Analyse Physico-Chimique des Catalyseurs Industriels, Editions TECHNIP, Paris, 2001.
- [10] H. Ben Abdelouahed, Thèse de Doctorat de l'université de Tunis El Manar, 2004.
- [11] T. Dupuis, Thèse de Doctorat université de Liege, 2012.
- [12] B. Imelik and J. C. Védrine, Les Techniques physiques d'étude des catalyseurs, Technip Editions, Paris, 1988.
- [13] D. Landolt, Corrosion et chimie de surfaces des métaux, PPUR presses polytechniques fédérale de Lausanne Editions, janv1997.
- [14] Y. Cauchois and J. Despujols, Techniques de l'ingénieur, 10/06/1990.
- [15] D. El Hajjar, Thèse de Doctorat de l'université Nantes Angers le Mans, 24/06/2014.
- [16] J. Aspiazu, Thèse de Doctorat de l'université Louis Pasteur de Strasbourg, 20 Décembre 1991.
- [17] W.Bambyenk, B.Carsemann, W.Fink, H.U Freund, H.Mark, C.D.Swift, R.E.Price and P.V. Rao, Rev. Mod, Phys 44,716, 1972.
- [18] D. Strivay, thèse de Doctorat, Université de Liege, 2002.

**Chapitre II**  
**Modèles théoriques**

**II.1. Introduction:**

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. Nous étudierons dans cette section 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. De plus, certaines approximations sont faites pour simplifier le traitement analytique :

- (i) les particules sont supposées sans spin;
- (ii) aucune prise en compte de la structure interne des particules incidentes et de la cible;
- (iii) la cible est une cible mince, ce qui empêche toute diffusion multiple;
- (iv) il n'y a pas de cohérence entre les ondes diffusées par les différentes particules de la cible. Ceci permet de considérer le flux de particule détectées comme la somme des flux diffusés par chacune des  $N$  particules de la cible ou comme  $N$  fois le flux diffusé par l'un des particules de la cible ;
- (v) On considère que l'interaction entre la particule incidente et la particule cible se fait via un potentiel de la forme  $V(r_1 - r_2)$  où  $r_1$  et  $r_2$  sont respectivement les vecteurs positions des particules incidente et cible . De plus, on se place le système du centre de masse, c'est-à-dire que l'on considère les diffusions d'une particule unique par le potentiel  $V(r)$  dont la masse est  $\mu$  définie comme :

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

Où  $M_1$  et  $M_2$  sont respectivement les masses des particules incidente et cible. On définit alors la section efficace différentielle de diffusion  $\sigma(\theta, \varphi)$  comme :

$$dn = F_i \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \quad (\text{II.2})$$

Avec  $dn$  étant le nombre de particules détectées,  $F_i$ , le flux incident de particules et  $d\Omega$  l'angle solide de détection.  $\sigma(\theta, \varphi)$  a une dimension de surface,  $\sigma(\theta, \varphi)$  est appelée "section

efficace de diffusion" dans la direction  $(\theta, \varphi)$ . On mesure les sections efficaces en barns ( $1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$ ).

Dans le calcul de la section efficace, nous avons implicitement supposé que la collision entre l'ion incident et l'électron orbital de l'atome cible est une collision coulombienne élastique, et l'ion incident doit être considéré comme une charge ponctuelle, est décrit par des fonctions d'onde planes avant et après la collision.

## **II.2. Section efficace d'ionisation par particules chargées:**

Des particules chargées légères (proton ou alpha) sont le plus souvent utilisées comme projectiles. Dans la gamme d'énergie considérée, soit 0.1 à 10 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 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 [1]. Parmi les modèles les plus couramment employés, on peut citer :

### **II.2.1. Modèle PWBA (Plane Wave Born Approximation):**

Approche développée par Merzbacher et Lewis [2]. Le projectile est assimilé à une onde plane se déplaçant selon une trajectoire rectiligne, les états électroniques sont décrits par des fonctions d'onde hydrogénoïde.

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 [3].

### **II.2.2. Modèle RPWBA-BC (Relativistic Plane Wave Born Approximation – Binding Correction):**

C'est un développement du modèle précédent dû à Mukoyama et Sarcadi [4]. Les auteurs décrivent les électrons par des fonctions d'ondes hydrogénoïdes relativistes. Ils

incluent l'accroissement des énergies de liaison des électrons périphériques pendant la pénétration du projectile dans le cortège électronique de l'atome cible.

### II.2.3. Modèle SCA (Semi-Classical Approximation):

Développé par Bang et Hasteen [5-7] pour compenser les insuffisances du modèle PWBA à basse énergie. La condition nécessaire pour sa validité est :

$$\frac{2Z_1Z_2e^2}{\hbar V_1} \ll 1 \quad (\text{II.3})$$

Sous cette condition, le mouvement du projectile dans le champ du noyau cible est traité classiquement alors que les transitions électroniques sont traitées par la mécanique quantique. Le modèle tient compte de la déflexion coulombienne du projectile dans le champ du noyau cible en considérant des trajectoires hyperboliques.

Il conduit à des résultats identiques à ceux obtenus dans le modèle PWBA pour des particules d'énergie élevée.

### II.2.4. Modèle BEA (Binary Encounter Approximation):

Dans ce modèle développé par Garcia et al [8-9] l'ionisation est attribuée à un échange direct d'énergie entre le projectile et l'électron lié de l'atome cible. Le rôle du noyau cible est d'assurer la répartition des quantités de mouvement dans le système. Les résultats obtenus coïncident assez bien avec l'expérience pour des projectiles d'énergie élevée [3].

En outre, à section efficace d'ionisation de la couche  $K$  obéit à une loi universelle exprimée ainsi :

$$\sigma_K = \left(\frac{Z_1}{I_K}\right)^2 f\left(\frac{E}{\lambda I_K}\right) \quad (\text{II.4})$$

et  $f\left(\frac{E}{\lambda I_K}\right)$  est une fonction donnée par Stanislas [22].

### II.2.5. Modèle PSSA (Perturbed Stationary State Approximation):

Dans ce modèle proposé par Basbas et al [11-13] des fonctions d'onde perturbées sont utilisées pour décrire les électrons cibles.

Ce modèle a été successivement perfectionné pour inclure les effets suivants :

- ✓ Déflexion coulombienne du projectile dans le champ du noyau cible par Brandt et Lapicki [14] et Lapicki et Losonsky [15].
- ✓ Effets relativistes par Brandt et Lapicki [16].
- ✓ Capture d'électrons de l'atome cible par le projectile par Lapicki et Losonsky [17].
- ✓ Variation de l'énergie du projectile dans le champ du noyau cible [18-20].

L'apport de toutes ces corrections a conduit à l'élaboration du modèle ECPSSR (Energy Loss, Coulomb Deflexion, Perturbated Stationary State, Relativistic Effects).

### II.3. Modèle PWBA (Plane Wave Born Approximation):

Le premier modèle théorique utilisé pour décrire l'ionisation d'un atome par une particule chargée est le modèle de l'Approximation d'Onde Plane de Born PWBA (Plane Wave Born Approximation) élaboré pour la première fois par Merzbacher et Lewis en 1958 [2]. Dans ce modèle on considère que l'ionisation d'une couche atomique après passage d'un ion dans la cible est résultat de l'interaction coulombienne inélastique entre le projectile et un électron lié de l'atome. On utilise la théorie des perturbations au premier ordre pour décrire cette interaction et il est basé sur les hypothèses suivantes:

- i) La vitesse du projectile  $v_1$  est inférieure ou égale à la vitesse de l'électron atomique  $v_2$  concerné ;  $v_1 \leq v_2$

autre condition sur l'énergie est :

$$E = \frac{4MmE}{(M+m)^2} \gg \frac{4m}{M} E \gg I_n \quad (\text{II.5})$$

$I_n$  est l'énergie d'ionisation atomique.

$E$  et  $M$  sont, respectivement, l'énergie et la masse du projectile.

$m$  est la masse de l'électron.

$\Delta E$  représente l'énergie transférée dans une collision à un électron au repos.

Cette hypothèse implique que même à ;  $v_1 \leq v_2$  l'ionisation atomique pourra avoir lieu car l'énergie cinétique du projectile  $\left( \frac{1}{2} M v_1^2 \right)$  peut être grand devant l'énergie d'ionisation de l'électron atomique.

- ii) Le projectile est une charge ponctuelle de longueur d'onde inférieure à l'unité en unité atomique :

$$\lambda \left( = \frac{h}{Mv_1} \right) \ll 1 \tag{II.6}$$

Signifiant aussi en unité atomique :  $k_i \gg 1$

En unité coulombienne  $\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v_1} \ll 1$  soit  $v_1 \gg Z_1 v_0$ .

Où  $\vec{k}_i$  est le vecteur d'onde de l'ion incidente,  $v_0$  est la vitesse de Bohr.

$Z_1, Z_2$  représentent, respectivement, le numéro atomique du projectile et de l'atome cible.

Cette seconde condition implique que l'on omet l'interaction nucléaire entre le projectile et le noyau de l'atome cible; de même cette condition définit de l'utilisation de la théorie des perturbations. Les deux conditions excluent les collisions lentes ( $v_1 \approx v_2$ ) ainsi que celles avec les atomes légers ( $Z_1 \approx Z_2$ ). Les hypothèses précédentes se réduisent en une seule

$$Z_1 v_0 v_1 \ll v_2 \tag{II.7}$$

Dans leur calcul de la section efficace d'ionisation, Merzbacher et Lewis utilisent la théorie des perturbations et l'approximation de Born en se basant sur le formalisme de Green.

La section efficace d'ionisation  $\sigma$ , entre deux particules en collision est défini par :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 \mu} \left| \int_i \vec{k}_f f(\theta, \varphi) \right|^2 \tag{II.8}$$

Où  $k_i$ , et  $k_f$  sont les vecteurs d'onde incidente et sortant,  $f(\theta, \varphi)$  est l'amplitude de diffusion, qu'on déterminera plus loin.

### II.3.1. Théorie de la diffusion - Approximation de Born:

Nous allons maintenant calculer la section efficace de diffusion en résolvant l'équation de Schrödinger. L'Hamiltonien du problème de la collision de deux particules en interaction coulombienne s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}) \tag{II.9}$$

On va considérer les états stationnaires de l'équation de Schrödinger correspondante.

L'équation de Schrödinger décrivant l'évolution de la particule diffusée par le potentiel

$V(\mathbf{r})$  admet des solutions d'énergie  $E$  bien définies:

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (\text{II.10})$$

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

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \quad (\text{II.11})$$

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

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad (\text{II.12})$$

et

$$V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2\mu} U(\vec{r}) \quad (\text{II.13})$$

L'équation de Schrödinger devient alors :

$$[\Delta + k^2 - U(\vec{r})] \varphi(\vec{r}) = 0 \quad (\text{II.14})$$

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  $v_k^{\text{diff}}(\vec{r})$  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

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

$$v_k^{\text{diff}}(\vec{r}) = e^{ikz} + \text{onde diffusée} \quad (\text{II.15})$$

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

(i) Dans une direction  $(\theta, \varphi)$  donnée, sa dépendance radiale est en  $\frac{e^{ikr}}{r}$ . En effet, c'est une onde divergente de même énergie que l'onde incidente. Le facteur  $\frac{1}{r}$  provient des trois dimensions alors :

$$(\Delta + k^2) \frac{e^{ikr}}{r} = 0 \quad (\text{II.16})$$

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  $(\theta, \varphi)$ .

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

$$v_k^{\text{diff}}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{=} e^{ikz} + f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{II.17})$$

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

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

$$\sigma(\theta, \varphi) = |f_k(\theta, \varphi)|^2 \quad (\text{II.18})$$

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

$$f_k(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-k_f r} U(r) v_k^{\text{diff}}(r) d^3r \quad (\text{II.19})$$

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 :

$$\begin{aligned} f_k(\theta, \varphi) &= -\frac{1}{4\pi} \int e^{-k_f r} U(r) e^{ik_i r} d^3r \\ &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle \end{aligned} \quad (\text{II.20})$$

où  $\vec{k}_i$  est le vecteur d'onde incident.

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

$$d^2\sigma = \frac{k_f}{k_i} \left( \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |\langle \Psi_f | U | \Psi_i \rangle|^2 d\Omega \quad (\text{II.21})$$

Dans le développement de la PWBA [2], [11], 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 appliquer 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 :

$$d^2\sigma = 8\pi Z_1^2 \left( \frac{e^2}{\hbar V_1} \right)^2 \frac{d\vec{q}}{q^3} |F_s(\vec{q})|^2 d\epsilon \quad (\text{II.22})$$

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 :

$$W Z_{2s} R = \epsilon = T + I_s \quad (\text{II.23})$$

$$K = a_s k \text{ et } Q = (a_s q)^2 \quad (\text{II.24})$$

où  $a_s = \frac{a_0}{Z_{2s}}$  représente le rayon de la couche atomique considérée.

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

$$I_s = \frac{Z_{2s}^2 R}{S^2} \theta_s, \text{ énergie d'ionisation de la couche atomique.}$$

La section efficace d'ionisation peut donc être réécrite sous la forme :

$$\sigma_s^{\text{PWBA}}(\eta_s, \theta_s) = \frac{\sigma_{0s}}{\eta_s} \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} dW \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} |F_{w,s}(Q)|^2 \frac{dQ}{Q^2} \quad (\text{II.25})$$

où :

$$\eta_s = \frac{m_e E}{M_1 Z_{2S}^2 R} = \frac{1}{Z_{2S}^2} \left( \frac{\hbar V_1}{e^2} \right)^2 \quad (\text{II.26})$$

et

$$\sigma_{0S} = 8\pi a_0^2 \frac{Z_1^2}{Z_{2S}^4} \quad (\text{II.27})$$

Posons :

$$f_s(\eta_s, \theta_s) = \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} dW \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} |F_{W,S}(Q)|^2 \frac{dQ}{Q^2} \quad (\text{II.28})$$

$F_{W,S}(Q)$  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  $\epsilon$ .

Les facteurs de forme pour  $S = K, L1, L2$  et  $L3$  sont obtenues par Benka et Kropf [21], en utilisant des fonctions d'ondes hydrogénoïdes. Les mêmes fonctions ont été déterminées par Stanislas [10] 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 :

$$\begin{aligned} Q_{\min} &= \left( \frac{M}{m} \right)^2 \eta_s \left[ 1 - \left( 1 - \frac{mW}{M\eta_s} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^2 \\ Q_{\max} &= \left( \frac{M}{m} \right)^2 \eta_s \left[ 1 + \left( 1 - \frac{mW}{M\eta_s} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^2 \\ W_{\min} &= \left( \frac{M}{m} \right) \eta_s \\ W_{\max} &= \left( \frac{\theta_s}{n^2} \right) \end{aligned} \quad (\text{II.29})$$

On peut écrire l'équation (II.28) sous la forme :

$$\sigma_s^{\text{PWBA}}(\eta_s, \theta_s) = \frac{\sigma_{0S}}{\theta_s} F_s \left( \frac{\eta_s}{\theta_s^2} \right) \quad (\text{II.30})$$

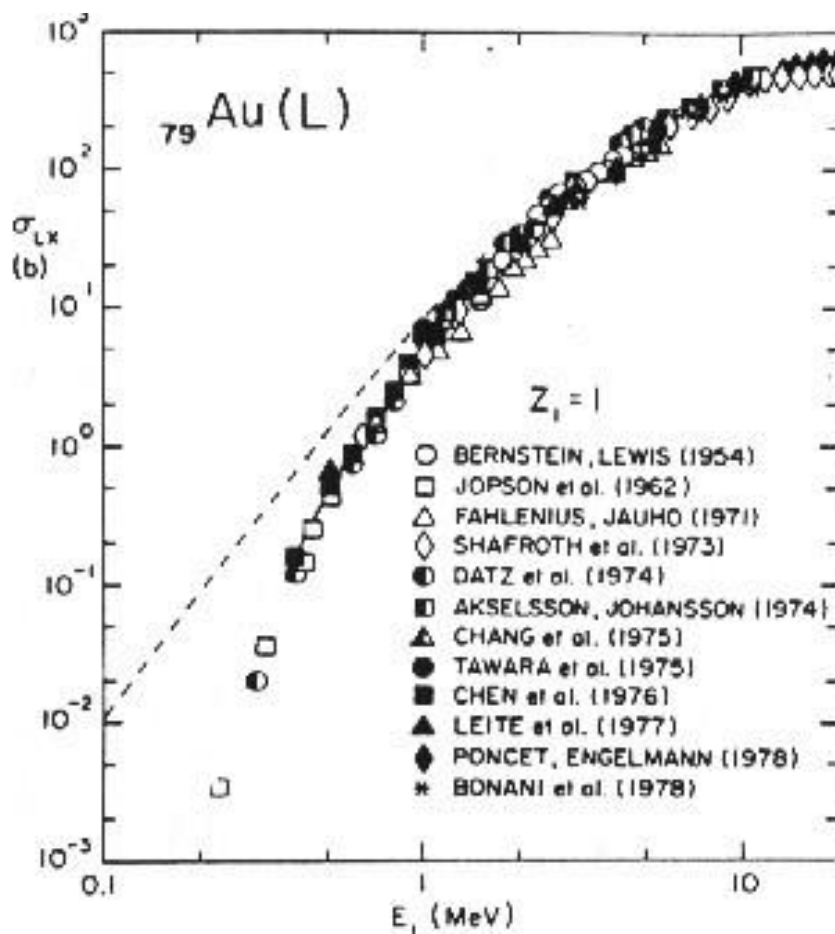
avec :

$$F_s(y) = \frac{\theta_s}{\eta_s} f_s(\eta_s, \theta_s) \quad (\text{II.31})$$

$$\theta_s = \frac{\hbar I_{2s}}{Z_{2s}^2 R} \quad (\text{II.32})$$

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

Comme on peut le voir sur la Figure II.1 montrant une comparaison entre des valeurs expérimentales et théoriques de la section efficace d'ionisation de la couche L pour une cible d'or par des protons, l'approximation de Born permet de reproduire la tendance générale de la courbe mais s'écarte assez fortement des valeurs expérimentales, surtout pour des particules incidentes de basse énergie. De plus, les valeurs théoriques sont systématiquement plus importantes que des données expérimentales. Ces écarts importants peuvent être réduits en tenant compte d'effets qui n'apparaissent pas directement dans l'approximation de Born.



**Figure II.1:** Comparaison entre les sections efficaces calculées par le modèle PWBA et les valeurs expérimentales des orbitales L de l'Or par des protons [16].

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 orbitales 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 orbitales 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.

#### II.4. La théorie ECPSSR (modèle PWBA modifié):

Ce modèle a été proposé par Brandt et Lapicki [14], dans le but d'améliorer l'accord entre l'expérience et les calculs du modèle PWBA. Il consiste à tenir compte de certains effets qui n'étaient pas considérés directement dans l'approximation de Born. Un des effets les plus importants qui a été négligé est la déviation coulombienne de la particule incidente par le noyau cible. En effet, cette interaction empêche toute pénétration profonde de la particule dans les orbitales internes, ce qui réduit la section efficace d'ionisation d'autant plus que la particule incidente est lente. De plus, dans l'approximation de Born, deux isotopes produisent la même section efficace. Or, l'isotope le plus massif pénètre plus profondément dans les orbitales internes et devrait donc produire une plus grande section efficace. Toutefois, l'interaction coulombienne avec le noyau cible ne peut pas expliquer, à elle seule une si grande différence. En effet, on doit aussi tenir compte notamment des corrections venant de la perturbation des orbitales électroniques provoquée par le passage de la particule chargée incidente qui entraîne une augmentation de l'énergie de liaison des électrons. Ces corrections successives ont mené à la formulation du modèle ECPSSR, qui corrige la section efficace d'ionisation calculée dans le cadre de l'approximation de Born. Outre les corrections d'énergie de liaison des électrons (PSS - Perturbed Stationary-States) et de déviation coulombienne par 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) sont intégrés dans la formulation de la section efficace d'ionisation [24-25].

#### II.4.1. L'augmentation de l'énergie de liaison de l'électron atomique:

Lors du processus d'ionisation, les états atomiques sont perturbés par le passage des particules chargées incidentes. 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 [12]. 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 devient alors [24-25]:

$$\sigma_s^{\text{PSS}} = \sigma_s^{\text{PWBA}}(\eta_s, \zeta_s \theta_s) \quad (\text{II.33})$$

où  $\zeta_s$  est un facteur de correction de l'énergie de liaison de la couche S.

Le facteur  $\zeta_s$  a été déterminé numériquement par plusieurs auteurs, notamment Basbas et al. [11] et Cohen et al. [22].

Dans ce travail, nous avons choisi d'utiliser le facteur introduit par Cohen et al. défini par :

$$\zeta_s = 1 + \left( \frac{2Z_1}{Z_{2s}\theta_s} \right) (g_s - h_s) \quad (\text{II.34})$$

Pour la couche L, les fonctions  $g_s$  et  $h_s$  sont données par :

$$g_{L1} = \left( \frac{1 + 9\xi_s + 31\xi_s^2 + 49\xi_s^3 + 162\xi_s^4 + 63\xi_s^5 + 18\xi_s^6 + 1.97\xi_s^7}{(1 + \xi_s)^9} \right) \quad (\text{II.35})$$

$$g_{L2,L3} = \left( \frac{1 + 10\xi_s + 45\xi_s^2 + 102\xi_s^3 + 331\xi_s^4 + 6.7\xi_s^5 + 58\xi_s^6 + 7.8\xi_s^7 + 0.888\xi_s^8}{(1 + \xi_s)^{10}} \right) \quad (\text{II.36})$$

$$h_s = \frac{2S}{\theta_s \xi_s^3} \text{I} \left( \frac{C_s S}{\xi_s} \right) \quad (\text{II.37})$$

où  $\xi_s = \left( \frac{2V_1}{\theta_s V_{2s}} \right)$  est la vitesse réduite du projectile.

$$V_{2s} = \frac{Z_{2s}}{S} \quad (\text{II.38})$$

avec :  $C_{L1} = 1.50$  et  $C_{L2} = C_{L3} = 1.25$ .

La fonction  $I(x_s)$  est donnée par :

$$I(x) = \begin{cases} 2 \frac{e^{-2x}}{x^{1,6}} & 3 \leq x < 11. \\ e^{-2x} \left( 0.031 + 0.21x^{\frac{1}{2}} + 0.005x - 0.069x^{\frac{3}{2}} + 0.324x^2 \right)^{-1} & 0.035 \leq x < 3. \\ \frac{3}{4} \pi \left[ \ln \left( \frac{1}{x^2} \right) - 1 \right] & 0 < x < 0.035. \end{cases} \quad (\text{II.39})$$

$$\text{où } x = \frac{C_s S}{\xi_s}.$$

#### II.4.2. Déflexion coulombienne du projectile:

Pour des particules lentes, l'approximation de Born donne des sections efficaces qui peuvent différer de plusieurs ordres de grandeur par rapport aux valeurs expérimentales. 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 [24-25]. Les trajectoires linéaires adoptées jusqu'ici pour les particules incidentes seront remplacées par des trajectoires hyperboliques.

On définit alors le coefficient  $C(dq_{0s})$  qui représente alors la correction coulombienne [22,26]:

$$C_s(dq_{0s}) = v E_{v+1} \left( \frac{2\pi d q_{0s}}{z(1+z)} \right) \quad (\text{II.40})$$

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

$$E_m(y) = \frac{e^{-y}}{(y+m)} \left[ 1 + \frac{m}{(y+m)^2} + \frac{m(m-2y)}{(y+m)^2} + \dots \right] \quad (\text{II.41})$$

$d = \left( \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{\mu V_1^2} \right)$ , est la distance minimale d'approche du projectile au noyau cible.

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

En tenant compte de l'effet de déflexion coulombienne, l'expression (II.30) prend la forme :

$$\sigma_s^{CPWBA} = C_s(d q_{0s}) \sigma_s^{PWBA}(\eta_s, \theta_s) \quad (\text{II.42})$$

#### II.4.3. Effets relativistes:

Cette correction tient compte du caractère relativiste des électrons des orbites internes particulièrement pour les atomes lourds [24-25]. Cette correction est introduite dans l'expression de la masse relativiste de l'électron selon l'expression [16, 19, 23-25]:

$$m_s^R(\xi_s) = \left[ 1 + \beta Y_s^2 \right]^{\frac{1}{2}} + Y_s \quad (\text{II.43})$$

où  $\beta$  est un paramètre qui varie lentement, ( $\beta=1.1$ ) [16].

avec :

$$Y_{L_1} = \frac{0.4 \left( \frac{Z_{2s}}{C} \right)^2}{S \xi_{L_1}} \quad (\text{II.44})$$

$$Y_{L_2, L_3} = \frac{0.15 \left( \frac{Z_{2s}}{C} \right)^2}{\xi_{L_2, L_3}} \quad (\text{II.45})$$

Cette correction relativiste est introduite dans l'expression de la section efficace en remplaçant le paramètre de l'énergie réduite  $\eta_s$  par  $m_s^R(\xi_s) \eta_s$ . L'expression de la section efficace s'écrit alors :

$$\sigma_s^{PWBAR} = \sigma_s^{PWBA}(m_s^R(\xi_s) \eta_s, \theta_s) \quad (\text{II.46})$$

#### II.4.4. Correction de la Perte d'énergie de l'ion incident:

La dernière correction de la section efficace d'ionisation dans l'approximation de Born est la perte d'énergie de la particule incidente. En effet, 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 [24-25]. 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 :

$$\sigma_s^{\text{EPWBA}} = f_s(z) \sigma_s^{\text{PWBA}} \quad (\text{II.47})$$

avec :

$$f_s = f_s(z) = 2^{-\nu} (\nu - 1)^{-1} \left[ (\nu z - 1)(1 + z)^\nu + (\nu z + 1)(1 - z)^\nu \right] \quad (\text{II.48})$$

$$\text{et } z = \sqrt{1 - \frac{4\xi_s}{\mu \xi_s^2 \theta_s}} \quad (\text{II.49})$$

En prenant en considération les effets correctifs apportés au modèle PWBA, nous aboutissons au modèle ECPSSR dans lequel la section efficace d'ionisation s'écrit :

$$\sigma_s^{\text{ECPSSR}} = \nu E_{\nu+1} \left( \frac{2\pi d q_{0s} \xi_s}{z(1+z)} \right) \sigma_s^{\text{PWBA}} \left( m_K^R(\xi_s) \eta_s, \zeta_K \theta_K \right) \quad (\text{II.50})$$

### II.5. La théorie ECPSSR corrigée:

La section efficace d'ionisation des couches atomiques calculé par le modèle PWBA peut être écrite d'une autre manière plus précise en introduisant, en unités de  $(Z_1 - s) 2Ry$ , les grandeurs :  $\epsilon_s = n^2 U_s / Z_s^2 Ry$  (énergie de liaison réduite d'électron),  $\epsilon_s = mE / MZ_s^2 Ry$  (énergie réduite ionique),  $W = \frac{1}{2} \frac{Q^2}{m}$  (énergie transférée du projectile à l'électron éjecté) et  $Q = (q a_0 / Z_s)^2$  (carré de l'impulsion transférée du projectile), comme [ 31]:

$$\sigma_s^{\text{PWBA}} = (2j+1) 4 a_0^2 \left( \frac{Z_1}{Z_s} \right)^2 \frac{1}{s} \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} dW \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} \frac{dQ}{2} |F_{W,s}(Q)|^2 \quad (\text{II.51})$$

Avec les limites d'intégration :

$$Q_{\min}^{\max} = \left( \frac{M}{m} \right)^2 s \left( \mp \sqrt{\frac{mW}{sM}} \right)^2 \quad (\text{II.52})$$

$$W_{\min} = \frac{s}{n^2} \quad (\text{II.53})$$

$$W_{\max} = \frac{M}{m} s \quad (\text{II.54})$$

Où  $Z_1$  est le numéros de charge du projectile,  $n$  nombre quantique principal,  $\epsilon$  est la perte d'énergie du projectile à l'électron éjecté,  $m$  est la masse d'électron,  $U_s$  est l'énergie de liaison observée de l'électron atomique,  $Z_s = Z_2 - 4.15$  est la charge effective est une charge

nucléaire efficace vu par un électron dans une couche atomique interne de la cible avec le numéro de charge  $Z_2$ ,  $a_0$  est le rayon de Bohr de l'atome d'hydrogène,  $E$  and  $M$  sont respectivement l'énergie de projectile et la masse dans le centre du système de collision,,  $Ry$  est la constante de Rydberg et  $F_{W,s}(Q)$  est le facteur de forme défini par Benka and Kropf [27] pour  $s = K, L_1, L_2, L_3$ .

Pour développer la théorie PWBA proposé par Brandt and Lapicki [18] quelques effets correctifs sont incorporé telque la perte d'énergie du projectile lors de l'ionisation ( $E$ ) , la déviation coulombienne du projectile due à son interaction avec le noyau ( $C$ ) ; l'augmentation de l'énergie de liaison des électrons atomiques (PSS- Perturbed Stationnary-States), l'effet dû au caractère relativiste des électrons ( $R$ ) [28].

Ces corrections sont introduisent dans l'expression du section efficace définit par le modèle PWBA par multiplication du section efficace par le facteur de la déviation colombienne  $C_s$  outre en changeant  $m_s$  par  $m_s^R$  ou  $m_s^R$  est un facteur de correction de l'énergie de liaison de la couche  $S$ . multiplier  $m$  par la fonction de correction relativiste  $m_s^R(\beta_s)$ , ou  $\beta_s$  est la vitesse réduite du projectile; Comme il est indiqué par Šmit and Lapicki [26] que ce serait faux évaluer  $Q_{min}$  et  $Q_{max}$  en remplaçant  $m_s$  dans l'équation (II.52) par  $m_s^R$  donné sous la forme:

$$m_s^R = m_s \gamma_s \tag{II.55}$$

La solution de ce problème consiste à multiplier le facteur  $m_s^R$  par la masse des électrons aux repos  $m$  partout où elle se produit. Cela a conduit à des limites d'intégration correctes :

$$Q_{\min}^{\max} = \left( \frac{M}{m_s^R m} \right)^2 \gamma_s \left( \mp \sqrt{\frac{m_s^R m W}{\gamma_s M}} \right)^2 \tag{II.56}$$

En outre, il est intéressant de distinguer la théorie ECPSSR de Brandt et Lapicki [18], qui incorpore les fonctions  $f_s$  pour tenir compte de la perte d'énergie, des sections efficaces eCPSSR calculées ici avec des limites exactes.

## II.6. Section efficace de production de rayons X:

Trois ensembles de valeurs des probabilités de transition de Coster-Kronig  $f_{ij}$  et de rendements de fluorescences  $\omega_i$  de sous-couches Li sont disponibles dans la littérature. La première compilation est due à Krause [29], elle consiste en des valeurs semi-empiriques de  $\omega_i$  et de  $f_{ij}$  pour les éléments de numéros atomiques compris entre:  $18 \leq Z \leq 110$ . La deuxième est basée sur le modèle relativiste DHS (Dirac-Hartree-Slater), les valeurs sont données par Chen et al. [30] pour 25 éléments dans le groupe  $18 \leq Z \leq 96$ . La troisième est donnée par Puri et al. [31], le calcul est basé sur la méthode DHS en utilisant les transitions radiatives et non radiatives, pour les éléments de  $25 \leq Z \leq 96$ .

Des valeurs moyennes des rendements de fluorescence  $\omega_i$  pour les éléments de  $25 \leq Z \leq 110$ , sont calculées par Ôz et al. [32]. Le même groupe a mesuré les probabilités des transitions de Coster-Kronig ( $f_{12}$ ,  $f_{23}$ ,  $f_{13}$ ) pour des éléments de numéros atomiques compris entre  $59 \leq Z \leq 90$  [33]. Une étude systématique pour les sections efficaces de productions des raies L, et des rendements de fluorescence pour différents éléments de  $40 \leq Z \leq 92$  en fonction des énergies des photons incidents sont données par Ertugrul et al. [34].

Pour le calcul des taux d'émission des rayons X, il existe deux méthodes :

- (i) La première est basée sur le modèle DHS (Dirac-Hartree-Slater), donnée par Scofield [35] pour tous les éléments de  $5 \leq Z \leq 104$ .
- (ii) La deuxième est basée sur le modèle DHF (Dirac-Hartree-Fock) [36], inclut des valeurs pour 21 éléments choisis dans la région  $18 \leq Z \leq 94$ .

Les tabulations de la section efficace de photo ionisation théorique sont données par Scofield [37], ce calcul est basé sur le modèle DHS. Ces tabulations sont faites pour des sections efficaces de photo-ionisation théoriques totales pour des énergies des photons comprises entre 1-1500 KeV pour des éléments avec  $1 \leq Z \leq 101$ , pour les couches K, et les sous-couches Li ( $i = 1, 2, 3$ ) et Mi ( $i = 1, 2, 3, 4, 5$ ).

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 fluorescences de sous couches L1, L2 et L3 et les probabilités de transitions de Coster-Kronig, et les taux d'émission

de rayons X pour les différentes transitions. La section efficace de production des raies L sera calculée à partir des expressions suivantes:

$$\sigma_{L\alpha} = [(f_{13} + f_{12}f_{23})\sigma_{L1} + f_{23}\sigma_{L2} + \sigma_{L3}] \omega_3 F_{3\alpha} \quad (\text{II.57})$$

$$\sigma_{L\beta} = [\omega_1 F_{1\beta} + f_{12}\omega_2 F_{2\beta} + (f_{13} + f_{12}f_{23})\omega_3 F_{3\beta}] \sigma_{L1} + (\omega_2 F_{2\beta} + f_{23}\omega_3 F_{3\beta})\sigma_{L2} + \omega_3 F_{3\beta}\sigma_{L3} \quad (\text{II.58})$$

$$\sigma_{L\gamma} = (\omega_1 F_{1\gamma} + f_{12}\omega_2 F_{2\gamma})\sigma_{L1} + \omega_2 F_{2\gamma}\sigma_{L2} \quad (\text{II.59})$$

avec:

$\sigma_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) est la section efficace d'ionisation calculées dans le modèle ECPSSR,  $\omega_i$  les rendements de fluorescences du sous-couche Li,  $f_{ij}$  ( $i = 1, 2; j = 2, 3$ ) sont les probabilité de transitions de Coster-Kronig,  $F_{iy}$  ( $y = \alpha, \beta, \gamma$ ) est le taux d'émission de rayons X :

$$F_{iy} = \frac{\Gamma_{iy}}{\Gamma_i} \quad (\text{II.60})$$

avec:

$\Gamma_i$  est la probabilité d'une transition électronique vers le niveau Li et  $\Gamma_{iy}$  est la probabilité de l'émission d'un rayon  $L_y$  ( $y = \alpha, \beta, \gamma$ ), par exemple :  $F_{3\alpha} = \frac{\Gamma_{3\alpha}}{\Gamma_3}$ , avec  $\Gamma_3$  est la probabilité d'une transition électronique vers le niveau L3 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  $L\alpha_1$  et  $L\alpha_2$  respectivement.

On aura aussi:

$$\Gamma_{1\beta} = \Gamma_1(M_2, M_3 \rightarrow L_1) + \Gamma_1(M_4, M_5 \rightarrow L_1) \quad (\text{II.61})$$

$$\Gamma_{1\gamma} = \Gamma_1(N_2, N_3 \rightarrow L_1) + \Gamma_1(O_2, O_3 \rightarrow L_1) \quad (\text{II.62})$$

$$\Gamma_{2\beta} = \Gamma_2(M_4 \rightarrow L_2) + \Gamma_2(M_3 \rightarrow L_2) \quad (\text{II.63})$$

$$\Gamma_{2\gamma} = \Gamma_2(N_1 \rightarrow L_2) + \Gamma_2(N_4 \rightarrow L_2) + \Gamma_2(O_1, O_4 \rightarrow L_2) \quad (\text{II.64})$$

$$\Gamma_{3\alpha} = \Gamma_3(M_4 \rightarrow L_3) + \Gamma_3(M_5 \rightarrow L_3) \quad (\text{I.65})$$

$$\Gamma_{3\beta} = \Gamma_3(N_1 \rightarrow L_3) + \Gamma_3(N_4 \rightarrow L_3) + \Gamma_3(N_5 \rightarrow L_3) + \Gamma_3(O_1 \rightarrow L_3) + \Gamma_3(O_4, O_5 \rightarrow L_3) \quad (\text{II.66})$$

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  $L_3$ .

Dans notre calcul de la section efficace de production de rayons-X, nous avons utilisé les  $\omega_i$  et  $f_{ij}$  à partir des compilations de Krause [29], et les  $F_{iy}$  par Scofield [35], voir tableaux II.1.

**Tableau II.1:** Rendements de fluorescence de sous-couches L1 , L2 et L3 , probabilités de transition Coster-Kronig [29] et les taux d'émissions de rayons X [35].

Z	$\omega_1$	$\omega_2$	$\omega_3$	$f_{12}$	$f_{13}$	$f_{23}$	$F_{3\alpha}$	$F_{1\beta}$	$F_{2\beta}$	$F_{3\beta}$	$F_{1\gamma}$	$F_{2\gamma}$
50	0.037	0.065	0.064	0.17	0.27	0.157	0.858	0.816	0.864	0.108	0.165	0.110
51	0.039	0.069	0.069	0.17	0.28	0.156	0.852	0.809	0.858	0.114	0.171	0.116
52	0.041	0.074	0.074	0.18	0.28	0.155	0.847	0.802	0.853	0.119	0.178	0.122
53	0.044	0.079	0.079	0.18	0.28	0.154	0.842	0.794	0.848	0.124	0.185	0.127
54	0.046	0.083	0.085	0.19	0.28	0.154	0.837	0.786	0.843	0.129	0.192	0.132
55	0.049	0.090	0.091	0.19	0.28	0.154	0.833	0.780	0.839	0.133	0.196	0.136
56	0.052	0.096	0.097	0.19	0.28	0.153	0.827	0.773	0.835	0.137	0.204	0.141
57	0.055	0.103	0.104	0.19	0.29	0.153	0.823	0.768	0.831	0.141	0.209	0.144
58	0.058	0.110	0.111	0.19	0.29	0.153	0.823	0.769	0.833	0.141	0.207	0.144
59	0.061	0.117	0.118	0.19	0.29	0.153	0.822	0.767	0.829	0.142	0.207	0.145
60	0.064	0.124	0.125	0.19	0.30	0.152	0.822	0.766	0.829	0.143	0.208	0.146
61	0.066	0.132	0.132	0.19	0.30	0.151	0.822	0.764	0.829	0.144	0.209	0.147
62	0.071	0.140	0.139	0.19	0.30	0.150	0.820	0.762	0.829	0.144	0.209	0.148
63	0.075	0.149	0.147	0.19	0.30	0.149	0.820	0.761	0.828	0.145	0.209	0.149
64	0.079	0.158	0.155	0.19	0.30	0.147	0.817	0.758	0.825	0.146	0.210	0.151
65	0.083	0.167	0.164	0.19	0.30	0.145	0.817	0.757	0.825	0.146	0.210	0.151
66	0.089	0.178	0.174	0.19	0.30	0.143	0.816	0.757	0.825	0.146	0.210	0.151
67	0.094	0.189	0.182	0.19	0.30	0.142	0.815	0.755	0.825	0.146	0.210	0.152
68	0.100	0.200	0.192	0.19	0.30	0.140	0.815	0.754	0.825	0.146	0.210	0.152
69	0.106	0.211	0.201	0.19	0.29	0.139	0.815	0.753	0.824	0.147	0.211	0.152
70	0.112	0.222	0.210	0.19	0.29	0.138	0.814	0.751	0.823	0.147	0.211	0.153
71	0.120	0.234	0.220	0.19	0.28	0.136	0.813	0.747	0.822	0.148	0.212	0.154
72	0.128	0.246	0.243	0.18	0.28	0.135	0.810	0.745	0.817	0.149	0.214	0.158
73	0.137	0.258	0.243	0.18	0.28	0.134	0.807	0.741	0.814	0.150	0.215	0.159
74	0.147	0.270	0.255	0.17	0.28	0.133	0.804	0.737	0.814	0.151	0.217	0.162
75	0.144	0.283	0.268	0.16	0.33	0.130	0.801	0.734	0.812	0.157	0.219	0.165
76	0.130	0.295	0.281	0.16	0.39	0.128	0.798	0.730	0.808	0.160	0.221	0.168
77	0.120	0.308	0.294	0.15	0.45	0.126	0.794	0.726	0.804	0.164	0.222	0.172
78	0.114	0.321	0.306	0.14	0.50	0.124	0.791	0.722	0.801	0.155	0.223	0.175
79	0.107	0.334	0.320	0.14	0.53	0.122	0.787	0.718	0.797	0.156	0.225	0.178
80	0.107	0.347	0.333	0.13	0.56	0.120	0.784	0.715	0.794	0.157	0.227	0.178
81	0.107	0.360	0.347	0.13	0.56	0.118	0.781	0.709	0.791	0.158	0.228	0.184
82	0.112	0.373	0.360	0.12	0.57	0.116	0.777	0.705	0.788	0.159	0.229	0.187
83	0.117	0.387	0.370	0.11	0.58	0.113	0.774	0.700	0.785	0.160	0.231	0.191
84	0.122	0.401	0.386	0.11	0.58	0.111	0.771	0.695	0.782	0.182	0.232	0.193
85	0.128	0.415	0.399	0.10	0.59	0.111	0.768	0.690	0.779	0.184	0.233	0.196
86	0.134	0.429	0.411	0.10	0.58	0.110	0.765	0.684	0.777	0.186	0.234	0.199
87	0.139	0.443	0.424	0.10	0.58	0.109	0.762	0.679	0.774	0.188	0.235	0.201
88	0.146	0.456	0.437	0.09	0.58	0.108	0.759	0.674	0.772	0.191	0.236	0.204
89	0.153	0.468	0.450	0.09	0.58	0.108	0.756	0.669	0.768	0.193	0.237	0.206
90	0.161	0.479	0.463	0.09	0.57	0.108	0.753	0.663	0.766	0.195	0.238	0.209
91	0.162	0.472	0.476	0.08	0.58	0.139	0.751	0.658	0.764	0.196	0.238	0.211
92	0.176	0.467	0.489	0.08	0.57	0.168	0.749	0.653	0.761	0.201	0.239	0.213

**Références bibliographiques:**

- [1] P. Moretto and L. Beck, Techniques de l'ingénieur, 2003.
- [2] E. Merzbacher and H.W. Lewis, Encyclopedia of physics, Springer Verlag Berlin Edition, 1958.
- [3] A. Kahoul, Thèse de Doctorat, Université Ferhat Abbas Sétif, 2006.
- [4] T. Mukoyama and L. Sarkadi, Phys.Rev. A 25, 1982.
- [5] J. Bang, J.M. Hasteen and K. Dan. Vidensk Selsk, Mat. Phys. Medd. Dan. Vid. Selsk, 1959 N°13.
- [6] J. M. Hansteen and O.P. Mosebek, Z. Phys. 234 (1970) 281.
- [7] J. M. Hansteen and O.P. Mosebek, Adv. in Atom. and Mol. Phys.11 (1975) 299.
- [8] J. D. Garcia, Phys. Rev. A1(1970) 280.
- [9] J. D. Garcia, Phys.Rev. A1(1970) 1402.
- [10] W. Stanislas, Thèse doctorat de 3<sup>ème</sup> cycle Grenoble (1973).
- [11] G. Basbas, W. Brandt and R. Laubert, Phys. Rev. A7 (1973) 983.
- [12] G. Basbas, W. Brandt and R.H. Ritchie, Phys. Rev. A7 (1973) 1971.
- [13] G. Basbas, W. Brandt and R. Laubert, Phys.Rev.A17 (1978) 1655.
- [14] W. Brandt and G. Lapicki, Phys. Rev. A10 (1974) 474.
- [15] G. Lapicki and W. Losonsky, Phys. Rev. A20 (1979) 481.
- [16] W. Brandt and G. Lapicki, Phys. Rev. A20 (1979) 465.
- [17] G. Lapicki and W. Losonsky, Phys. Rev. A15 (1977) 896.
- [18] W. Brandt and G. Lapicki, Phys. Rev. A20 (1981) 1717.
- [19] G. Lapicki and A.R. Zander, Phys.Rev. A23 (1981) 2072.
- [20] G. Lapicki, J. Phys. B 20.L (1987) 633.
- [21] O. Benka and A.Kropf, Atom. Data Nucl. Data Tables 22 (1978) 219.
- [22] D. D. Cohen and M. Harrigan, Atom. Data Nucl. Data Tables. 33 (1985) 255.
- [23] E. Caruso and A. Cesati, Phys. Rev. A15 (1977) 432.
- [24] S. Ouziane, thèse doctorat, USTHB Algerie, 2008.
- [25] D. Strivay, thèse doctorat, Université de Liège, 2002.

- [26] Z. Šmit and G. Lapicki, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 47 (2014) 055203.
- [27] O. Benka and A. Kropf, *At. Data and Nucl. Data Tab.* 22 (1978.) 220.
- [28] M.A. Reis and A.P. Jesus, *At. Data and Nucl. Data Tab.* 63 (1996) 1.
- [29] M.O. Krause, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 8 (1979) 307.
- [30] M. H. Chen, B. Crasemann and H. Mark, *Phys. Rev. A* 24 (1981) 177.
- [31] S. Puri, D. Mehta, B. Chand, N. Singh and P.N. Trehan, *X-Ray Spectrom.* 22 (1993) 358.
- [32] E. Öz, H. Erdogan and M. Ertugrul, *J. Radio. Nucl. Chem.* 242 (1999) 219.
- [33] E. Öz, N. Ekinici, Y. Ozdemir, M. Ertugrul, Y. Sahin and H. Erdogan, *J. Phys. B* 34 (2001) 631.
- [34] M. Ertugrul, *Z. Phys. D* 38 (1996) 91
- [35] J.H. Scofield, *Atom. Data Nucl. Data Tables* 14 (1974) 121
- [36] J.H. Scofield, *Phys. Rev. A* 10 (1974) 1507.
- [37] J.H. Scofield, Lawrence Livermore Laboratory Report, (1973) UCRL-51326.

## **Chapitre III**

**Calculs théoriques et semi-empiriques des sections efficaces d'ionisation et de production des rayons X des éléments atomiques  $18 \leq Z \leq 92$  par des protons**

**III.1. Introduction:**

L'étude de l'ionisation des couches atomiques internes et la production des rayons X par des particules chargées ont été intensivement étudiées durant les quatre dernières décennies, principalement en raison de développement de différents domaines pratiques par exemple, la physique atomique, chimie de surfaces, science médicale.

Durant la période 1966 à 2014 plusieurs tentatives ont été faites sous forme tabulaire pour mesurer et calculer les paramètres d'interaction des rayonnements ionisants avec la matière telque les rendements de fluorescence des couches atomiques internes ( K, L) pour les éléments du tableau periodique.

- i. Fink et al. [1] fait une compilation des donnés expérimentales éditées avant 1966 (environ 143 valeurs pour des éléments de numéros atomiques  $Z$  compris entre 6 et 93)
- ii. Bambynek et al. [2], table regroupant les données expérimentales des rendements de fluorescence de la couche K de l'aluminium à l'uranium ( $13 \leq Z \leq 92$ ) donc un total de 56 valeurs rassemblés de la littérature entre 1955 et 1972.
- iii. Rutledge et Watson [3] en 1973, et Gardner et Gray [4] en 1978 ont également construit une base des données des sections efficaces notamment pour les couches K.

Dés 1976 Hardt et Watson [5] ont édité pour la première fois une collection de sections efficaces expérimentales des couches L d'ionisation induite par les ions allant des protons jusqu'au Xe.

Leur tabulation a couvert toutes les données expérimentales disponibles jusqu'en 1975, comportant approximativement 650 valeurs ; ainsi vers les années soixante-dix, des autres compilations ont été éditées.

En 1982, une compilation des sections efficaces de production de rayons X par des protons et des particules  $\alpha$  pour les raies K et L, présenté par Heitz et al. [6]. Mais la première étude systématique complète des sections efficaces d'ionisation et de production de rayons X pour des protons fut celle éditée par Sokhi et Crumpton [7]. Leur étude a couvert

toutes les données publiées entre l'année 1975 et la fin de l'année 1982. Le nombre total de sections efficaces expérimentales rapportées dans leur tabulation était approximativement 3000. En 1989, Paul et al. [8] ont présenté une nouvelle tabulation de données expérimentales pour les sections efficaces de production des couches K disponibles avant 1988 pour des protons. Le même auteur [9] a présenté une autre tabulation de données expérimentales des sections efficaces de production des couches K pour des protons, des deutons, des ions  $^3\text{He}$  et des particules  $\alpha$ .

En 1994, Orlic et al. [10] ont repris toutes les sections efficaces expérimentales d'ionisation et de production de rayons X des couches L pour des protons durant la période 1983 à 1992. La compilation compte pas moins de 4879 valeurs de sections efficaces de production des raies X-L et plus de 1160 valeurs de sections efficaces d'ionisation des couches L.

Le but principal du travail présenté dans ce chapitre c'est de déduire des sections efficaces semi-empirique d'ionisation et de production totale des raies L basé sur des données expérimentales et sur des modèle théoriques à l'aide d'un programme numérique Fortran.

### **III.2. Base des données des sections efficaces d'ionisation des couches L:**

La base des données des valeurs expérimentales réalisé dans ce travail se fonde sur les données expérimentales des compilations de Miranda et Lapicki [11] (table regroupant les données reprises dans la littérature entre 1954 et 2012). Rajoutent autres valeurs qui sont extraites des courbes [12-14]. Nous avons donc à notre disposition une nouvelle base de données considérable couvert environ 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 ( $18 \leq Z \leq 92$ ) par des protons d'énergie de 0.02 à 10.0 MeV.

Nous avons présenté dans les tableaux ci-dessous, les valeurs expérimentales des sections efficaces totales d'ionisation et de production totale des couches L pour les éléments de numéros atomiques Z compris entre 18 et 92 et pour des protons d'énergie comprise entre 0.02

et 10.0 MeV par pas de 0.1 MeV. Où l'Or ( $_{79}\text{Au}$ ) paraît l'élément le plus intensivement étudié (445 valeurs expérimentales de production et 176 valeurs pour l'ionisation).

Nous présentons également les sections efficaces expérimentales d'ionisation et de production rejetée.

**Tableau III.1:** Nombre de données expérimentales des sections efficaces disponibles et rejetées d'ionisation  $N^I$  et  $N_R^I$  respectivement, des éléments avec  $18 \leq Z \leq 92$  par des protons d'énergie de 0.02 à 10.0 MeV.

Z	$N^I$	$N_R^I$	Z	$N^I$	$N_R^I$
Z=18, Ar	49	3	Z=58, Ce	4	0
Z=24, Cr	0	0	Z=59, Pr	7	0
Z=25, Mn	0	0	Z=60, Nd	17	0
Z=26, Fe	0	0	Z=61, Pm	0	0
Z=27, Co	0	0	Z=62, Sm	12	0
Z=28, Ni	0	0	Z=63, Eu	17	1
Z=29, Cu	0	0	Z=64, Gd	27	2
Z=30, Zn	0	0	Z=65, Tb	24	0
Z=31, Ga	0	0	Z=66, Dy	53	0
Z=32, Ge	0	0	Z=67, Ho	30	4
Z=33, As	0	0	Z=68, Er	13	0
Z=34, Se	0	0	Z=69, Tm	0	0
Z=35, Br	0	0	Z=70, Yb	29	1
Z=36, Kr	0	0	Z=71, Lu	15	0
Z=37, Rb	0	0	Z=72, Hf	15	0
Z=38, Sr	0	0	Z=73, Ta	37	17
Z=39, Y	4	2	Z=74, W	47	0
Z=40, Zr	30	22	Z=75, Re	0	0
Z=41, Nb	30	19	Z=76, Os	6	0
Z=42, Mo	0	0	Z=77, Ir	20	0
Z=43, Tc	0	0	Z=78, Pt	18	0
Z=44, Ru	0	0	Z=79, Au	176	32
Z=45, Rh	0	0	Z=80, Hg	15	0
Z=46, Pd	0	0	Z=81, Tl	0	0
Z=47, Ag	30	0	Z=82, Pb	59	1
Z=48, Cd	13	1	Z=83, Bi	58	19
Z=49, In	29	0	Z=84, Po	0	0
Z=50, Sn	35	2	Z=85, At	0	0
Z=51, Sb	16	0	Z=86, Rn	0	0
Z=52, Te	16	0	Z=87, Fr	0	0
Z=53, I	26	0	Z=88, Ra	0	0
Z=54, Xe	0	0	Z=89, Ac	0	0
Z=55, Cs	0	0	Z=90, Th	33	0
Z=56, Ba	0	0	Z=91, Pa	0	0
Z=57, La	0	0	Z=92, U	34	0

**Tableau III.1:** Nombre de données expérimentales des sections efficaces disponibles (rejetées) de production de rayons X,  $N^x$  (et  $N_R^x$ ), des éléments avec 18  $Z$  92 par des protons d'énergie de 0.02 à 10.0 MeV.

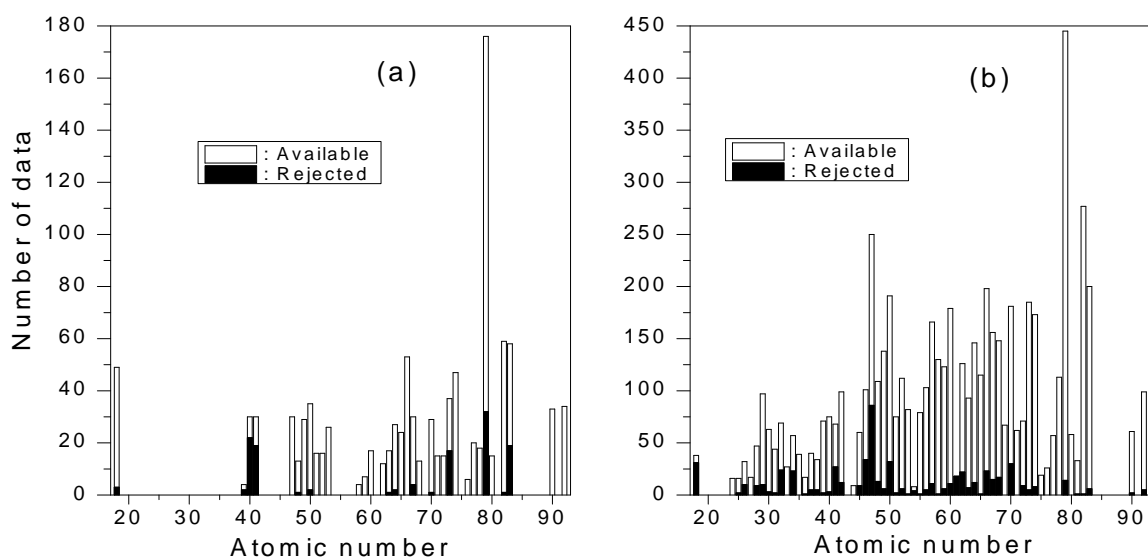
Z	$N^x$	$N_R^x$	Z	$N^x$	$N_R^x$
Z=18, Ar	38	31	Z=58, Ce	130	1
Z=24, Cr	16	0	Z=59, Pr	123	6
Z=25, Mn	16	2	Z=60, Nd	179	11
Z=26; Fe	32	10	Z=61, Pm	18	18
Z=27, Co	17	0	Z=62, Sm	126	22
Z=28, Ni	47	9	Z=63, Eu	93	7
Z=29, Cu	97	10	Z=64, Gd	146	12
Z=30, Zn	63	3	Z=65, Tb	115	1
Z=31, Ga	44	2	Z=66, Dy	198	23
Z=32, Ge	69	24	Z=67, Ho	156	15
Z=33, As	27	0	Z=68, Er	148	17
Z=34, Se	57	23	Z=69, Tm	67	0
Z=35, Br	39	0	Z=70, Yb	181	30
Z=36, Kr	17	1	Z=71, Lu	62	0
Z=37, Rb	40	5	Z=72, Hf	71	9
Z=38, Sr	34	5	Z=73, Ta	185	5
Z=39, Y	71	2	Z=74, W	173	8
Z=40, Zr	75	3	Z=75, Re	19	0
Z=41, Nb	68	27	Z=76, Os	26	0
Z=42, Mo	99	12	Z=77, Ir	57	0
Z=43, Tc	0	0	Z=78, Pt	113	0
Z=44, Ru	9	0	Z=79, Au	445	14
Z=45, Rh	60	9	Z=80, Hg	58	0
Z=46, Pd	101	34	Z=81, Tl	33	1
Z=47, Ag	250	86	Z=82, Pb	277	1
Z=48, Cd	109	13	Z=83, Bi	200	6
Z=49, In	138	6	Z=84, Po	0	0
Z=50, Sn	191	32	Z=85, At	0	0
Z=51, Sb	75	2	Z=86, Rn	0	0
Z=52, Te	112	6	Z=87, Fr	0	0
Z=53, I	82	1	Z=88, Ra	0	0
Z=54, Xe	8	4	Z=89, Ac	0	0
Z=55, Cs	79	1	Z=90, Th	61	2
Z=56, Ba	103	5	Z=91, Pa	0	0
Z=57, La	166	11	Z=92, U	99	5

La figure III.1 montre un histogramme de La distribution des données expérimentaux de production et d'ionisation de rayons X tabulé dans le tableau III.1 et le tableau III.2 pour les éléments de 18  $Z$  92 et les données rejetées correspondantes. D'après L'examen de la figure 1 on a tiré deux grandes remarques :

- a) Les données expérimentales de sections efficaces totales de production sont les plus dominantes (environ cinq fois plus grande que l'ionisation).
- b) La distribution des points expérimentaux de production et d'ionisation sont subdivisées en groupes d'éléments selon leurs numéros atomiques telque

Pour l'ionisation l'absence de valeurs expérimentales dans les régions  $24 \leq Z \leq 38$ ,  $42 \leq Z \leq 46$  et  $84 \leq Z \leq 89$ . Un nombre important de valeurs expérimentales est constaté dans la région  $58 \leq Z \leq 84$  avec un maximum de valeurs pour l'or (176 valeurs). Pour la section efficace de production les données sont également montre un maximum pour l'or (431 valeurs) et aussi la région  $84 \leq Z \leq 89$  ne contient aucune valeurs.

Nous avons adopté un critère de sélection des valeurs expérimentales pour assurer une certaine fiabilité à l'opération d'ajustement des valeurs expérimentales et en raison d'améliorer la qualité d'interpolation. Dans la présente étude, le critère de dispersion sur les données expérimentales est fixé dans l'intervalle [0.5-1.5] donc ce critère à rejeter toutes les valeurs expérimentales qui sont en-dehors de notre game d'énergie par conséquent nous avons éliminé environ 12.21% (08.50%) du nombre total des données expérimentales de la section efficace d'ionisation et de production, respectivement.



**Figure III.1:** Répartition des valeurs expérimentales de la section efficace d'ionisation disponible (a) et de et production de rayons X (b) en fonction du numéro atomique Z.

### III.3. Méthode et résultats:

#### III.3.1. Calcul théorique des sections efficaces d'ionisation et de production:

L'étude théorique sur l'excitation de la fluorescence X portant sur les modèles décrivant le phénomène d'ionisation a commencée par le modèle proposé par Merzbacher et Lewis en 1958 [15] qui est connu sous le nom de modèle PWBA et 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), ce modèle a été développé principalement par Basbas et al. [16]. Ces auteurs ont incorporé une série de modifications afin de corriger la théorie PWBA.

Ces effets sont inclus dans la section efficace du modèle PWBA [17-18] en le multipliant par le facteur Coulomb de déviation  $C_S$ , en changeant  $s$  à  $s_s$ , où  $s$  tient compte les changements dans l'énergie de liaison, en multipliant  $m$  par la fonction de correction relativiste  $m_S^R(s)$ , où  $s$  est la vitesse du projectile qui distingue les régimes de collisions lentes et rapides.

Comme indiqué par Šmit et Lapicki [19] qui ont proposé une autre formule par des nouvelles limites d'intégration  $Q_{\min}$  et  $Q_{\max}$  en remplaçant  $s$  dans l'équation II.52 par  $s^R$  donnée comme suite :

$$s^R = m_S^R s \quad (\text{III.1})$$

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 donné comme suit :

$$Q_{\min}^{\max} = \left( \frac{M}{m_S^R m} \right)^2 \int_{s^R}^{\infty} \left( \mp \sqrt{\frac{m_S^R m W}{s}} \right)^2 \quad (\text{III.2})$$

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) par l'inclut de la fonction  $f_s$  dans ce contexte Brandt et Lapicki [20] ont

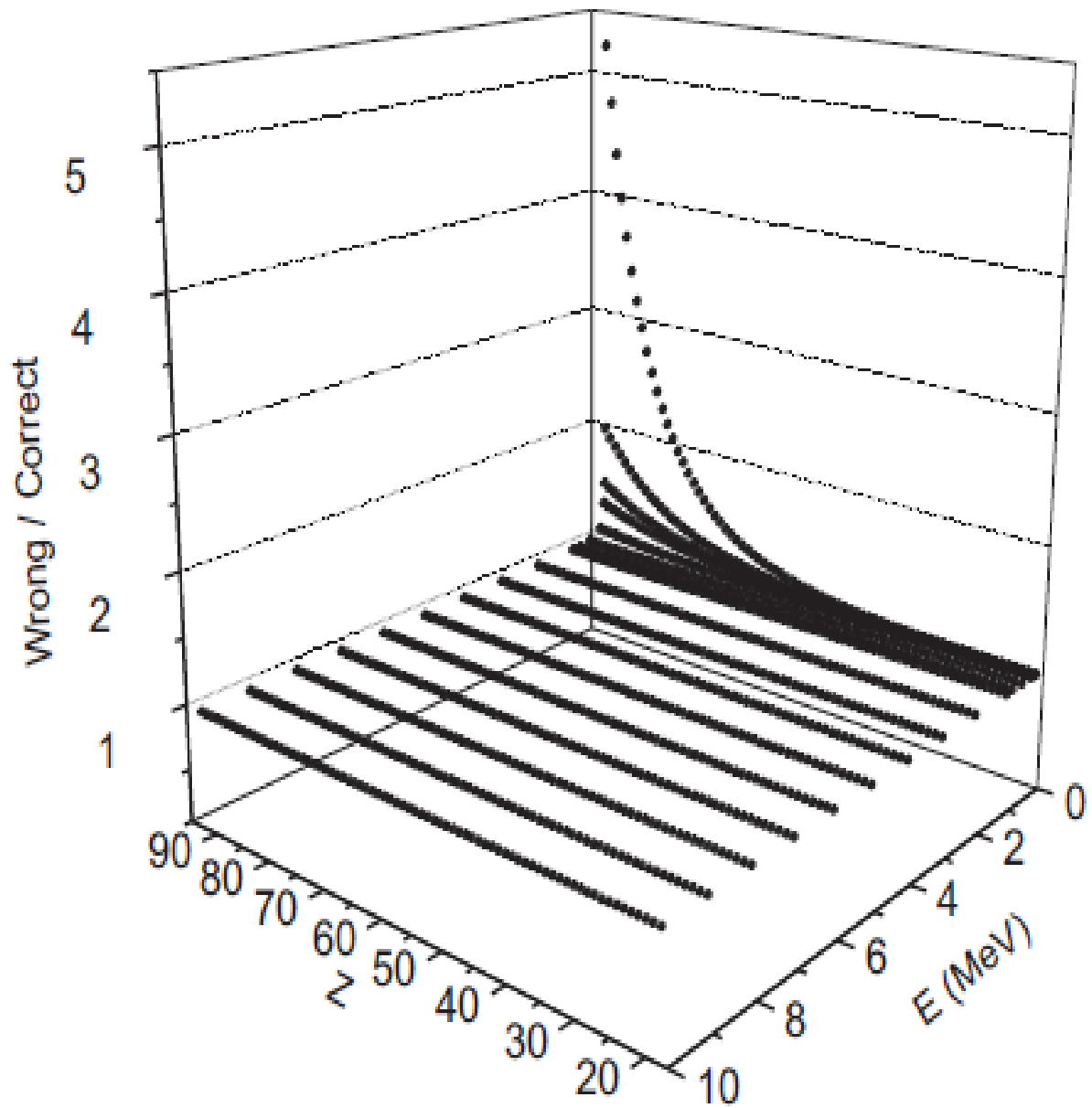
également calculée la section efficace par la théorie ECPSSR, ce dernier modèle peut être plus exacte par les bornes d'intégration correctes situées dans la relation (III-2) ce qui conduit au modèle ECSSR corrigé noté eCPSSR qui est utilisé par des auteurs comme Šmit et Lapicki [19] pour le calcul des sections efficaces d'ionisation et de production théorique.

Dans ce travail nous avons également calculé les sections efficaces totales d'ionisation et de production pour les éléments  $18 \leq Z \leq 92$  de l'énergie de proton comprise entre 0.02 et 10.0 MeV par le modèle théorique ECPSSR et d'autre fois par le modèle ECPSSR corrigé (eCPSSR). Pour calculer les sections efficaces d'ionisation et de production on a utilisé un programme numérique basé sur la théorie ECPSSR et eCPSSR (qui a été développé par notre groupe de recherche) en utilisant la méthode de Gauss-Legendre. Les résultats de calcul sont montrés dans le tableau qui suit :

Pour visualiser la déviation entre les résultats obtenus nous avons tracé le rapport entre la section efficace basé sur l'ancien modèle et celle corrigé pour tous les éléments disponibles et pour des protons d'énergie comprise entre 0.02 et 10.0 MeV en fonction de l'énergie  $E$  et le numéro atomique  $Z$  comme il est montré dans la figure 2. Il apparaît clairement que les résultats calculés à partir du modèle ECPSSR avec des limites d'intégration exactes et incorrectes sont très proches les uns des autres pour les éléments légers et moyens sur la gamme de l'énergie du proton alors (jusqu'à un facteur de 5 pour  ${}_{92}\text{U}$  à proton d'énergie de 0.03 MeV).

**Tableau III.3:** Les sections efficaces totales calculé par le modèle théorique ECPSSR (Wrong) et celles calculé par le modèle corrigés eCPSSR (Correct) pour quelques éléments sélectionnés ou l'énergie de proton compris entre 0.03 et 10.0.

E (MeV)	<sup>18</sup> Ar		<sup>28</sup> Ni		<sup>38</sup> Sr		<sup>48</sup> Cd	
	Wrong	Correct	Wrong	Correct	Wrong	Correct	Wrong	Correct
0.03	5.484E+04	5.484E+04	5.033E+01	5.027E+01	2.697E-02	2.670E-02	1.482E-06	1.418E-06
0.05	2.284E+05	2.284E+05	5.998E+02	5.996E+02	2.451E+00	2.441E+00	5.448E-03	5.345E-03
0.07	4.933E+05	4.932E+05	2.055E+03	2.055E+03	1.826E+01	1.822E+01	1.465E-01	1.449E-01
0.09	8.042E+05	8.042E+05	4.503E+03	4.502E+03	6.035E+01	6.027E+01	9.224E-01	9.161E-01
0.20	2.296E+06	2.296E+06	3.345E+04	3.345E+04	9.677E+02	9.674E+02	4.601E+01	4.594E+01
0.50	3.310E+06	3.310E+06	1.505E+05	1.505E+05	8.702E+03	8.701E+03	7.101E+02	7.099E+02
0.80	2.995E+06	2.995E+06	2.279E+05	2.279E+05	1.975E+04	1.975E+04	2.080E+03	2.080E+03
1.00	2.690E+06	2.690E+06	2.563E+05	2.563E+05	2.680E+04	2.680E+04	3.242E+03	3.241E+03
2.00	1.543E+06	1.543E+06	2.744E+05	2.744E+05	4.887E+04	4.887E+04	9.252E+03	9.252E+03
3.00	9.690E+05	9.690E+05	2.360E+05	2.360E+05	5.518E+04	5.518E+04	1.335E+04	1.335E+04
4.00	6.549E+05	6.549E+05	1.966E+05	1.966E+05	5.470E+04	5.470E+04	1.554E+04	1.554E+04
5.00	4.642E+05	4.642E+05	1.640E+05	1.640E+05	5.164E+04	5.164E+04	1.649E+04	1.649E+04
6.00	3.391E+05	3.391E+05	1.382E+05	1.382E+05	4.775E+04	4.775E+04	1.668E+04	1.668E+04
7.00	2.524E+05	2.524E+05	1.177E+05	1.177E+05	4.377E+04	4.377E+04	1.643E+04	1.643E+04
8.00	1.897E+05	1.897E+05	1.014E+05	1.014E+05	4.002E+04	4.002E+04	1.593E+04	1.593E+04
9.00	1.429E+05	1.429E+05	8.816E+04	8.816E+04	3.658E+04	3.658E+04	1.529E+04	1.529E+04
10.0	1.070E+05	1.070E+05	7.731E+04	7.731E+04	3.349E+04	3.349E+04	1.460E+04	1.460E+04
	<sup>58</sup> Ce		<sup>68</sup> Er		<sup>78</sup> Pt		<sup>88</sup> Ra	
0.03	1.050E-12	9.215E-13	2.688E-21	1.974E-21	1.078E-34	5.532E-35	6.398E-58	1.744E-58
0.05	2.491E-06	2.342E-06	1.697E-10	1.473E-10	6.009E-16	4.526E-16	1.328E-23	7.733E-24
0.07	5.569E-04	5.372E-04	8.704E-07	7.972E-07	2.910E-10	2.450E-10	1.145E-14	8.348E-15
0.09	9.587E-03	9.362E-03	6.463E-05	6.087E-05	1.659E-07	1.468E-07	1.196E-10	9.631E-11
0.20	2.455E+00	2.441E+00	1.524E-01	1.500E-01	8.372E-03	8.073E-03	3.504E-04	3.264E-04
0.50	7.661E+01	7.652E+01	1.122E+01	1.118E+01	1.800E+00	1.787E+00	2.927E-01	2.881E-01
0.80	2.689E+02	2.688E+02	4.787E+01	4.780E+01	9.811E+00	9.780E+00	2.130E+00	2.115E+00
1.00	4.567E+02	4.565E+02	8.661E+01	8.652E+01	1.918E+01	1.914E+01	4.584E+00	4.562E+00
2.00	1.820E+03	1.820E+03	4.214E+02	4.212E+02	1.093E+02	1.092E+02	3.127E+01	3.122E+01
3.00	3.265E+03	3.265E+03	8.843E+02	8.842E+02	2.543E+02	2.542E+02	7.798E+01	7.792E+01
4.00	4.415E+03	4.415E+03	1.351E+03	1.351E+03	4.263E+02	4.261E+02	1.390E+02	1.389E+02
5.00	5.230E+03	5.230E+03	1.760E+03	1.760E+03	6.014E+02	6.013E+02	2.081E+02	2.080E+02
6.00	5.765E+03	5.765E+03	2.094E+03	2.094E+03	7.653E+02	7.652E+02	2.796E+02	2.796E+02
7.00	6.088E+03	6.087E+03	2.355E+03	2.355E+03	9.111E+02	9.110E+02	3.497E+02	3.496E+02
8.00	6.253E+03	6.253E+03	2.551E+03	2.551E+03	1.037E+03	1.036E+03	4.156E+02	4.156E+02
9.00	6.307E+03	6.307E+03	2.693E+03	2.693E+03	1.142E+03	1.142E+03	4.761E+02	4.760E+02
10.0	6.280E+03	6.280E+03	2.790E+03	2.790E+03	1.228E+03	1.228E+03	5.304E+02	5.303E+02



**Figure III.1:** Rapport de la section efficace théorique basée sur le modèle ECPSSR et le modèle corrigés en fonction de l'énergie de proton et pour tous les éléments avec les numéros atomiques  $18 \leq Z \leq 92$ .

### III.3.2. Calcul semi-empirique:

En général, comme nous avons pu le constater (voir chapitre II), il y a un écart importants entre les sections efficaces théoriques et les sections efficaces expérimentales. D'où la nécessité de rechercher des compromis entre les deux séries de valeurs en recourant à des expressions semi-empiriques (référence) et empiriques.

En effet plusieurs auteurs ont fondé l'objet d'établir une formule analytique reproduisant les données expérimentales. Les plus importantes sont celles de Reis et al. [18] qui ont suivi le même procédé utilisé par Paul et al. [21] pour normaliser les données expérimentales via les résultats de la théorie ECPSSR.

Dans ce travail nous calculons la section efficace normalisée de production ; on définit la section efficace normalisée de production donné par la formule :

$$S = \sigma_{\text{exp}} / \sigma_{\text{ECPSSR}} \quad (\text{III.3})$$

avec :  $\sigma_{\text{ECPSSR}}$  est la section efficace théorique de production calculée en utilisant les formules de Brandt et Lapicki [20] ainsi les bornes exactes d'intégration de Šmit et Lapicki [19]. Une contribution pour calculer la section efficace semi-empirique d'ionisation et de production totales des orbites L à été faite dans ce travail, basée sur une normalisation des données expérimentales via les résultats de la théorie eCPSSR, en adoptant un programme numérique, développé par notre groupe de recherche, basé sur le modèle ECPSSR de Brandt et Lapicki [20] ainsi les bornes exactes d'intégration de Šmit et Lapicki [19].

La section efficace totale normalisée  $S$  sera tracé en fonction du paramètre  $x$  pour les raies L pour tous les éléments disponibles dans notre base des données.

On définit le paramètre  $x$  comme suit :

$$x = \log_{10}(\xi_L^R) \quad (\text{III.4})$$

Où :  $\xi_L^R$  est la vitesse relativiste réduite de la couche L définie par Rodriguez-Fernandez [22] comme :

$$\xi_L^R = \left[ m_L^R (v_L / c) \right]^{-1} \quad (\text{III.5})$$

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

Ce procédé a été adopté en raison du manque des données expérimentales pour quelques éléments. Nous avons adopté un critère de sélection des valeurs expérimentales. Ce critère consiste à rejeter toutes les valeurs expérimentales qui donneraient un rapport S en-dehors de la fourchette 0.5-1.5. Les valeurs du paramètre S (la section efficace normalisée de production) sont alors ajustées pour chaque sous-couche.

Le rapport  $\bar{S}_C$  sera ajusté par un polynôme d'ordre trois :

$$\bar{S}_C = \sum_{i=0}^3 a_i \log_{10} \left( \frac{R}{L} \right)^i \quad (III.6)$$

Les sections efficaces semi-empiriques de production de rayons X et d'ionisation est alors déduite comme étant le produit de la section efficace calculée dans le cadre du modèle *ECPSSR* corrigé et du paramètre  $\bar{S}_C$

$$s\text{-emp} = e_{\text{CPSSR}} \bar{S}_C \quad (III.7)$$

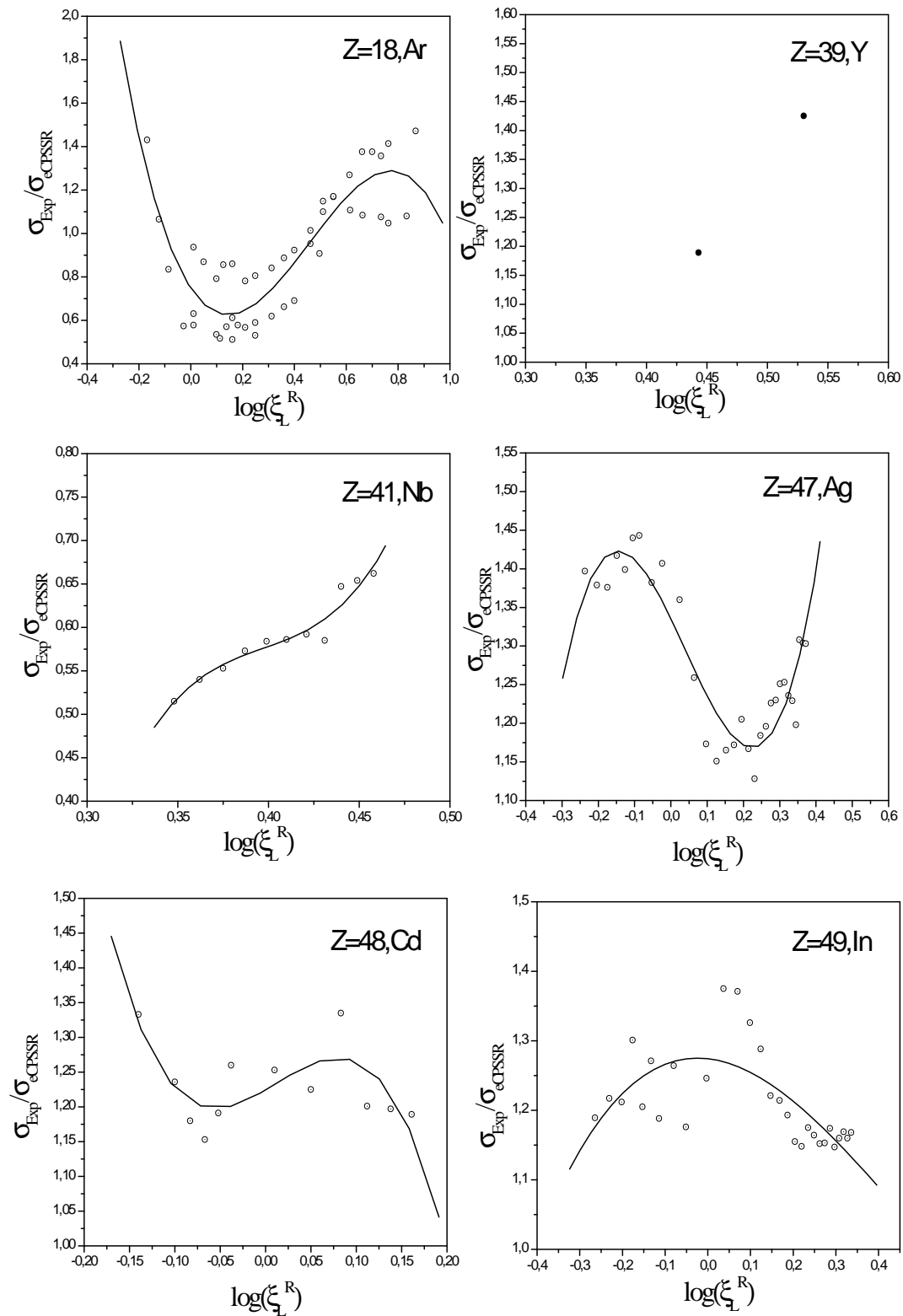
Nous montrons sur les figures qui suivent (Figure III.3-III.19) l'évolution des sections efficaces d'ionisation et de production totale  $L_i$  et  $L_x$  respectivement normalisées  $\frac{\text{exp}}{e_{\text{CPSSR}}}$  en fonction de la vitesse réduite  $\log_{10} \left( \frac{\xi^R}{\xi_L} \right)$  pour les éléments de numéros atomiques Z compris entre 18 et 92 et pour des protons d'énergie comprise entre 0.02 et 10.0 MeV par différents ajustements  $\bar{S}_i$  sont représentés en trait complète.

Pour calculer l'erreur entre les sections efficaces calculées et les sections efficaces expérimentales, nous avons calculés les écarts quadratiques moyens ( $\varepsilon_{\text{rms}}$ ) suivant l'expression :

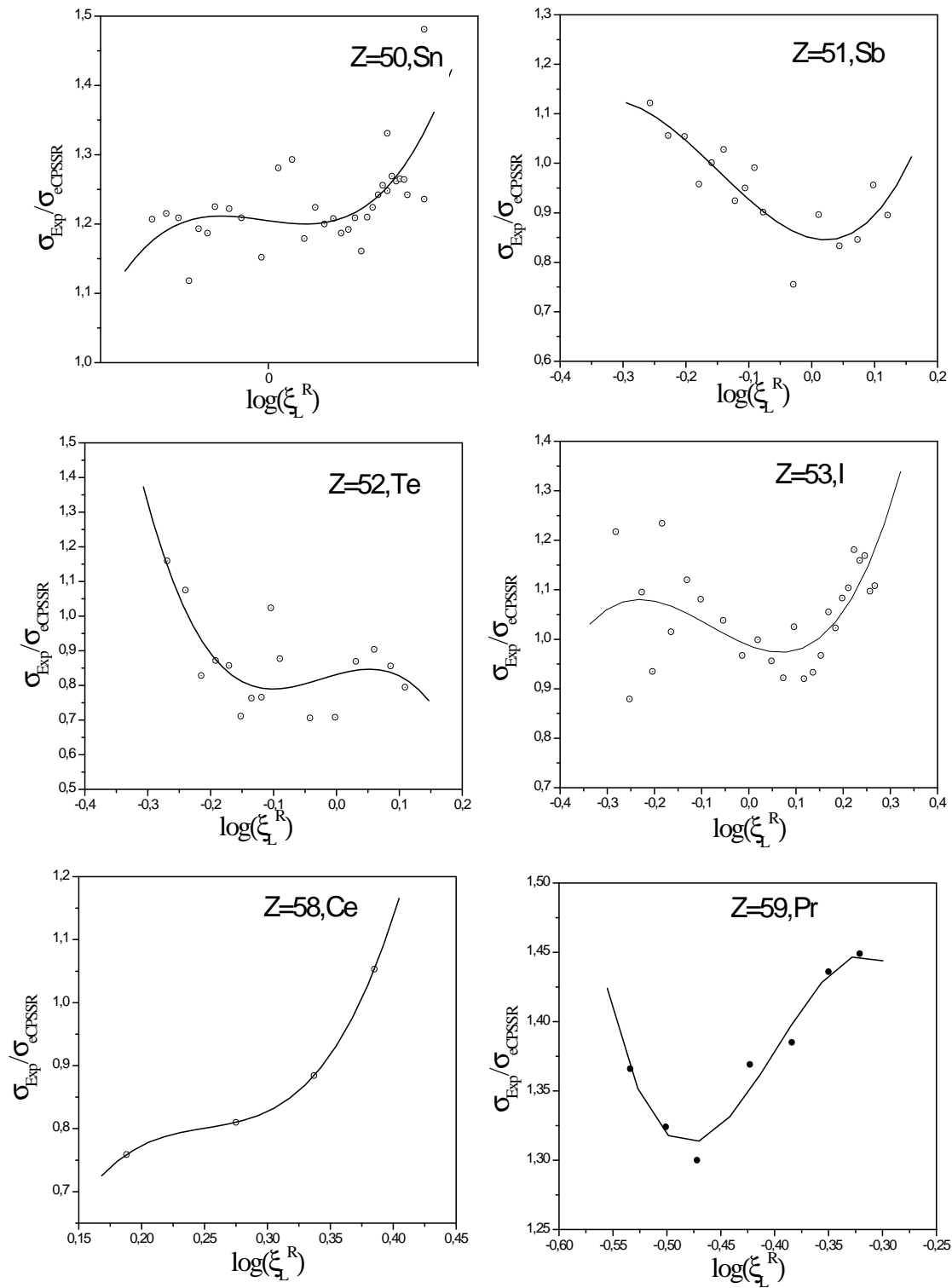
$$\varepsilon_{\text{rms}} = \left[ \sum \frac{1}{N} \left( \frac{\text{exp} - s\text{-emp}}{s\text{-emp}} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (III.8)$$

où N est le nombre de données expérimentales.

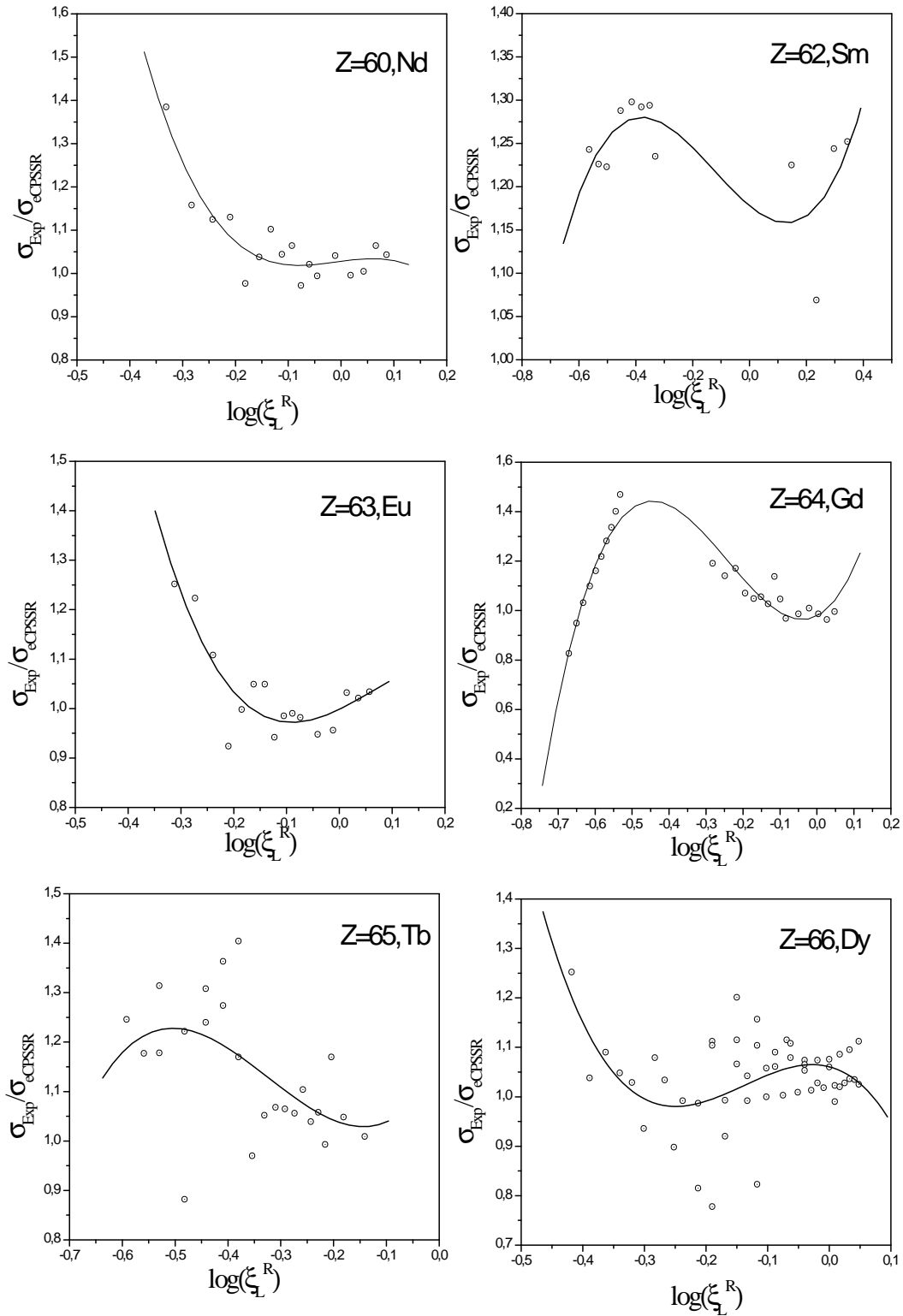
Les valeurs de  $\varepsilon_{\text{rms}}$  des sections efficaces semi-empiriques totale déduites et les coefficients de fit ( $a_i, i = 0,3$ ) sont résumés dans le tableau III.4 pour un groupe d'élément avec des numéros atomiques  $18 \leq Z \leq 65$  qui comporte le plus grand nombre des données expérimentales.



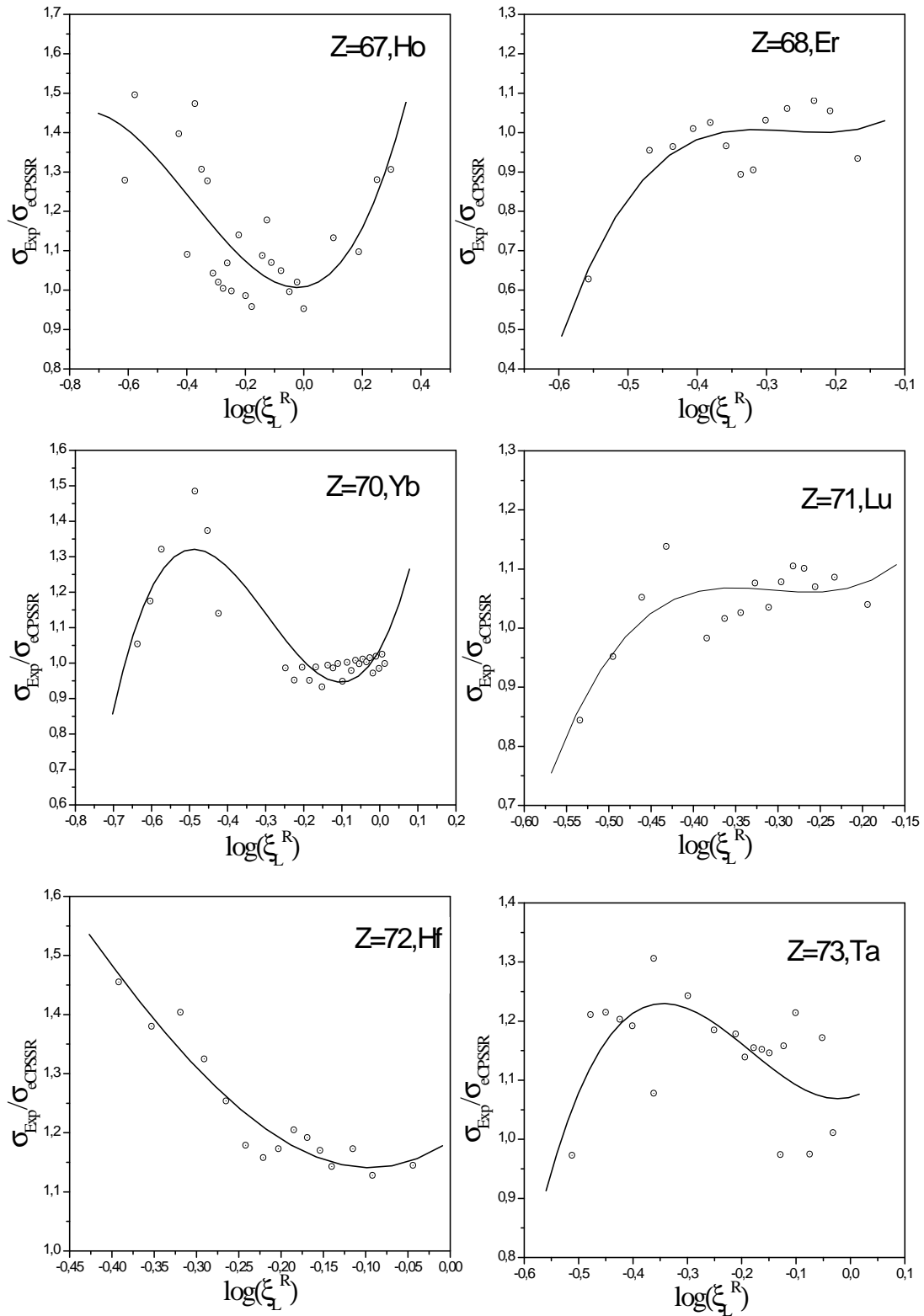
**Figure III.2:** Rapport des sections efficace totale d'ionisation expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{18}Ar$ ,  $_{39}Y$ ,  $_{41}Nb$ ,  $_{47}Ag$ ,  $_{48}Cd$ ,  $_{49}In$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \begin{matrix} R \\ L \end{matrix} \right)$



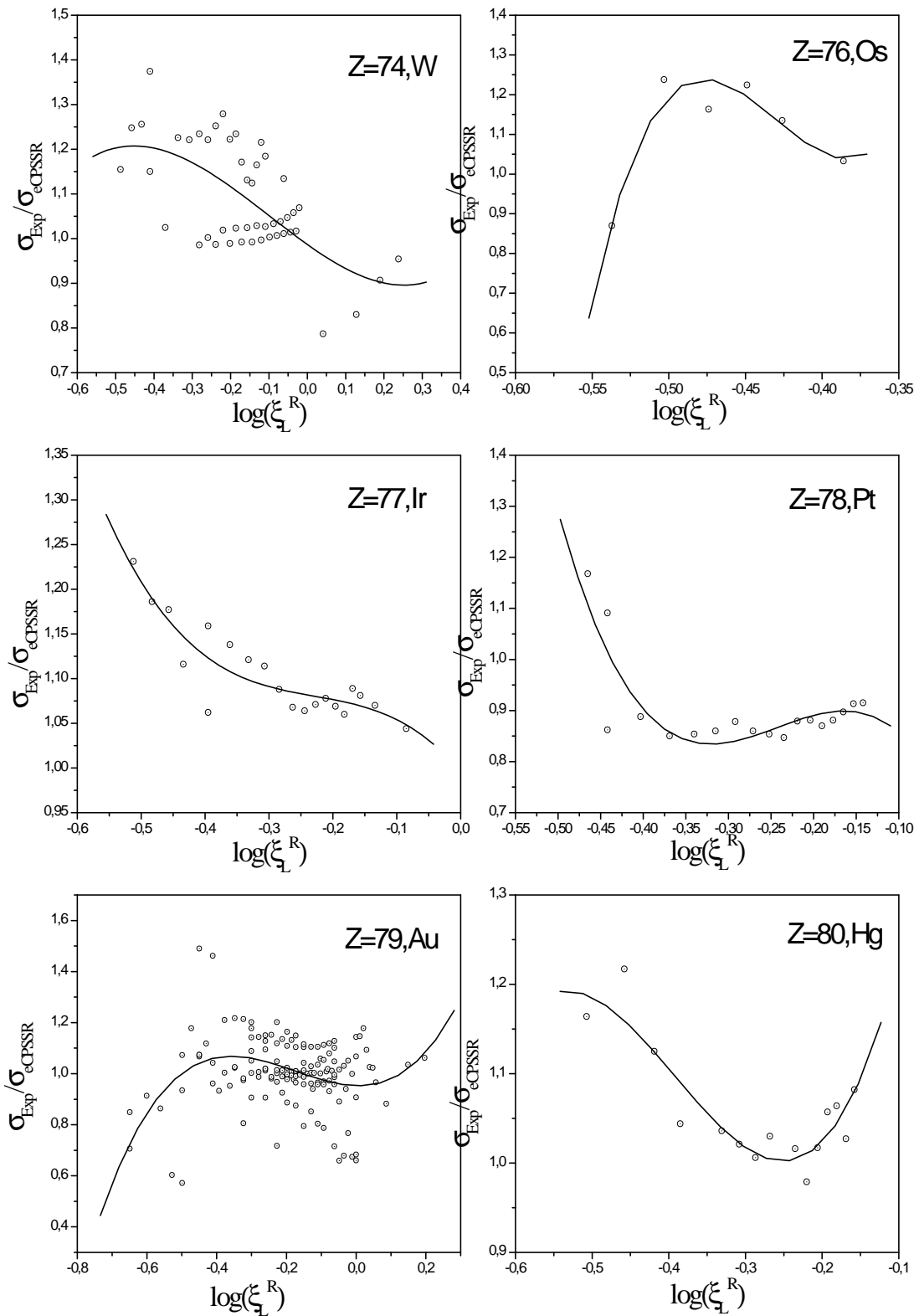
**Figure III.3:** Rapport des sections efficace totale d'ionisation expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{50}Sn$ ,  $_{51}Sb$ ,  $_{52}Te$ ,  $_{53}I$ ,  $_{58}Ce$ ,  $_{59}Pr$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \xi_L^R \right)$



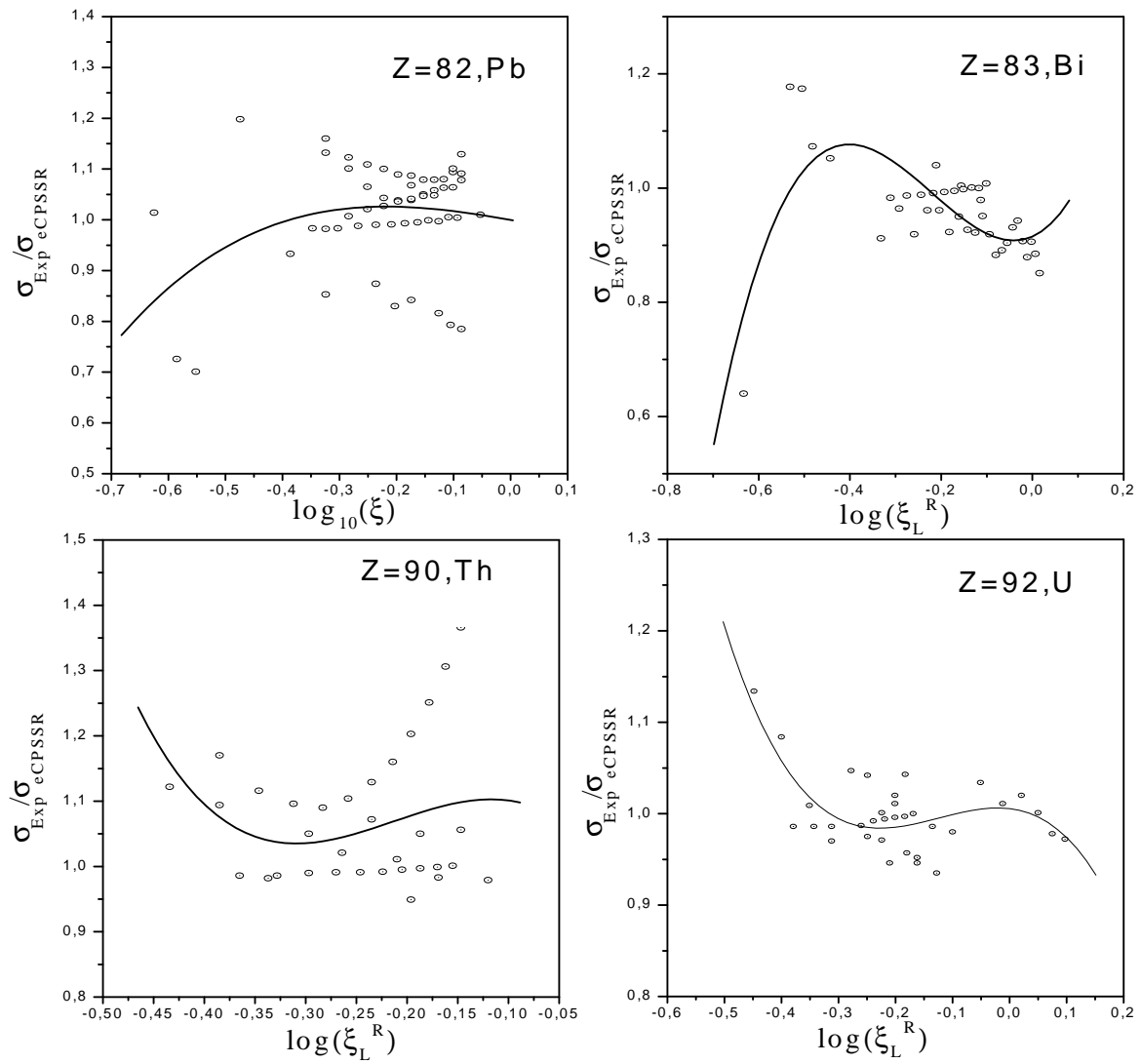
**Figure III.4:** Rapport des sections efficace totale d'ionisation expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{60}\text{Nd}$ ,  $_{62}\text{Sm}$ ,  $_{63}\text{Eu}$ ,  $_{64}\text{Gd}$ ,  $_{65}\text{Tb}$ ,  $_{66}\text{Dy}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$



**Figure III.5:** Rapport des sections efficace totale d'ionisation expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{67}\text{Ho}$ ,  $_{68}\text{Er}$ ,  $_{70}\text{Yb}$ ,  $_{71}\text{Lu}$ ,  $_{72}\text{Hf}$ ,  $_{73}\text{Ta}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$

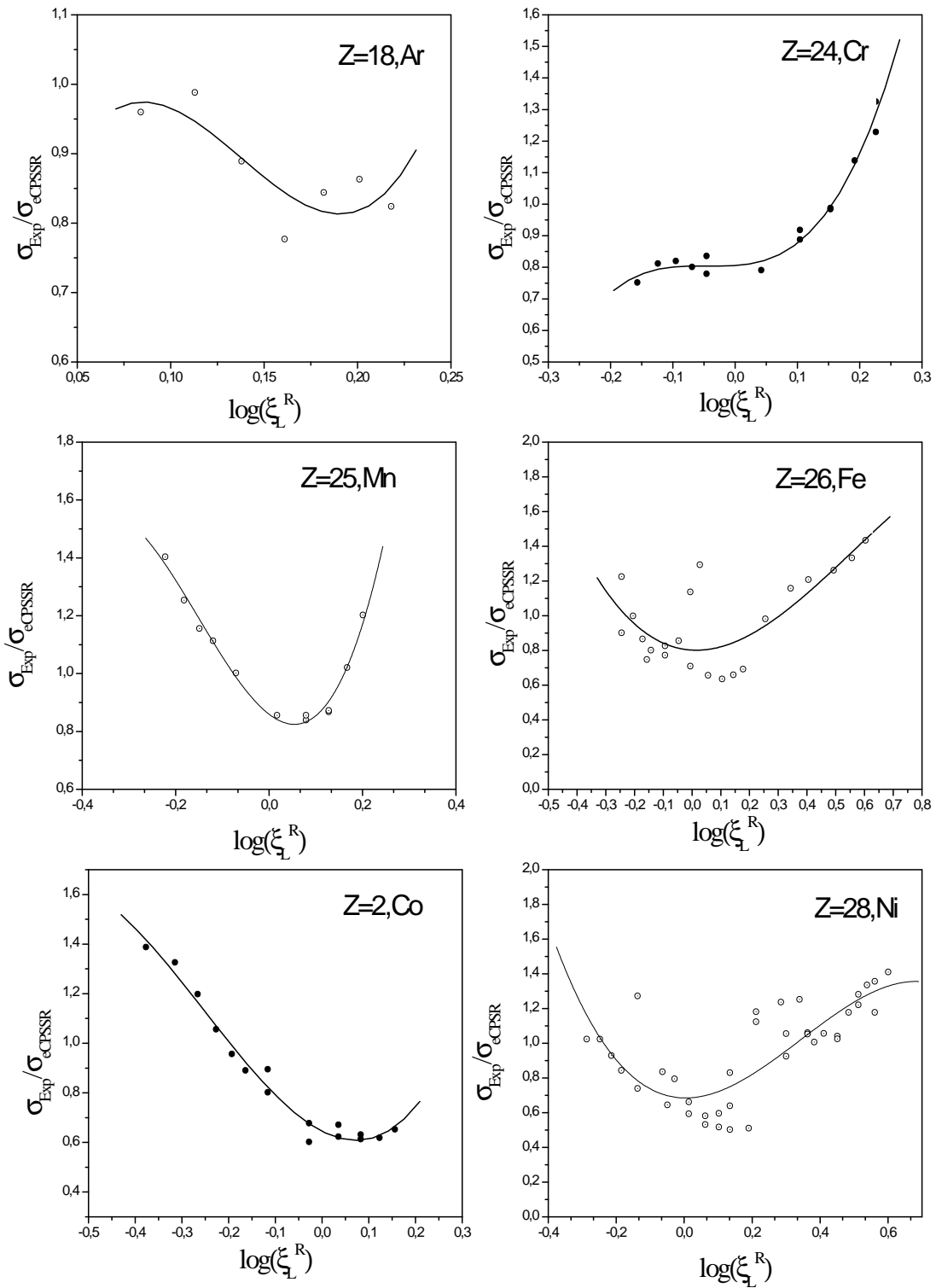


**Figure III.6:** Rapport des sections efficace totale d'ionisation expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{74}\text{W}$ ,  $_{76}\text{Os}$ ,  $_{77}\text{Ir}$ ,  $_{78}\text{Pt}$ ,  $_{79}\text{Au}$ ,  $_{80}\text{Hg}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10}\left(\xi_L^R\right)$

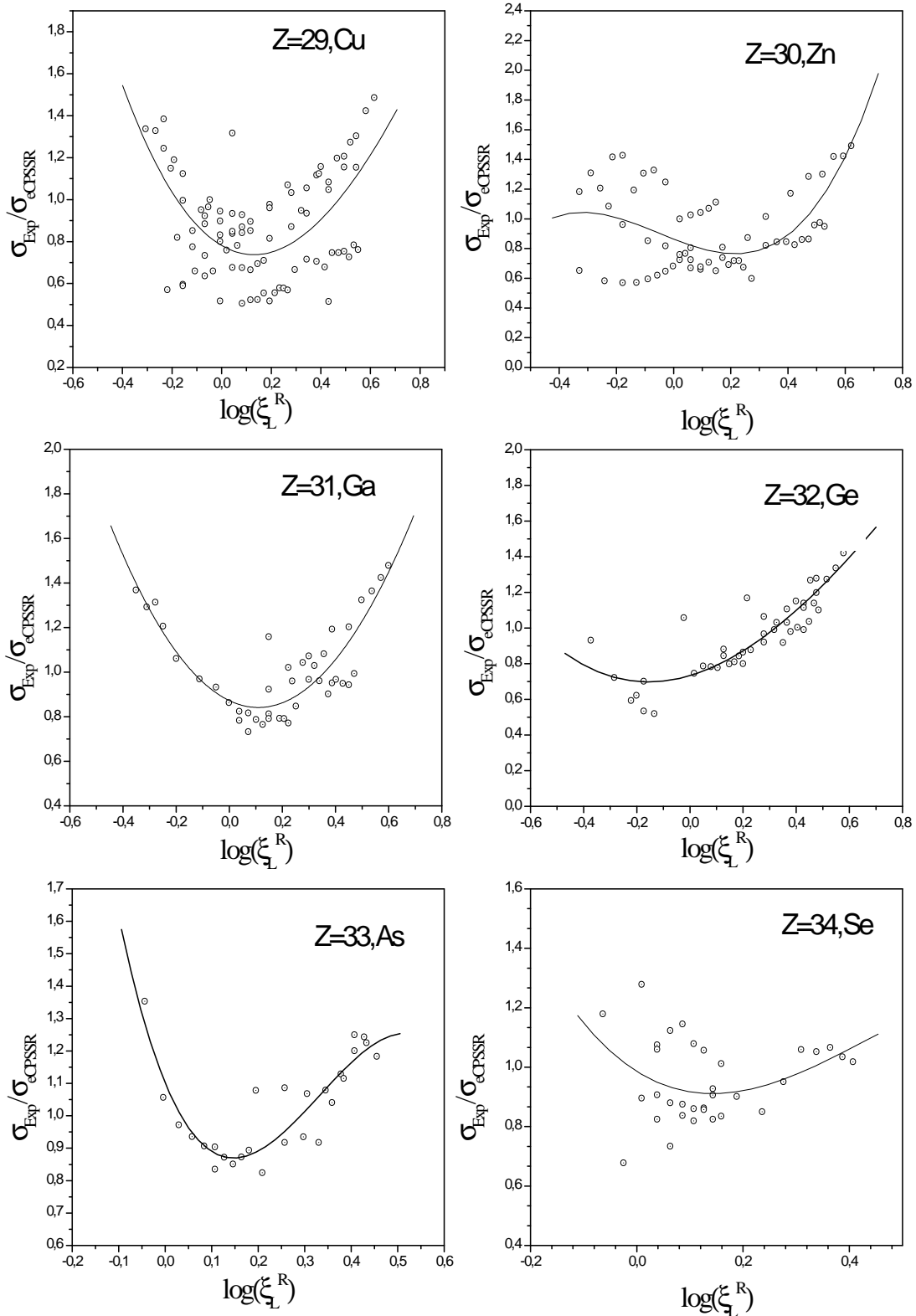


**Figure III.7 :** Rapport des sections efficace totale d'ionisation expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{82}\text{Pb}$ ,  $_{83}\text{Bi}$ ,  $_{90}\text{Th}$ ,  $_{92}\text{U}$  en fonction de la vitesse

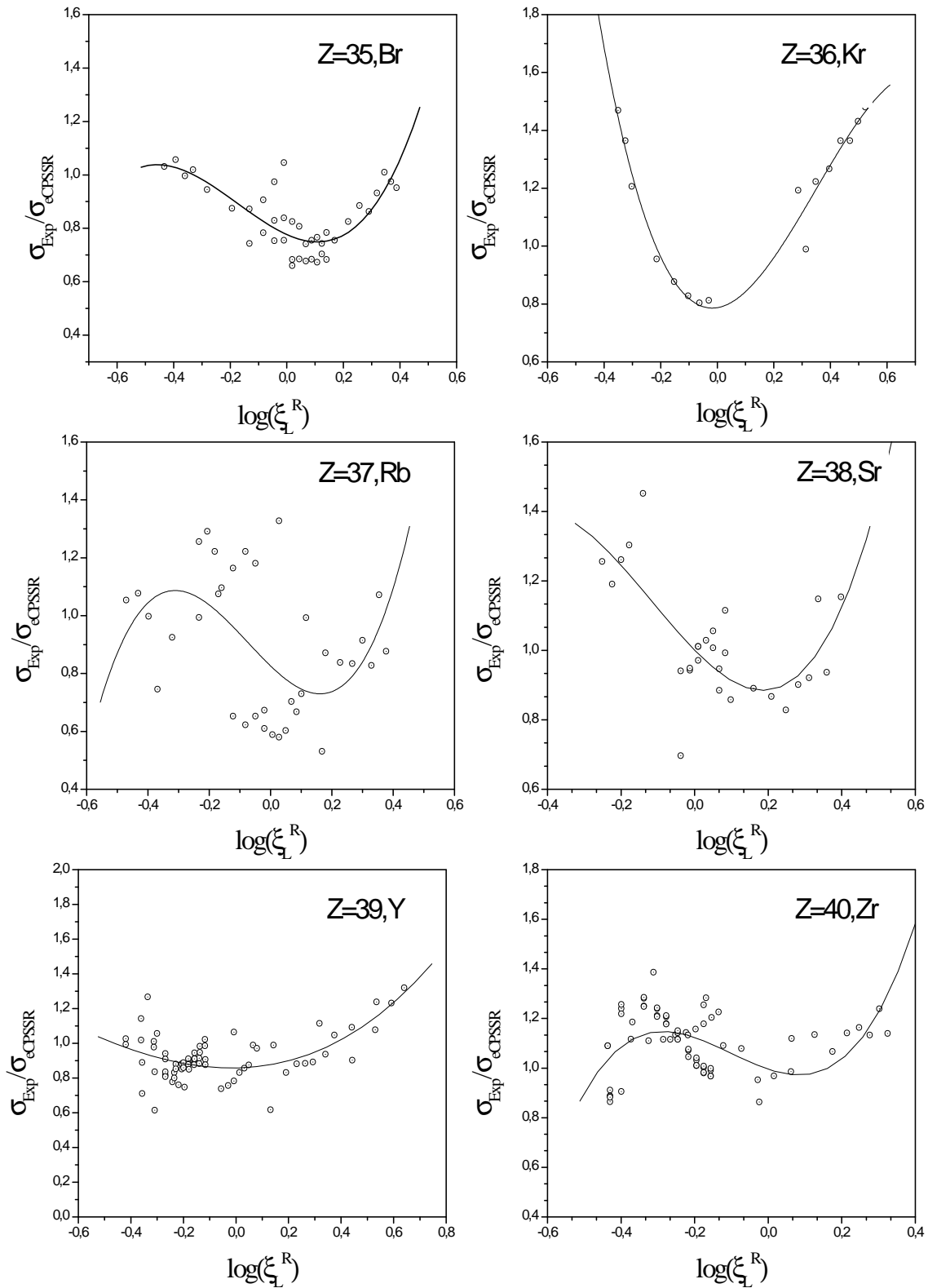
réduite  $\text{Log}_{10} \left( \begin{matrix} R \\ L \end{matrix} \right)$



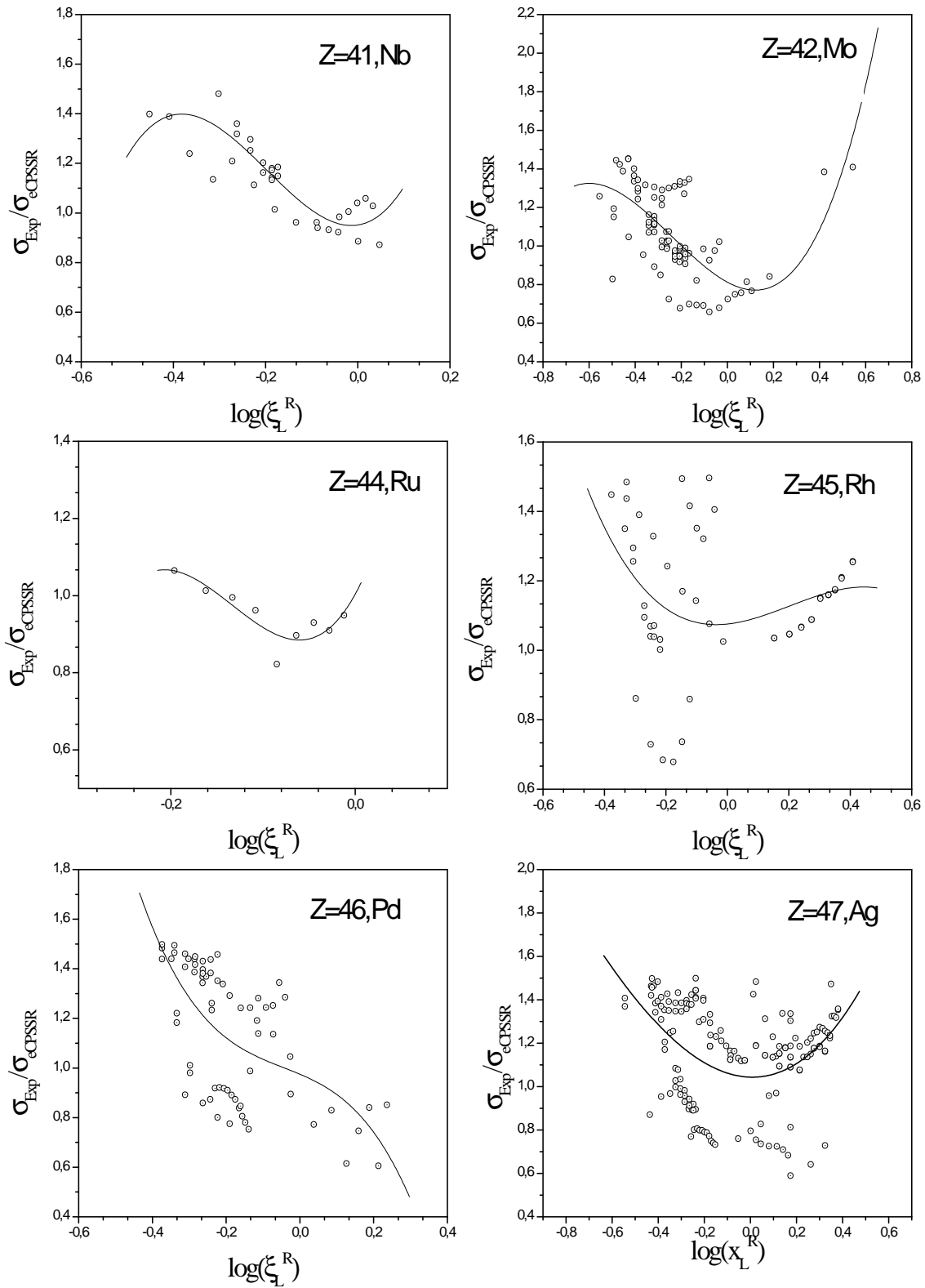
**Figure III.8:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{18}Ar$ ,  $_{24}Cr$ ,  $_{25}Mn$ ,  $_{26}Fe$ ,  $_{27}Co$ ,  $_{28}Ni$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10}\left(\xi_L^R\right)$



**Figure III.9:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{29}\text{Cu}$ ,  $_{30}\text{Zn}$ ,  $_{31}\text{Ga}$ ,  $_{32}\text{Ge}$ ,  $_{33}\text{As}$ ,  $_{34}\text{Se}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10}\left(\xi_L^R\right)$

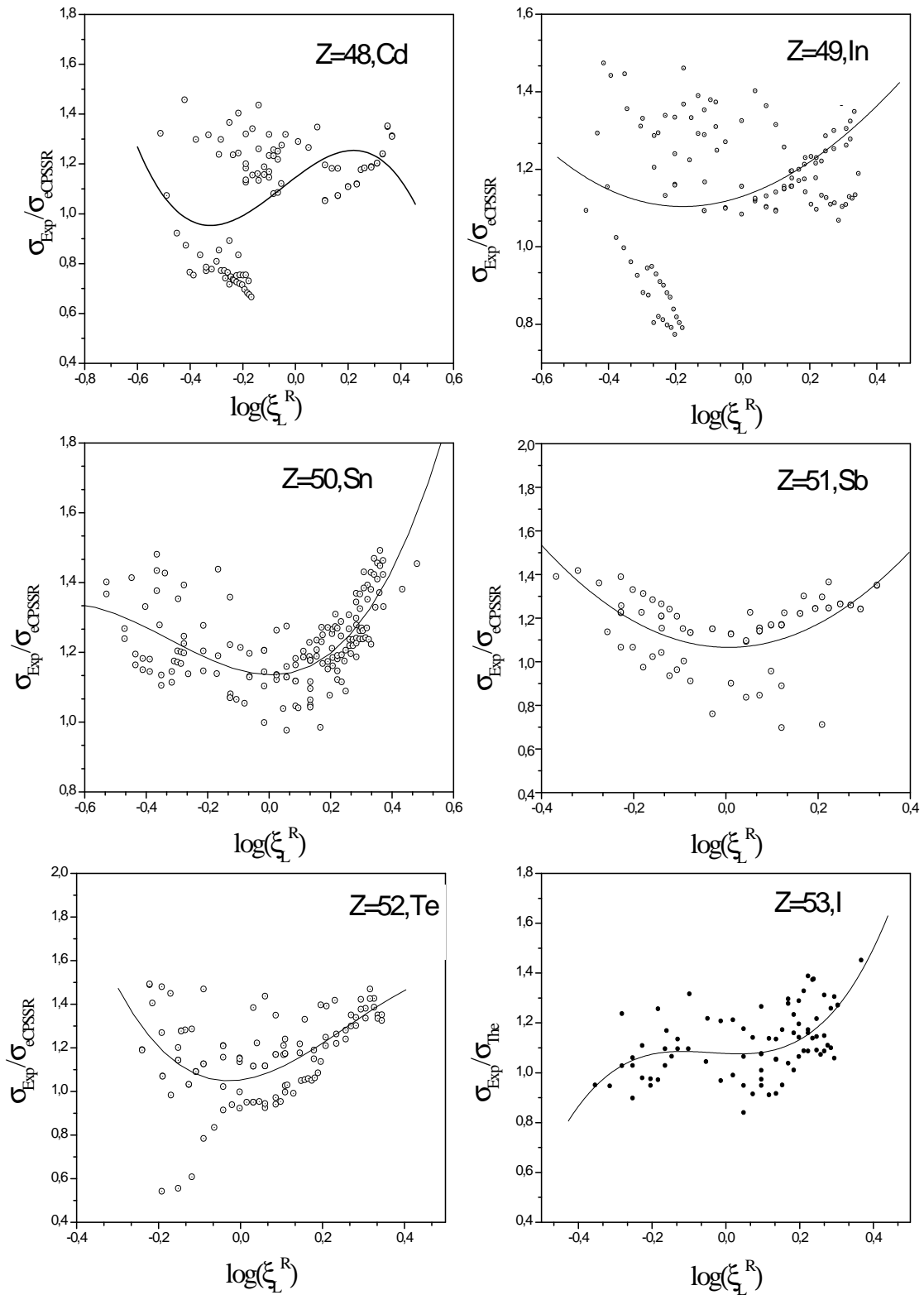


**Figure III.10:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{35}Br$ ,  $_{36}Kr$ ,  $_{37}Rb$ ,  $_{38}Sr$ ,  $_{39}Y$ ,  $_{40}Zr$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \begin{matrix} R \\ L \end{matrix} \right)$

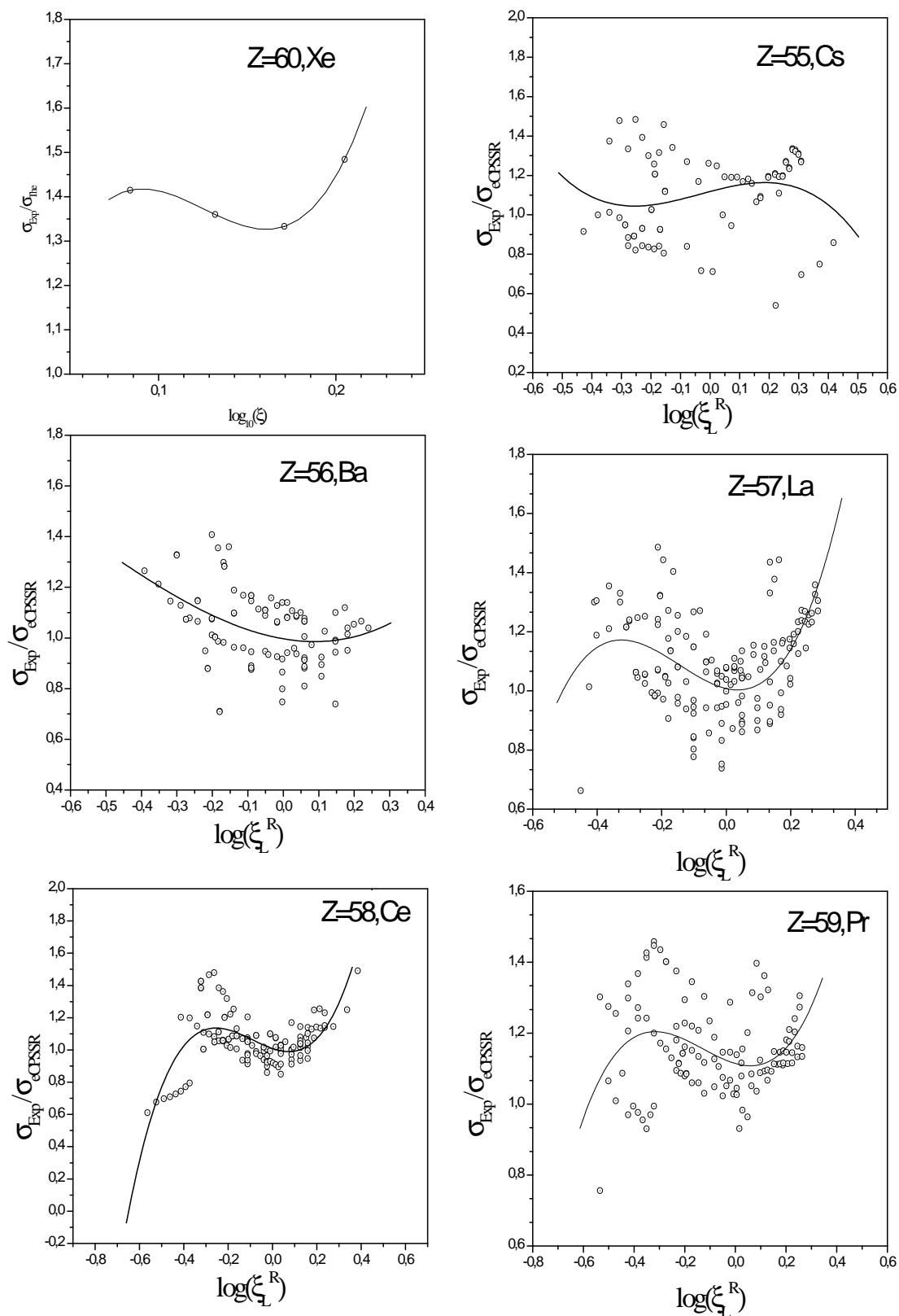


**Figure III.11 :** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{41}Nb,_{42}Mo,_{44}Ru,_{45}Rh,_{46}Pd,_{47}Ag$  en fonction de la

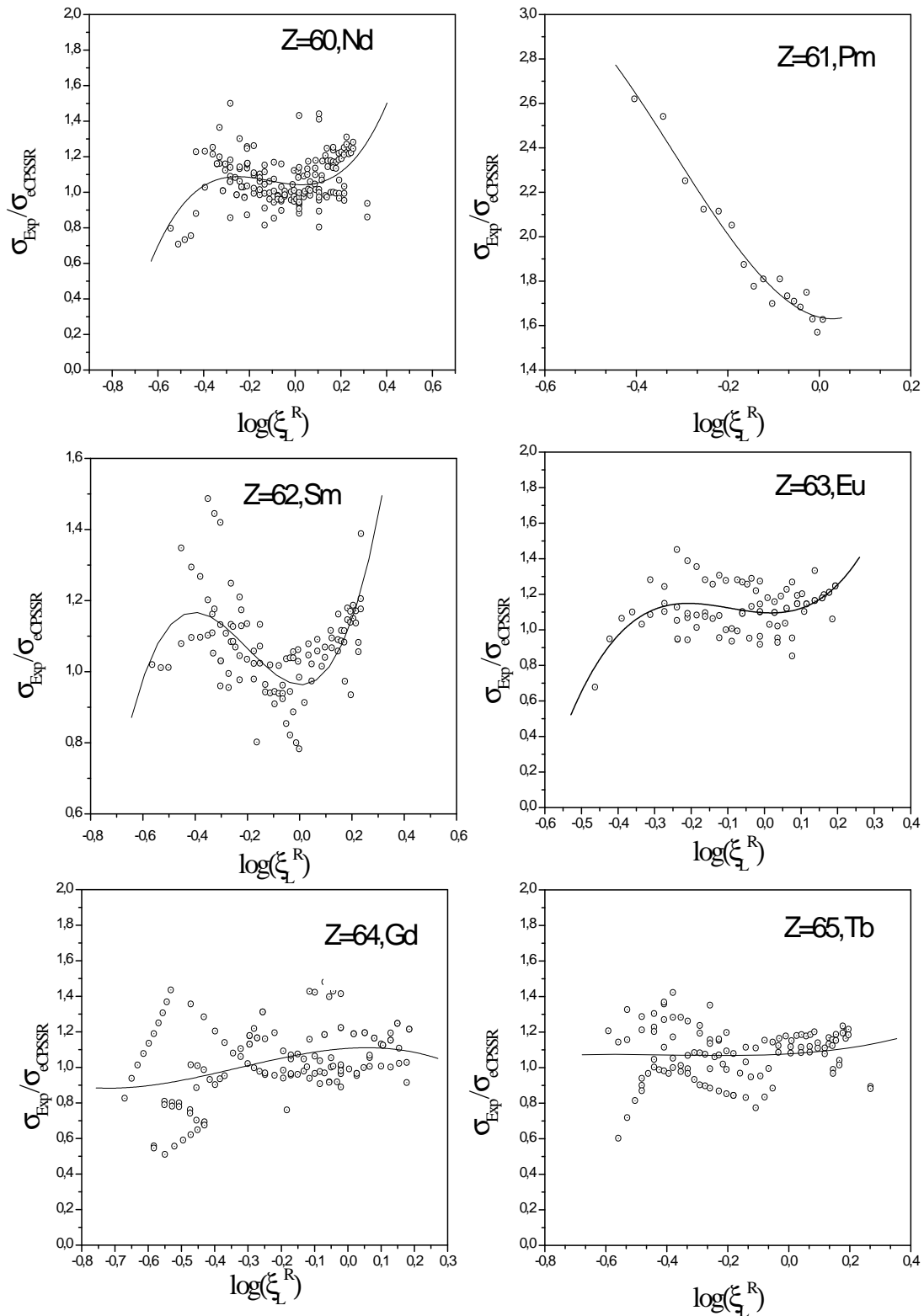
vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \begin{matrix} R \\ L \end{matrix} \right)$



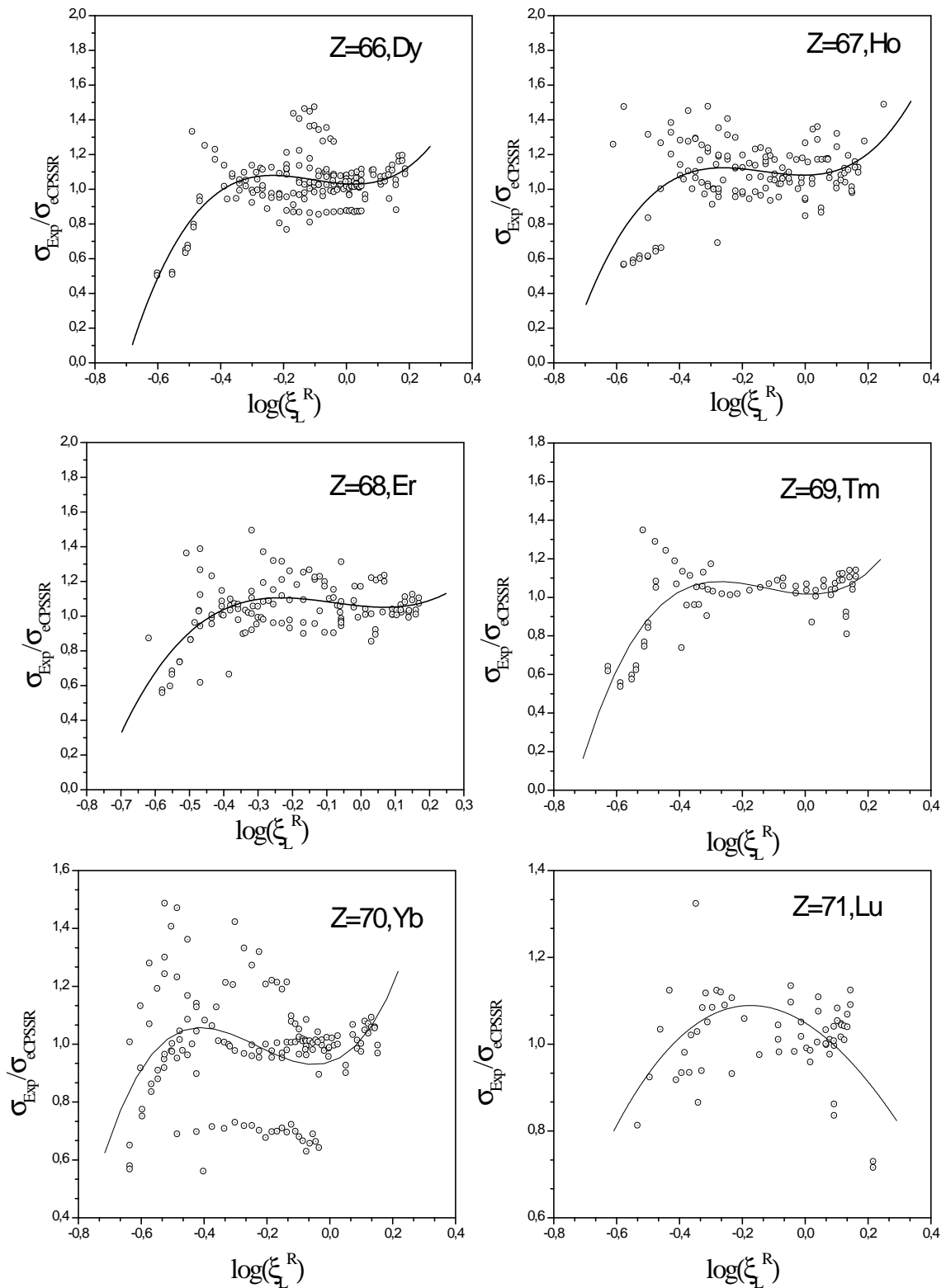
**Figure III.12 :** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{48}\text{Cd}$ ,  $_{49}\text{In}$ ,  $_{50}\text{Sn}$ ,  $_{51}\text{Sb}$ ,  $_{52}\text{Te}$ ,  $_{53}\text{I}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \begin{smallmatrix} R \\ L \end{smallmatrix} \right)$



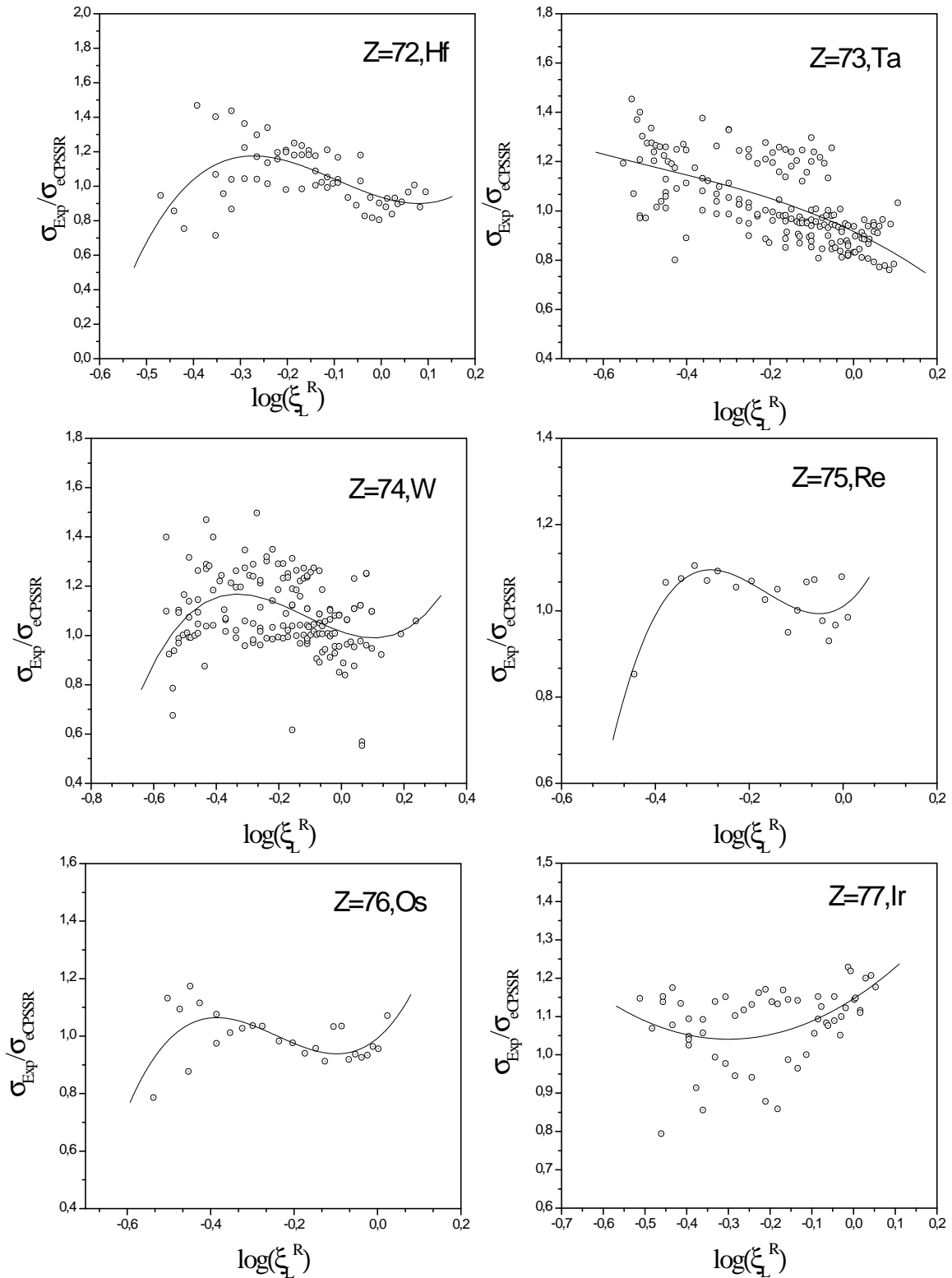
**Figure III.13:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{54}\text{Xe}$ ,  $_{55}\text{Cs}$ ,  $_{56}\text{Ba}$ ,  $_{57}\text{La}$ ,  $_{58}\text{Ce}$ ,  $_{59}\text{Pr}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$



**Figure III.14 :** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{60}\text{Nd}$ ,  $_{61}\text{Pm}$ ,  $_{62}\text{Sm}$ ,  $_{63}\text{Eu}$ ,  $_{64}\text{Gd}$ ,  $_{65}\text{Tb}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$

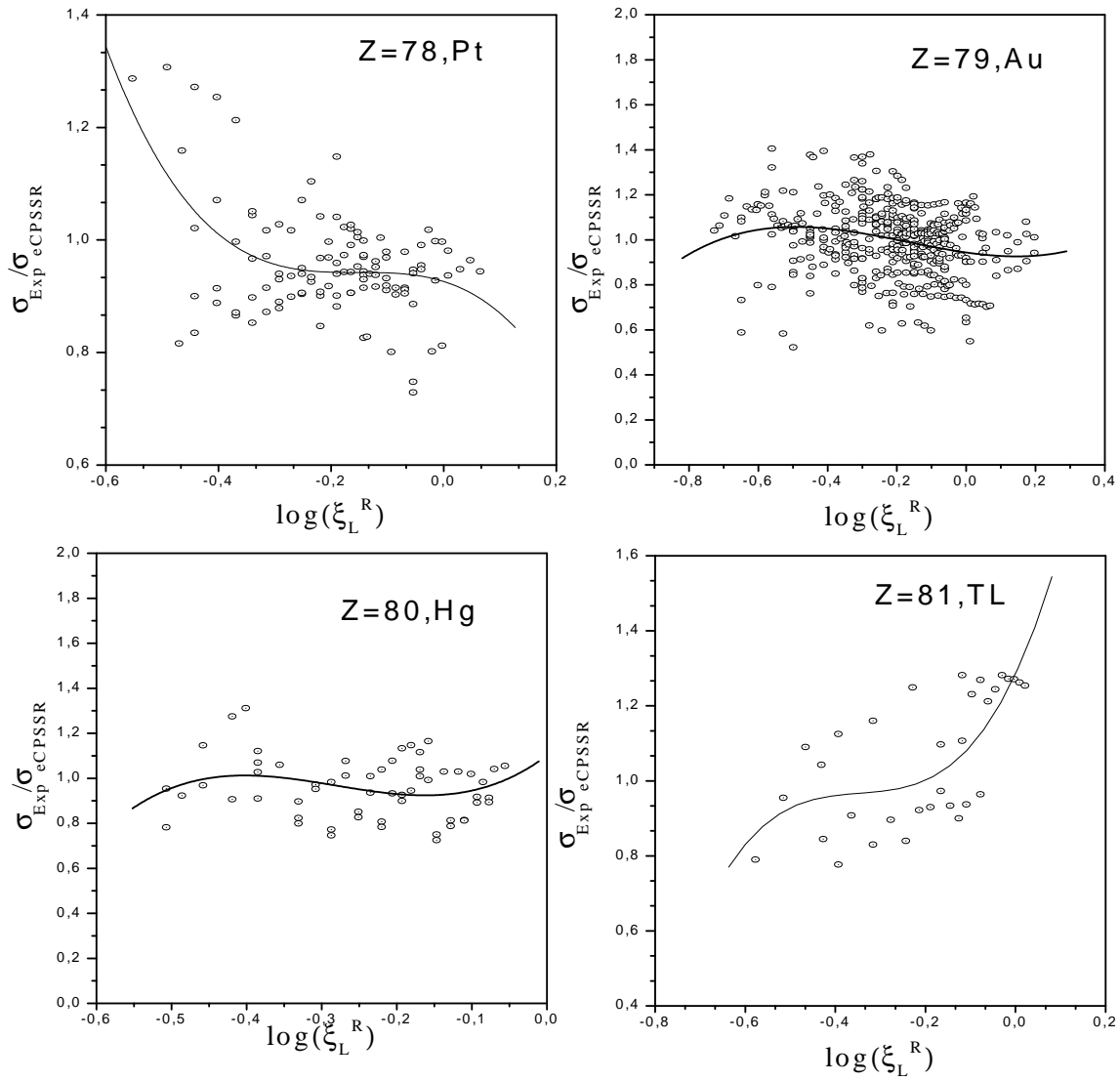


**Figure III.15 :** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  ${}_{66}\text{Dy}$ ,  ${}_{67}\text{Ho}$ ,  ${}_{68}\text{Er}$ ,  ${}_{69}\text{Tm}$ ,  ${}_{70}\text{Yb}$ ,  ${}_{70}\text{Lu}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10}\left(\frac{R}{L}\right)$

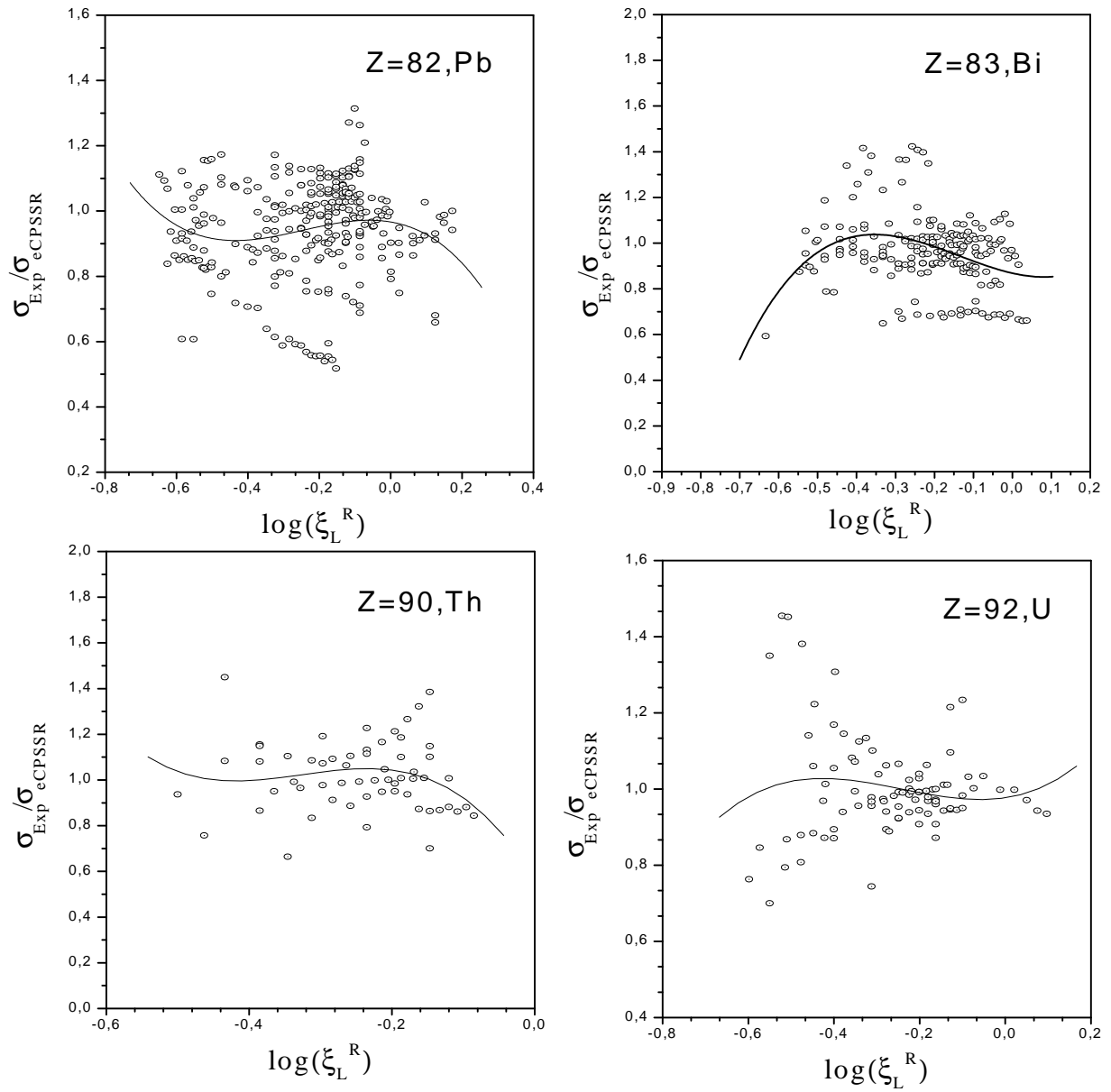


**Figure III.16 :** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{72}\text{Hf}$ ,  $_{73}\text{Ta}$ ,  $_{74}\text{W}$ ,  $_{75}\text{Re}$ ,  $_{76}\text{Os}$ ,  $_{77}\text{Ir}$  en fonction de la

$$\text{vitesse réduite } \text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$$



**Figure III.17 :** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{78}Pt$ ,  $_{79}Au$ ,  $_{80}Hg$ ,  $_{81}Tl$ , en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$



**Figure III.18:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{82}Pb$ ,  $_{83}Bi$ ,  $_{90}Th$ ,  $_{92}U$  en fonction de la vitesse

$$\text{réduite } \text{Log}_{10} \left( \xi_L^R \right)$$

**Tableau III.4:** Les coefficients d'interpolation pour le calcul de section efficaces semi-empirique et leurs valeurs de  $\epsilon_{rms}$  correspondantes

X-ray production											
Z	a <sub>0</sub>	a <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	$\epsilon_{rms}$	Z	a <sub>0</sub>	a <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	$\epsilon_{rms}$
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

### III.4. Discussion des résultats:

#### III.4.1. Erreur quadratique moyenne:

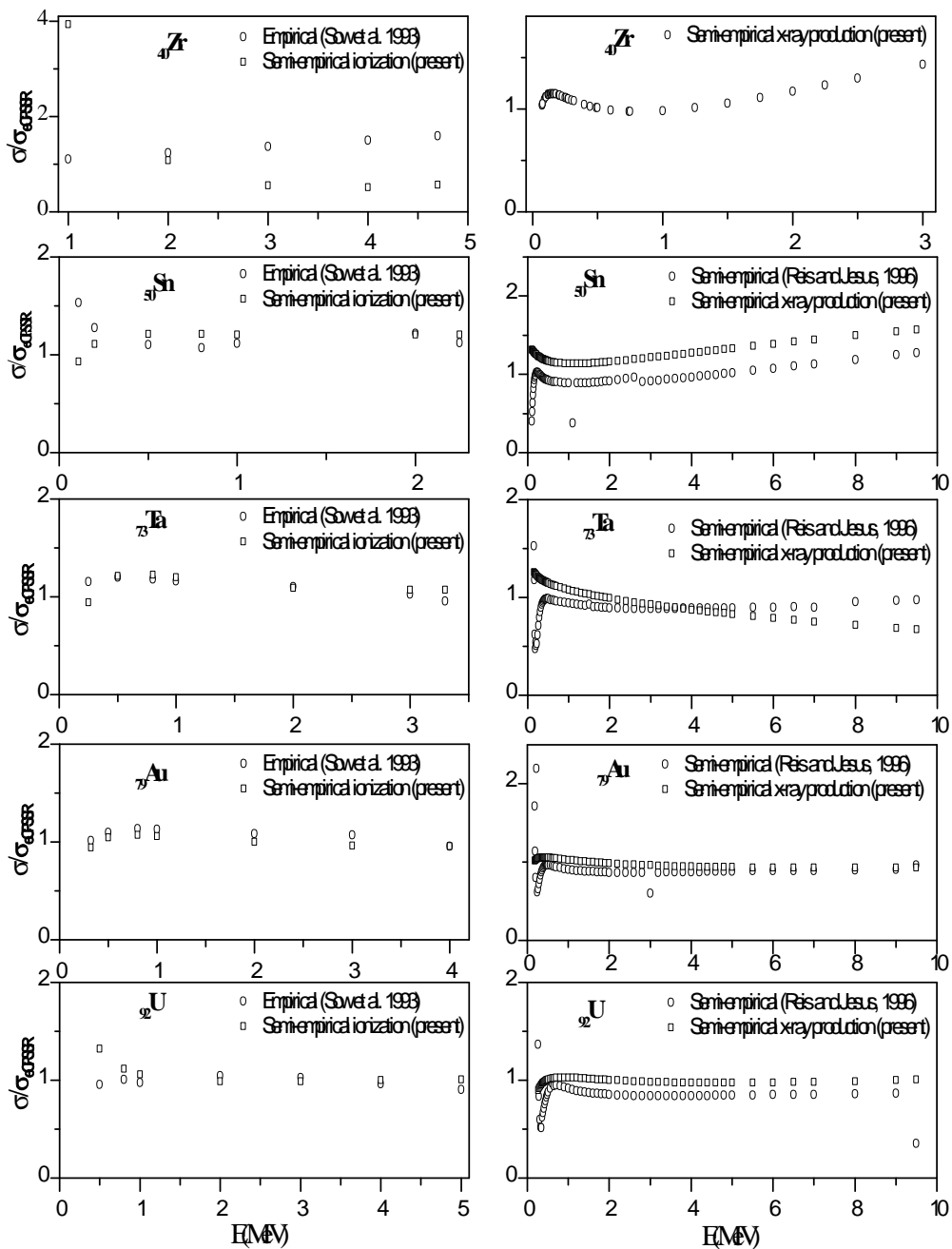
Généralement, et d'après les résultats présentés dans le tableau 3, les valeurs varient dans des limites acceptables: de 0.01% à 3.1% pour la section d'ionisation et de 0.09% à 13.66% pour la production de rayons X. Une grande dispersion des données expérimentales est observée pour la section efficace d'ionisation de Ar ( $Z=18$ ) avec 16.55%; et une déviation moyenne de 20.71%, pour Cu ( $Z=29$ ).

#### III.4.2. Comparaison:

La figure III.20 représente nos sections efficaces semi-empiriques d'ionisation et de production de la couche L comparées aux valeurs empiriques rapportées par Reis et Jesus [18] et des travaux empiriques déduits du coefficient d'ajustement [23] en fonction de l'énergie des protons pour des éléments sélectionnés ( $_{40}\text{Zr}$ ,  $_{50}\text{Sn}$ ,  $_{73}\text{Ta}$ ,  $_{79}\text{Au}$  et  $_{92}\text{U}$ ). Toutes ces valeurs sont normalisées à leurs calculs ECPSSR corrigés correspondants (eCPSSR).

En général, les sections efficaces semi-empiriques, tant pour l'ionisation que pour la production de rayons X, concordent avec les calculs eCPSSR pour les cinq éléments sur toute la gamme de l'énergie du proton, sauf pour la section d'ionisation du  $_{18}\text{Ar}$  un facteur de 1.5 est observé. Cela peut être attribué à la grande dispersion des données expérimentales par rapport à leurs valeurs théoriques correspondantes (voir figure 3).

En outre, nos résultats des sections efficaces semi-empiriques se rapprochent généralement des valeurs semi-empiriques de Reis et Jesus [18] et des valeurs empiriques déduites du coefficient d'adaptation par Sow et al. [23] pour la production de rayons X et la section efficace d'ionisation, respectivement. La situation est moins satisfaisante pour les sections efficaces de production de rayons X à basse énergie de proton où les valeurs semi-empiriques de Reis et Jesus [18] présentent un écart important par rapport aux résultats de l'eCPSSR.



**Figure III.19:** Rapport des sections efficaces semi-empiriques de l'ionisation (côté gauche) et de la production de rayons X (côté droit) et autres travaux semi-empiriques et empiriques en fonction de l'énergie des protons pour des éléments sélectionnés. Ces résultats sont normalisés à leurs valeurs eCPSSR correspondantes.

**Références Bibliographiques:**

- [1] R.W. Fink, R.C. Jopson, H. Mark and C.D. Swift, *Rev. Mod. Phys.* 38 (1966) 513.
- [2] W. Bambynek, B. Crasemann, R.W. Fink, H.U. Freund, H. Mark, C.D. Swift, R.E. Price and P.V. Rao, *Rev. Mod. Phys.* 44 (1972) 716.
- [3] C. H. Rutledge and R. L. Watson, *Atom. Data and Nucl. Data Tables* 12 (1973) 195.
- [4] R. K. Gardner and T. J. Gray, *Atom. Data and Nucl. Data Tables* 21 (1978) 515.
- [5] T. L. Hardt and R. L. Watson, *Atom. Data and Nucl. Data Tables* 17 (1976) 107.
- [6] C. Heitz, G. J. costa, J. Cailleret and G. Lagarde, *Rapport CRN/PN 82-24* (1982).
- [7] R. S. Sokhi and D. Crumpton, *Atom. Data and Nucl. Data Tables* 30 (1984) 49.
- [8] H. Paul and J. Sacher, *Atom. Data and Nucl. Data Tables* 42 (1989) 105.
- [9] H. Paul and O. Bolik, *Atom. Data and Nucl. Data Tables* 54 (1993) 75.
- [10] I. Orlic, C. H. Sow and S. M. Tang, *Atom. Data and Nucl. Data Tables* 56 (1994) 159.
- [11] J. Miranda and G. Lapicki. *At. Data Nucl. Data Tables* 100(2014) 651.
- [12] 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.
- [13] E. Batyrbekov, I. Gorbachev, I. Ivanov and A. Platov, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 325 (2014) 84.
- [14] H. Mohan, A.K. Jain, M. Kaur, P.S. Singh and S. Sharma. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* 332 (2014) 103.
- [15] E. Merzbacher and H. W. Lewis. *Handbuch Physik* 34 (1958)166.
- [16] G. Basbas, W. Brand and R. Laubert, *Phys. Rev.* A7 (1973) 983.
- [17] Z. Liu and S. J. Cipolla. *Compt. Phys. Commun.* 97(1996) 315.
- [18] M. A. Reis and A. P. Jesus. *At. Data Nucl. Data Tables* 63(1996)1.
- [19] Z. Šmit and G. Lapicki. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 47(2014)055203.
- [20] W. Brandt and G. Lapicki. *Phys. Rev.* A23(1981) 1717.
- [21] H. Paul. *Nucl. Instrum. Methods* 192(1982) 11.
- [22] L. Rodriguez-Fernandez, J. Miranda, A. Oliver, F. Cruz and J. R. Pegueros. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* 75(1993) 49.

[23] C. H. Sow, I. Orlic, K. K. Loh and S. M. Tang. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect.B75(1993) 58.

# Conclusion

Nous avons présenté dans ce travail les résultats des calculs des sections efficaces théoriques, calculé par les modèle théoriques ECPSSR et eCPSSR d'ionisation et de production de la couche L des éléments de numéro atomique ( $18 \leq Z \leq 92$ ) pour des protons d'énergie comprise entre 0.02 MeV et 10 MeV . Également nous avons rapporté les sections efficaces semi-empiriques d'ionisation et de production pour la même gamme d'énergie de proton.

Malgré les améliorations incorporées dans la théorie ECPSSR, des écarts persistent entre les données expérimentales et les prévisions théoriques surtout à basse énergie du proton. Ceci a conduit les auteurs à adopter des méthodes empiriques et semi-empiriques

Nous avons calculé les sections efficaces d'ionisation et de production à l'aide d'un programme informatique que nous avons développé basé principalement sur le modèle PWBA pour le calcul théorique et sur les valeurs expérimentales compilées et éditées pendant la période de 1994 et 2014 pour le calcul semi-empirique. Dans un tableau on a regroupé notre nouvelle base des données en fonction du numéros atomique, couvert environ 991 et 5266 points expérimentaux pour les sections efficaces totales d'ionisation et de production de rayons X.

Dans ce présent travail, nous avons présentées les résultats des sections efficaces semi-empiriques, basées sur le fit des données expérimentales normalisées à leurs valeurs théoriques correspondantes calculées dans le cadre du modèle corrigé eCPSSR des couches L des éléments de numéros atomiques ( $18 \leq Z \leq 92$ ) pour des protons d'énergie comprise entre 0.02 et 10.0 MeV.

Plusieurs conclusions peuvent être tirées du présent travail :

## *Conclusion*

---

- i. Il y'a une différence importante (un rapport de cinq) est observée entre les résultats des sections efficaces d'ionisation du modèle ECPSSR et ceux calculés avec le modèle corrigés eCPSSR
- ii. une approximation semi-empirique de la section efficace de l'ionisation et de la production de rayons X est ensuite déduite du modèle eCPSSR avec des limites d'intégration exacte, nous devons signaler que notre résultats semi-empirique concordent avec les calculs de l'eCPSSR sur toute la gamme d'énergie et pour la majorité des éléments dans l'intervalle  $18 \leq Z \leq 92$  ainsi on observe généralement un bon accord avec autres valeurs semi-empiriques et empiriques édités par des autres auteurs. Aussi a faible énergie de proton incident une déviation important est observé.

### Liste des figures

#### Chapitre I: Paramètres atomiques et la fluorescence X

<b>Figure I.1:</b> Transitions permises entre électrons les couches.....	9
<b>Figure I.2:</b> Niveaux d'énergie et quelque transition électronique permise.....	11
<b>Figure I.3 :</b> Les rayonnements électromagnétiques.....	12
<b>Figure I.4:</b> Ionisation par effet photoélectrique.....	14
<b>Figure I.5:</b> Désexcitation par émission fluorescente.....	15
<b>Figure I.6:</b> Représentation schématique d'une transition Auger.....	17
<b>Figure I.7:</b> Le rendement de fluorescence en fonction du numéro atomique $Z$ pour la couche $K$ .....	19
<b>Figure I.8:</b> Transition de Coster-Kronig.....	22

#### Chapitre II : Modèles théorique

<b>Figures II.1:</b> Comparaison entre les sections efficaces calculées par le modèle PWBA et les valeurs expérimentales des orbites L de l'Or par des protons.....	34
---	----

#### Chapitre III: Calculs théoriques et semi-empirique

<b>Figures III.1:</b> Répartition des valeurs expérimentales de la section efficace d'ionisation disponible (a) et de et production de rayons X (b) en fonction du numéro atomique $Z$ ....	52
<b>Figures III.2:</b> Rapport de la section efficace théorique basée sur le modèle ECPSSR et le modèle corrigés en fonction de l'énergie de proton et pour tous les éléments avec les numéros atomique $18 \leq Z \leq 92$ .....	55
<b>Figure III.3:</b> Rappor des sections efficace totale d'ionisation expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments $_{18}\text{Ar}$ , $_{39}\text{Y}$ , $_{41}\text{Nb}$ , $_{47}\text{Ag}$ , $_{48}\text{Cd}$ , $_{49}\text{In}$ en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$ .....	58
<b>Figure III.4:</b> Rappor des sections efficace totale d'ionisation expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments $_{50}\text{Sn}$ , $_{51}\text{Sb}$ , $_{52}\text{Te}$ , $_{53}\text{I}$ , $_{58}\text{Ce}$ , $_{59}\text{Pr}$ en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$ .....	59
<b>Figure III.5:</b> Rappor des sections efficace totale d'ionisation expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments $_{60}\text{Nd}$ , $_{62}\text{Sm}$ , $_{63}\text{Eu}$ , $_{64}\text{Gd}$ , $_{65}\text{Tb}$ , $_{66}\text{Dy}$ en fonction de la vitesse réduite $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$ .....	60

## Légende des figures

- Figure III.6:** Rapport des sections efficace totale d'ionisation expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{67}\text{Ho}$ ,  $_{68}\text{Er}$ ,  $_{70}\text{Yb}$ ,  $_{71}\text{Lu}$ ,  $_{72}\text{Hf}$ ,  $_{73}\text{Ta}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$ .....61
- Figure III.7:** Rapport des sections efficace totale d'ionisation expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{74}\text{W}$ ,  $_{76}\text{Os}$ ,  $_{77}\text{Ir}$ ,  $_{78}\text{Pt}$ ,  $_{79}\text{Au}$ ,  $_{80}\text{Hg}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$ .....62
- Figure III.8:** Rapport des sections efficace totale d'ionisation expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{82}\text{Pb}$ ,  $_{83}\text{Bi}$ ,  $_{90}\text{Th}$ ,  $_{92}\text{U}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$ .....63
- Figure III.9:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{18}\text{Ar}$ ,  $_{24}\text{Cr}$ ,  $_{25}\text{Mn}$ ,  $_{26}\text{Fe}$ ,  $_{27}\text{Co}$ ,  $_{28}\text{Ni}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$ .....64
- Figure III.10:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{29}\text{Cu}$ ,  $_{30}\text{Zn}$ ,  $_{31}\text{Ga}$ ,  $_{32}\text{Ge}$ ,  $_{33}\text{As}$ ,  $_{34}\text{Se}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$ .....65
- Figure III.11:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{35}\text{Br}$ ,  $_{36}\text{Kr}$ ,  $_{37}\text{Rb}$ ,  $_{38}\text{Sr}$ ,  $_{39}\text{Y}$ ,  $_{40}\text{Zr}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$ .....66
- Figure III.12:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{41}\text{Nb}$ ,  $_{42}\text{Mo}$ ,  $_{44}\text{Ru}$ ,  $_{45}\text{Rh}$ ,  $_{46}\text{Pd}$ ,  $_{47}\text{Ag}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$ .....67
- Figure III.13:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{48}\text{Cd}$ ,  $_{49}\text{In}$ ,  $_{50}\text{Sn}$ ,  $_{51}\text{Sb}$ ,  $_{52}\text{Te}$ ,  $_{53}\text{I}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$ .....68
- Figure III.14:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{54}\text{Xe}$ ,  $_{55}\text{Cs}$ ,  $_{56}\text{Ba}$ ,  $_{57}\text{La}$ ,  $_{58}\text{Ce}$ ,  $_{59}\text{Pr}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$ .....69
- Figure III.15:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  $_{60}\text{Nd}$ ,  $_{61}\text{Pm}$ ,  $_{62}\text{Sm}$ ,  $_{63}\text{Eu}$ ,  $_{64}\text{Gd}$ ,  $_{65}\text{Tb}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10} \left( \frac{R}{L} \right)$ .....70

## Légende des figures

---

- Figure III.16:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  ${}_{66}\text{Dy}$ ,  ${}_{67}\text{Ho}$ ,  ${}_{68}\text{Er}$ ,  ${}_{69}\text{Tm}$ ,  ${}_{70}\text{Yb}$ ,  ${}_{70}\text{Lu}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10}\left(\frac{R}{L}\right)$ .....71
- Figure III.17:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  ${}_{72}\text{Hf}$ ,  ${}_{73}\text{Ta}$ ,  ${}_{74}\text{W}$ ,  ${}_{75}\text{Re}$ ,  ${}_{76}\text{Os}$ ,  ${}_{77}\text{Ir}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10}\left(\frac{R}{L}\right)$ .....72
- Figure III.18:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  ${}_{78}\text{Pt}$ ,  ${}_{79}\text{Au}$ ,  ${}_{80}\text{Hg}$ ,  ${}_{81}\text{Tl}$ , en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10}\left(\frac{R}{L}\right)$ .....73
- Figure III.19:** Rapport des sections efficace totale de production expérimentales et théoriques (eCPSSR) de la couche L pour les éléments  ${}_{82}\text{Pb}$ ,  ${}_{83}\text{Bi}$ ,  ${}_{90}\text{Th}$ ,  ${}_{92}\text{U}$  en fonction de la vitesse réduite  $\text{Log}_{10}\left(\frac{R}{L}\right)$ .....74
- Figure III.20:** Rapport des efficacités semi-empiriques de l'ionisation (côté gauche) et de la production de rayons X (côté droit) et autres travaux semi-empiriques et empiriques en fonction de l'énergie des protons pour des éléments sélectionnés. Ces résultats sont normalisés à leurs valeurs eCPSSR correspondantes.....77

### Liste des tableaux

#### Chapitre I : Paramètres atomiques et la fluorescence X

**Tableau I.1** : La configuration électronique et le moment angulaire total.....8

#### Chapitre II : Modèles théorique

**Tableau II.1** Rendements de fluorescence de sous-couches L1 , L2 et L3, probabilités de transition Coster-Kronig [35] et les taux d'émissions de rayons X [42].....43

#### Chapitre III : Calculs théoriques et semi-empirique

**Tableau III.1** : Nombre de données expérimentales des sections efficaces disponibles (rejetées) d'ionisation, (et ), des éléments avec  $18 \leq Z \leq 92$  par des protons d'énergie de 0,02 à 10,0 MeV.....50

**Tableau III.2** : Nombre de données expérimentales des sections efficaces disponibles (rejetées) de production de rayons X, (et ), des éléments avec  $18 \leq Z \leq 92$  par des protons d'énergie de 0,02 à 10,0 MeV.....51

**Tableau III.3:** Les sections efficaces totales calculé par le modèle théorique ECPSSR (Wrong) et celles calculé par le modèle corrigés eCPSSR ( Correct) pour quelques éléments sélectionnés ou l'énergie de proton compris entre 0.02 et 10.0.....54

**Tableaux III.4:** Les coefficients d'ajustement pour le calcul de section efficaces semi-empirique d'ionisation et de production totale et leurs valeurs de correspondantes.....75

في هذه الأطروحة تم حساب المقاطع المستعرضة للأشعة السينية و للتأين للخطوط و الطبقات L و ذلك باستعمال برنامج آلي يعتمد على النموذجين ECPSSR و ECPSSR (eCPSSR). بالنسبة للمقاطع المستعرضة للتأين و للأشعة السينية تم حسابهما بالنسبة لجميع العناصر ذات العدد الذري المحصور بين  $(18 \leq Z \leq 92)$  بروتونات طاقتها تصل الى 10 . قمنا كذلك بحساب المقاطع المستعرضة للأشعة السينية و للتأين وذلك باستعمال طريقة تعتمد على القيم المحسوبة نظريا و القيم المقاسة تجريبيا. و لقد تمت مقارنة هذه النتائج مع اخرى نشرت من قبل.

**كلمات مفتاح:** المقاطع المستعرضة للأشعة السينية و للتأين للخطوط و الطبقات L، نموذج ECPSSR، طريقة شبه تجريبية.

### Abstract

In this contribution we present theoretical predictions of the L shell ionization and production cross sections within the ECPSSR and the eCPSSR theories for elements with atomic number  $18 \leq Z \leq 92$  by proton impact with energy up to 10.0 MeV. As a first part of this work, the results obtained within ECPSSR are compared with other ones (eCPSSR). In the second part a semi-empirical approximation to L x-ray production and ionization cross sections by proton impact was deduced. The obtained results are compared with other theoretical and experimental values.

**Keywords:** L-shell ionization and x-ray production cross section, ECPSSR model, semi-empirical method.

### Résumé

Nous avons présenté dans ce travail les résultats de calcul théoriques des sections efficaces d'ionisation et de production des couches L des éléments de numéro atomique  $18 \leq Z \leq 92$  pour des protons d'énergie jusqu'à 10 MeV. Ce calcul est basé sur les deux modèles ECPSSR et le ECPCCR corrigé (eCPSSR). Dans un premier temps une comparaison entre ces deux modèles est faite. Dans la deuxième partie, la section efficace de production et d'ionisation des couches L par impact de proton a été déduite. Ce calcul des sections efficaces semi-empirique est basé sur l'utilisation des valeurs théoriques et des valeurs expérimentales. Une comparaison a été faite entre nos valeurs et celles des autres auteurs.

**Mots clés:** Section efficace de production et d'ionisation de la couche L, Le modèle ECPSSR, La méthode semi-empirical.