



Mémoire de fin d'études

PRESENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION

DU DIPLOME DE : Master

Filière : Physique

Option : Physique des Matériaux

THÈME :

Calcul des sections efficaces de la fluorescence X (XRFCS) des
raies L et M de L'Or ($_{79}\text{Au}$)

Préparé par : BACHEN Ines

Soutenu le : 10/06/2025

Devant le jury :

Président :	KHALFALLAH Farid	MCA	Université de BBA
Rapporteur :	KAHOUL Abdelhalim	Pr	Université de BBA
Co-rapporteur :	AMARI Kahina	Doctorante	Université de BBA
Examineur :	IMAKHLAF Anis	MCB	Université de BBA
Examineur :	KOUSSA Walid	MCB	Université de BBA

Année Universitaire 2024-2025

Remerciement

REMERCIEMENTS

Avant tout, nous remercions Allah le tout puissant de nous avoir donnée le courage, la volonté, la patience et la santé durant toutes ces années d'études et que grâce à lui ce travail a été réalisé.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à mon directeur de mémoire, **Pr. KAHOUL Abdelhalim**, pour m'avoir encadré, orienté et soutenu tout au long de la réalisation de ce travail. Je le remercie sincèrement pour ses conseils avisés, sa patience et le temps précieux qu'il m'a consacré. Sa disponibilité, son exigence scientifique et sa bienveillance ont grandement contribué à l'aboutissement de ce mémoire. Qu'il trouve ici l'expression de ma profonde gratitude et de mon respect. J'exprime toute ma reconnaissance à **Dr. KHALFALLAH Farid**, de bien vouloir nous fait l'honneur de présider le jury de ce mémoire.

J'adresse mes sincères remerciements aux **Dr. IMAKHLAF Anis** et **Dr. KOUSSA Oualid**, membres de jury, pour avoir accepté de juger ce travail.

Je remercie sincèrement **Mlle. AMARI Kahina**, pour son soutien précieux et son accompagnement professionnel tout au long de ce travail.

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

Enfin, je ne saurais oublier de remercier tous mes collègues de la promotion 2020.

Merci

Dédicaces

Dédicaces

Je dédie ce travail :

A mes chers parents.

A mes frères Aymen et Akram.

A ma petite sœur Israa

A mes amis

A tous ceux qui me sont chères et proches.

Ines.

Table de matières

Table de matières

REMERCIEMENTS

DÉDICACES

TABLE DE MATIÈRES

INTRODUCTION GÉNÉRALE

INTRODUCTION GÉNÉRALE 1

CHAPITRE I: RAPPEL THÉORIQUE SUR LES PARAMÈTRES ATOMIQUES

I.1. INTRODUCTION : 4

I.2. L'ATOME : 4

I.3. TRANSITIONS ÉLECTRONIQUES ET RÈGLES DE SÉLECTIONS : 6

I.4. LES RAYONNEMENTS : 10

I.5. LES INTERACTIONS : 11

I.5.1. LES INTERACTION PARTICULE -MATIÈRE : 11

I.5.2 INTERACTION DES RAYONNEMENTS ÉLECTROMAGNÉTIQUES AVEC LA MATIÈRE : . 11

I.5.2.1. EFFET PHOTOÉLECTRIQUE : 12

I.5.2.2 EFFET COMPTON : 12

I.5.2.3. CRÉATION DE PAIRE : 13

I.5.2. 4. LA COMPARAISON ENTRE LES TROIS EFFETS : 14

I.6. FLUORESCENCE X : 14

I.7. RENDEMENT DE LA FLUORESCENCE : 15

Table de matières

I.8. EFFET AUGER :.....	17
I.9. LES TRANSITIONS DE COSTER-KRONIG :.....	18
I.10. SECTION EFFICACE :.....	18
I.10.1. SECTION EFFICACE TOTALE DE PRODUCTION DE RAYON X :.....	18
I.10.2. SECTION EFFICACE DE DE LA COUCHE L :.....	18
I.10.3. SECTION EFFICACE DE DE LA COUCHE M :.....	19
I.11. CONCLUSION :.....	21
RÉFÉRENCES :	22

CHAPITRE II: CALCUL EMPIRIQUE DES SECTIONS EFFICACES DE LA FLUORESCENCE X DES RAIES L ET M DE L'OR (${}_{79}\text{Au}$)

II.1. INTRODUCTION :.....	25
II.2.L'ÉLÉMENT DE L'OR :.....	25
II.2.BASE DE DONNÉES DES SECTIONS EFFICACES :	26
II.3. MÉTHODE DE CALCUL EMPIRIQUE :	36
II.4. DISCUSSION ET COMPARAISON DES RÉSULTATS :	42
II.5. CONCLUSION :	46
RÉFÉRENCES.....	47

CONCLUSION GÉNÉRALE

CONCLUSION GÉNÉRALE.....	52
--------------------------	----

RÉSUMÉ

Liste des tableaux

Liste des tableaux

Titre	page
CHAPITRE I	
Tableau I.1 : La masse et charge des particules.	5
Tableau. I.2 : Les niveaux de transition en utilisant les notations empiriques et quantiques	8
CHAPITRE II	
Tableau II.1 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie L_l	26
Tableau II.2 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie L_α	28
Tableau II.3 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie L_β	30
Tableau II.4 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie L_γ	31
Tableau II.5 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie L_{tot}	33
Tableau II.6 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie M_ξ	34
Tableau II.7 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie $M_{\alpha\beta}$	34
Tableau II.8 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie M_m	35
Tableau II.9 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie M_γ	35
Tableau II.10 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie M_{tot}	36
Tableau II.11 : Les coefficients d'interpolation pour le calcul des sections efficaces empiriques de L_l , L_α , L_β , L_γ , L_{tot} et leurs valeurs de $\varepsilon_{rms}\%$ correspondantes.	40
Tableau II.12 : Les coefficients d'interpolation pour le calcul des sections efficaces empiriques de M_ξ , $M_{\alpha\beta}$, M_m , M_γ , M_{tot} et leurs valeurs de $\varepsilon_{rms}\%$ correspondantes.	41

Liste des figures

Liste des figures

Titre	Page
CHAPITRE I	
Figure I .1 : la structure de l'Atome.	6
Figure I .2 : Transition entre les niveaux (Bouhebel, 2023).	8
Figure I.3 : Certaines transitions autorisées dans les couches (K, L, M, N) (Bendjedi, 2018)	9
Figure I.4 : Les rayonnements électromagnétiques.	10
Figure I.5 : Schéma de rayonnement ionisée et non ionisée (Djeddaoui ,2021)	11
Figure I.6 : Schéma de l'effet photo-électrique (Slimani, 2016).	12
Figure I.7 : Effet Compton (Slimani, 2016).	13
Figure I.8 Représentation schématique de l'effet création de paire (Slimani, 2016).	13
Figure I.9 : Comparaison et étude des 3 effets par modification du nombre atomique Z en fonction de l'énergie (Diana El Hajjar, 2014)	14
Figure I.10 : Les transitions non radiative (i) Transitions de C-K et (ii) l'effet Auger.	17
Figure I.11 : schéma de l'effet Auger (Kahoul, 2015).	17
CHAPITRE II	
Figure II.1 : Distribution de la fluorescence X des données expérimentales des sections efficaces des raies L_l $L\alpha$, $L\beta$, $L\gamma$, L_{tot} en fonction de l'énergie $\ln(E)$	38
Figure II.2 : Distribution de la fluorescence X des données expérimentales des sections efficaces des raies M_ξ $M_{\alpha\beta}$, M_m , M_γ , M_{tot} en fonction de l'énergie $\ln(E)$	39
Figure II.3 : Comparaison entre les résultats empiriques des raies L_l $L\alpha$, $L\beta$, $L\gamma$, L_{tot} déterminées et les résultats expérimentales en fonction de l'énergie E (keV).	44
Figure II.4 : Comparaison entre les résultats empiriques des raies M_ξ , $M_{\alpha\beta}$, M_m , M_γ , M_{tot} déterminées et les résultats expérimentaux en fonction de l'énergie E (keV).	45

Introduction générale

Introduction générale

Introduction générale

la physique atomique est le domaine de la physique consacré à l'étude de la structure des atomes et des molécules, ainsi qu'à l'analyse des processus et caractéristiques physiques et chimiques à une échelle microscopique, les interactions avec le rayonnement électromagnétiques.

Historiquement, cette discipline a été la fondation de toute la physique quantique et elle a joué un rôle crucial dans l'évolution de la physique du vingtième siècle en général. Actuellement, cette science couvre un large champ de domaines et ses développements se retrouvent finalement dispersés dans diverses spécialités, telles que : le magnétisme, les propriétés optiques des solides, l'analyse chimique, l'imagerie par résonance magnétique et les lasers.

Depuis l'époque antique, les philosophes grecs ont proposé une théorie concernant la nature de la matière, démontrant que celle-ci est composée de petits éléments indivisibles appelés atomes. Vers la fin du 19^{ème} siècle, les recherches relatives aux atomes et aux molécules ont commencé, puis se sont améliorées avec le développement de la théorie quantique au 20^{ème} siècle. De multiples expériences ont été réalisées dans le domaine, de la physique atomique, une branche de la physique qui porte un intérêt particulier à l'examen des caractéristiques et des comportements des atomes à l'échelle atomique et subatomique. L'une de ces expériences est celle de Rutherford, qui a cherché à déterminer la structure atomique. Cette expérience a démontré que l'atome se compose d'une charge centrale. Nouvellement appelée noyau de l'atome (qui contient la majeure partie de la masse de l'atome), entourée d'un nuage d'électrons qui tourne autour d'elle sur des orbites indiquées par les lettres de l'alphabet (K, L, M ...), de sorte que chaque couche contient un nombre spécifique d'électrons.

La **section efficace** est une grandeur physique qui mesure la probabilité qu'un processus atomique spécifique se produise lorsqu'un atome est irradié par un rayonnement incident (par exemple des photons X ou des électrons). Dans le contexte de la **fluorescence X**, il s'agit de la probabilité qu'un photon incident provoque l'émission d'un photon caractéristique provenant d'une raie (K, L, ou M) d'un élément donné.

Dans ce travail, nous présentons les résultats de calcul des sections efficaces empiriques des raies L et M de l'Or.

Introduction générale

Ce mémoire est divisé en deux chapitres :

Dans le premier chapitre, nous avons fait un rappel des théories de calcul des différents paramètres atomiques de la fluorescence X .

Le deuxième chapitre, Analyse de la base des données et les résultats de calcul des sections efficaces empiriques pour l'élément l'Or ($Z=79$)

En fin une conclusion générale achève ce travail.

Chapitre I

Rappel théorique sur les paramètres atomiques

Chapitre I : Rappel théorique sur les paramètres atomiques

I.1. Introduction

La structure atomique de la matière est un fait bien établi depuis plus d'un siècle et le mouvement des électrons autour de leurs noyaux pour constituer des atomes est unanimement admis par le grand public.

Lorsque la matière est bombardée par un faisceau de particules ou par un rayonnement, cette matière cible interagit différemment selon sa composition atomique et le type de particule constituant le projectile. On distingue alors les particules qui ionisent directement de celles qui ionisent indirectement. Quand le faisceau de projectiles est constitué de particules chargées, ces dernières établissent une interaction directe avec les électrons des atomes de la cible, provoquant généralement une ionisation ou une excitation suivie d'une désexcitation. Cependant, les particules neutres agissent comme des agents d'ionisation indirects : elles doivent d'abord passer par des interactions qui mènent à la formation de particules chargées secondaires. Ces dernières, en retour, peuvent ioniser les atomes de la cible.

L'interaction d'un atome avec un faisceau incident entraîne une excitation atomique, suivie d'un processus de désexcitation, où l'atome retrouve son état stable. Cette désexcitation peut s'accompagner soit de l'émission de rayons X ou de processus non radiatifs, tels que ceux décrits par les processus d'Auger ou de Coster-Kronig.

I.2. L'atome

Le mot atome vient du mot grec « atomos », qui signifie « indivisible », car on pensait autrefois que l'atome était la plus petite unité de matière, impossible à diviser. Toutefois, cette appellation s'est révélée inexacte. En effet, on sait aujourd'hui que l'atome est composé d'un nuage électronique entourant un noyau atomique. Ce noyau, dont la forme est généralement sphérique ou légèrement ellipsoïdale est constitué de nucléons : Z protons (chargés positivement) et $A-Z$ neutrons (électriquement neutres). Ces nucléons sont eux-mêmes entourés par des électrons (chargés négativement), répartis dans des orbitales autour du noyau. Les modèles théoriques actuels considèrent les protons et neutrons comme des particules composites, constitués des quarks, mais reste la base de la structure nucléaire. La distribution de la charge dans le noyau est généralement symétrique, ce qui permet de modéliser sa géométrie pour des analyses de masse précises de chaque noyau.

L'atome est la plus petite partie du matériau, et la plus importante étant la base de leur composition, elle se compose du noyau qui est le centre, et a des protons et des neutrons, et

Chapitre I : Rappel théorique sur les paramètres atomiques

contient également des électrons sur des orbites qui s'appellent couche électronique (K, L, M, N...) L'atome est caractérisé par le symbole A_ZX qui représente :

X : C'est le nom d'atome.

A : Le nombre massique. (Protons et neutrons).

Z : Le nombre atomique (électrons).

Dans l'atome, électriquement neutre, il y a toujours autant d'électrons (-) que de protons (+). Les électrons se répartissent en couches : de la plus proche à la plus éloignée du noyau,

-la couche (n = 1) peut accueillir 2 électrons

- la couche (n = 2) peut accueillir 8 électrons

- la couche (n = 3) peut accueillir 18 électronsetc.

La couche la plus éloignée du noyau, appelée sous le nom de couche externe, revêt une importance cruciale en chimie. Elle détermine en grande partie les propriétés chimiques de l'atome et la manière dont il interagit avec d'autres atomes. Les atomes interagissent de manière à respecter la règle du duet ou de l'octet, ce qui signifie qu'ils cherchent à acquérir une configuration électronique externe similaire à celle des gaz nobles. Pour atteindre cette stabilité. Il existe diverses méthodes permettant aux atomes d'acquérir ou de perdre des électrons. Certains atomes présentent une forte affinité électronique, indiquant leur propension à capter des électrons. D'autres possèdent une faible énergie d'ionisation, ce qui facilite la perte d'électrons. Lorsqu'un atome gagne ou perd un ou plusieurs électrons il devient un ion avec une charge électrique. En outre, les atomes ont aussi la capacité de réagir avec d'autres atomes pour le transfert d'électrons (Kahoul, 2015).

Tableau I.1: La masse et charge des particules.

<i>Symbole</i>	P	e⁻	N
<i>La masse (Kg)</i>	1.67×10^{-27}	9.10×10^{-31}	1.67×10^{-27}
<i>Charge en Colomb</i>	$+1.6 \times 10^{-19}$	-1.6×10^{-19}	<i>Neutre</i>

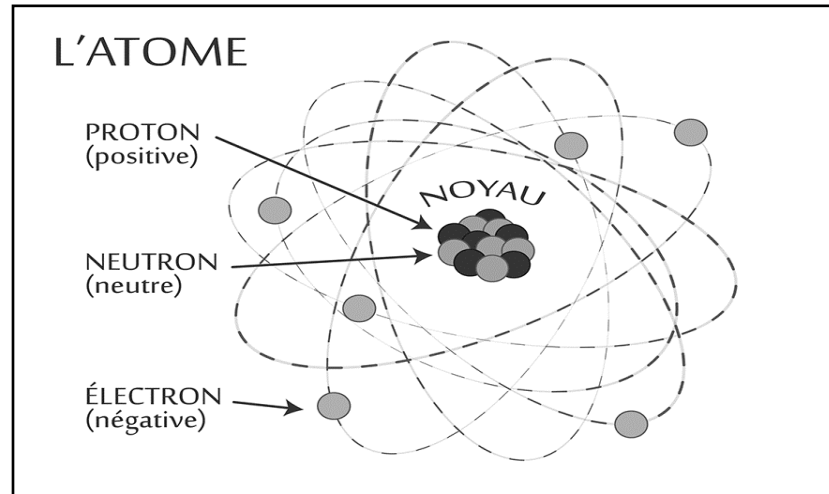


Figure I.1 : la structure de l'Atome.

I.3. Transitions électroniques et Règles de sélections

L'application des postulats de la mécanique quantiques aux phénomènes des transitions électroniques montre l'existence de règles de sélections distinguant les transitions permises de celles qui sont interdites. Le moment cinétique orbital l et le moment cinétique total j des électrons de transition doivent satisfaire à des conditions de conservation.

Les règles de sélections auxquelles doit obéir un électron de transition caractérisé par trois nombres quantique n , j et l sont données par (Beladele, 2015) :

$$\Delta n \geq 1 \quad (\text{I.1})$$

$$\Delta l = \pm 1 \quad (\text{I.2})$$

$$\Delta j = \pm 1 \text{ ou } 0 \quad (\text{I.3})$$

Où

- n : Nombre quantique principal ($n = 1, 2, 3, \dots$)
- l : Le nombre quantique dumoment angulaire orbitale ($0 \leq l \leq n - 1$)
- j : Nombre quantique associé au moment angulaire total de l'électron

$$(|l - s| \leq j \leq |l + s|)$$

La transition d'un niveau d'énergie à un autre se réalise par l'intermédiaire d'un saut quantique. Pour transférer un électron de son état fondamental vers un autre état excité, il est nécessaire de lui fournir une énergie qui soit au moins équivalente à la différence entre les deux niveaux d'énergie concernés par cette transition. Toutefois, toutes les transitions ne sont pas envisageables. Les règles de sélection basées sur les variations des nombres quantiques

Chapitre I : Rappel théorique sur les paramètres atomiques

des états électroniques peuvent résumer celles qui sont sujettes à des restrictions (bien que pour certains éléments, des raies interdites aient été observées).

Pour un atome d'hydrogène :

- Aucune restriction sur la variation de n .

$$\Delta l = \pm 1, \Delta m = 0 \text{ ou } \pm 1, \Delta s = 0 \quad (\text{I.4})$$

- m : Nombre quantique magnétique ($-l \leq m \leq +l$)
- s : nombre quantique associé au spin de l'électron ($s = 1/2$)

Pour une molécule diatomique :

$$\Delta n = \pm 1, \Delta j = \pm 1, \Delta m = 0 \text{ ou } \pm 1 \quad (\text{I.5})$$

Les transitions entre les niveaux atomiques correspondent à des énergies bien définies. Lors de la réorganisation en cascade, ces transitions donnent lieu à l'émission d'un spectre de photons énergétique caractérisé par une série de raies discrètes.

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

Si un trou électronique se forme dans la couche L, les électrons prévenant des couches M, N, O engendreront respectivement des raies $L_\alpha, L_\beta, L_\gamma$. Pour différencier les rayons X provenant des diverses sous-couches, les raies sont nommées $K_{\alpha 1}, K_{\alpha 2}, K_{\beta 1}, L_{\alpha 1}, L_{\gamma 1} \dots$ (Bendjedi, 2018).

Le principe d'exclusion de Pauli exprime que deux électrons ne peuvent avoir les mêmes nombres quantiques sur la même orbitale d'un atome (qui correspond aux trois premiers nombres quantiques identiques), deux électrons doivent avoir des « spins » opposées ou antiparallèles. On représente un tel état atomique par la notation : $n^{2s+1}X_j$ dans laquelle n est le nombre quantique principale de l'électron le plus extérieur et X , par analogie avec la notation s, p, d, f s'écrit S pour $L = 0$, P pour $L = 1$, D pour $L = 2$ et F pour $L = 3 \dots$, $2S + 1$: est la multiplicité de spin. (Bouchoucha, 2013).

Chapitre I : Rappel théorique sur les paramètres atomiques

Lorsqu'un électron est arraché d'une couche électronique E_x par l'effet d'une particule chargée ou d'un photon entrant venant de l'extérieur), cela crée une lacune, ce qui permet à l'électron de passer dans cette couche depuis la couche supérieure E_y jusqu'à combler la lacune. Cela conduit à l'émission d'un rayonnement électromagnétique dont la fréquence ν est :

$$\nu = \frac{|E_x - E_y|}{h} = \frac{E_y - E_x}{h} \quad (I.6)$$

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

ν : étant donc bien défini, cette émission donne lieu à une « raie », chaque couche correspond une « série » de raie (Boufas, 2004)

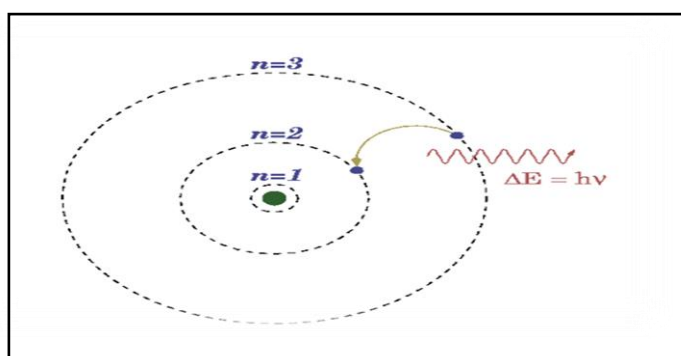


Figure I .2 : Transition entre les niveaux (Bouhebel, 2023).

Tableau. I.2 : Les niveaux de transition en utilisant les notations empiriques et quantiques

Notation empirique	L	J	Notation quantique
M1	0	$\frac{1}{2}$	$^3S_{1/2}$
M2	1	$\frac{1}{2}$	$^3P_{1/2}$
M3	1	$\frac{3}{2}$	$^3P_{3/2}$
M4	2	$\frac{3}{2}$	$^3D_{3/2}$
M5	2	$\frac{5}{2}$	$^3D_{5/2}$
N1	0	$\frac{1}{2}$	$^4S_{1/2}$
N2	1	$\frac{1}{2}$	$^4P_{1/2}$
N3	1	$\frac{3}{2}$	$^4P_{3/2}$
N4	2	$\frac{3}{2}$	$^4D_{3/2}$
N5	2	$\frac{5}{2}$	$^4D_{5/2}$
N6	3	$\frac{5}{2}$	$^4F_{5/2}$
N7	3	$\frac{7}{2}$	$^4F_{7/2}$

Chapitre I : Rappel théorique sur les paramètres atomiques

Les niveaux de transition sont donnés dans le tableau I.2 en utilisant les notations empiriques et quantiques.

L'atome des couches plus externes que celles des électrons éjectés, vont venir combler

Les états vacants en libérant la différence d'énergie entre les couches de départ et d'arrivée de

L'électron sous forme de rayonnement électromagnétique de haute énergie (photon X).

(Bouchoucha, 2013).

La figure I.3.ci-dessous monté certaines transitions permises pour les couches (K.L. M.N).

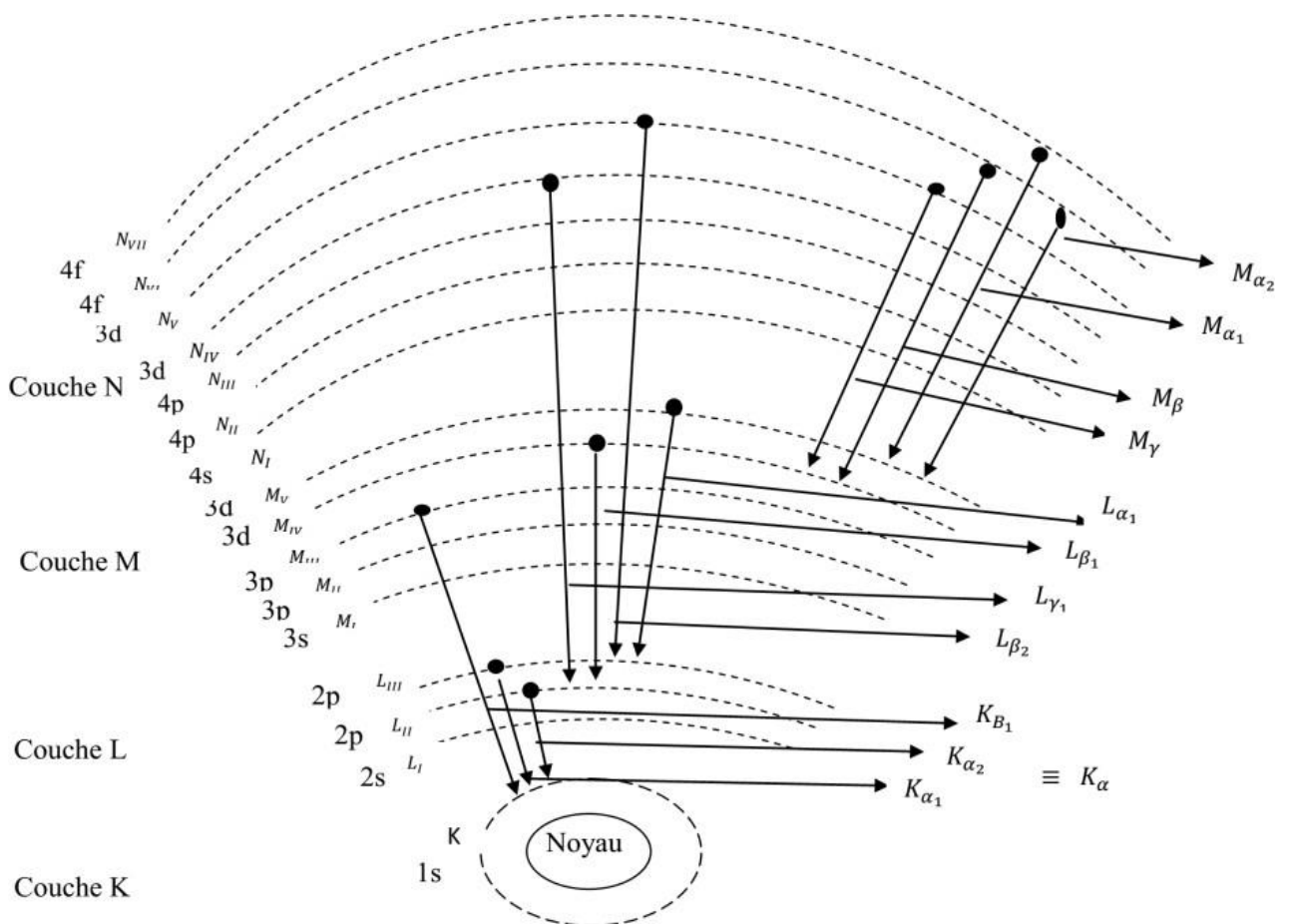


Figure I.3. : Certaines transitions autorisées dans les couches (K, L, M, N) (Bendjedi, 2018)

Chapitre I : Rappel théorique sur les paramètres atomiques

I.4. Les Rayonnements

On distingue deux types de rayonnements :

- **Rayonnement électromagnétique** : il est constitué par les ondes électromagnétiques transportant de l'énergie électrique et magnétique. Ce rayonnement couvre tout le spectre électromagnétique depuis les ondes radio avec une énergie faible aux énergies intermédiaires comme les micro-ondes, l'infrarouge, et le visible jusqu'aux rayons gamma avec des énergies très élevées.
- **Rayonnement particulaire** : il est composé de particules atomiques ou subatomiques. On peut citer les particules alpha et bêta et également les protons, électrons ou neutrons.

Les rayonnements, qu'ils soient électromagnétiques ou corpusculaires, peuvent arracher des électrons des atomes cibles lorsqu'ils arrivent sur une cible avec une énergie élevée. Comme soulevé plus haut, on évoque dans ce cas le rayonnement ionisant. Les particules alpha et bêta et les rayons X et gamma se trouvent parmi ce type de rayonnement. Les rayonnements caractérisés par une énergie qui n'est pas suffisante pour provoquer l'ionisation des atomes, comme les micro-ondes et les ondes radio, ne changent pas la structure des atomes et produisent un rayonnement non ionisant (Belgium, 2014).

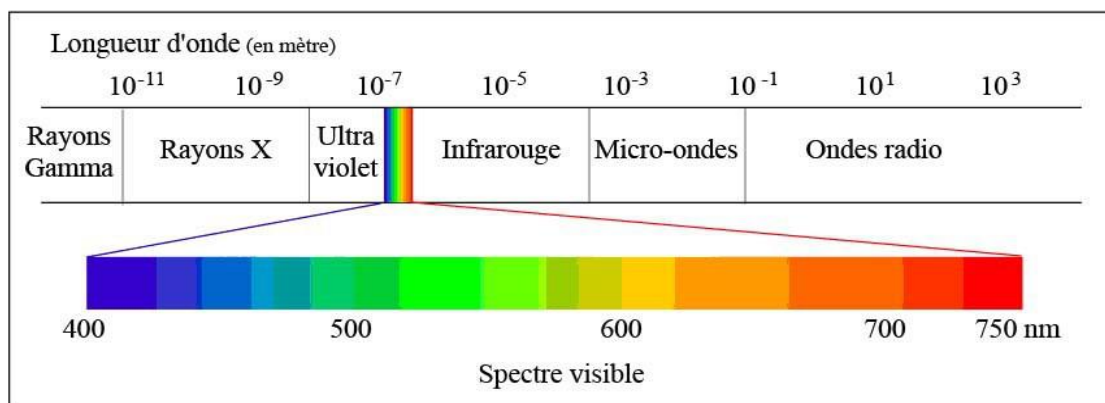


Figure I.4. : Les rayonnements électromagnétiques.

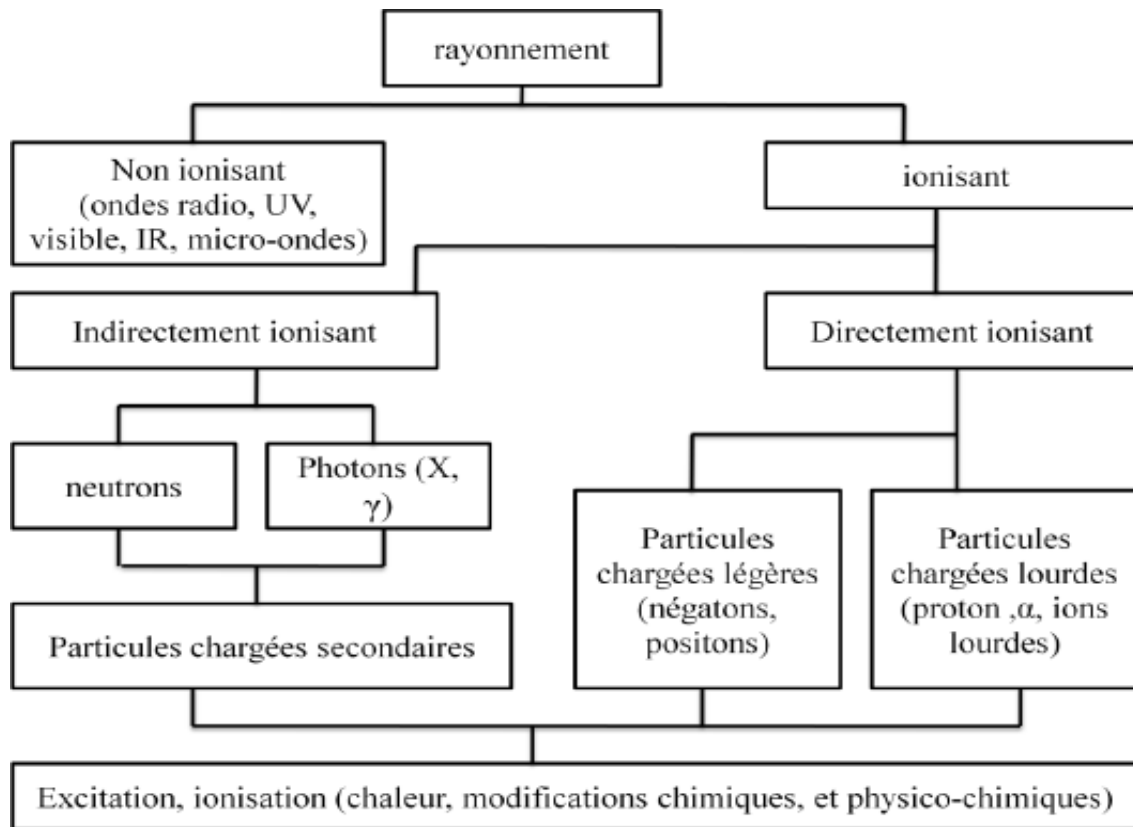


Figure I.5 : Schéma de rayonnement ionisée et non ionisée (Djeddaoui ,2021)

I.5. Les interactions

I.5.1. Les Interaction particule -matière :

Interaction de particules chargés (e^- , e^+ ...) ou non chargés (1_0p , 1_0n ...) avec l'atome, provoquant l'ionisation ou la désintégration des atomes. Pour le premier phénomène, il perd son énergie sous forme des photons pour revenir à son état stable. Pour la deuxième interaction avec le noyau par des forces de coulombiennes, il perd très peu d'énergie (Merabtine, 2020)

I.5.2. Interaction des rayonnements électromagnétiques avec la matière :

Trois types d'interaction sont importants : l'effet photoélectrique, l'effet Compton, et la création de paires. Ces processus conduisent à un transfert partiel ou total de l'énergie des rayonnements γ aux électrons. Le photon peut soit se disparaître, soit être diffusé suivant un angle par rapport à sa direction initiale (Slimani, 2016).

I.5.2.1. Effet photoélectrique :

L'effet photoélectrique est une interaction entre un photon incident d'énergie $h\nu$ et un électron de la matière. Dans ce processus, le photon disparaît et libère un électron du cortège électronique appelé photoélectron (voir *Figure I.6*). Pour des rayonnements γ d'énergie suffisante, la couche la plus probable de laquelle l'électron est éjecté est la couche K.

Le photoélectron est produit avec une énergie cinétique :

$$E_{e^-} = h\nu - E_l \quad (I.7)$$

Où : E_l est l'énergie de liaison de l'électron dans l'atome et Avec h est la constante de Planck ($h = 6.62 \times 10^{-34} J s$).

L'atome se retrouve donc ionisé et le réarrangement électronique instantané provoque soit un rayonnement X de fluorescence caractéristique de l'atome soit plus rarement une émission d'un électron Auger.

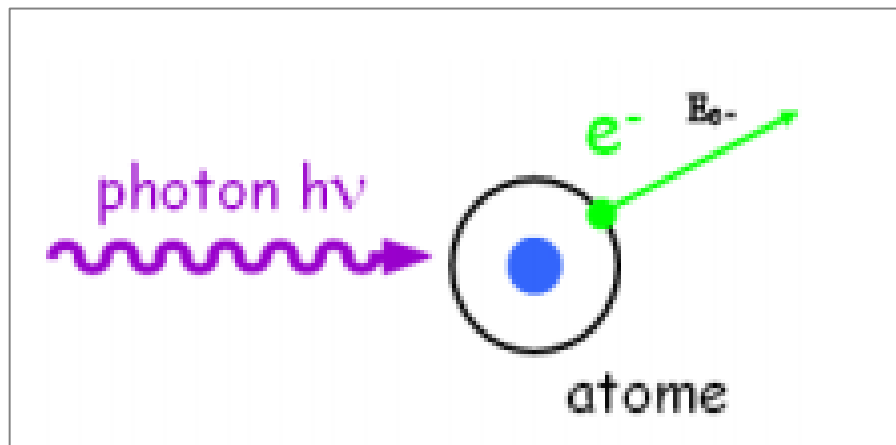


Figure I.6 : Schéma de l'effet photo-électrique (Slimani, 2016).

I.5.2.2. Effet Compton :

C'est un processus où un photon gamma interagit avec un électron et perd une partie de son énergie. Le photon incident est diffusé par rapport à sa direction initiale et cède une partie de son énergie à l'électron qui est alors éjecté. Cet électron est appelé électron de recul. Il possède une énergie plus petite après la collision (l'énergie de photon diffusé $h\nu$ inférieure à l'énergie du photon incident $h\nu_0$), la relation entre la longueur d'onde λ_0 du photon incident et celle λ du photon diffusé est donnée par (Rey, 2007) :

Chapitre I : Rappel théorique sur les paramètres atomiques

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{h(1 - \cos\theta)}{m_e c} \quad (I.8)$$

$(\lambda_1 - \lambda_0)$: Est la différence de longueur d'onde entre le photon incident et le photon diffusé.

m_e : est la masse de l'électron.

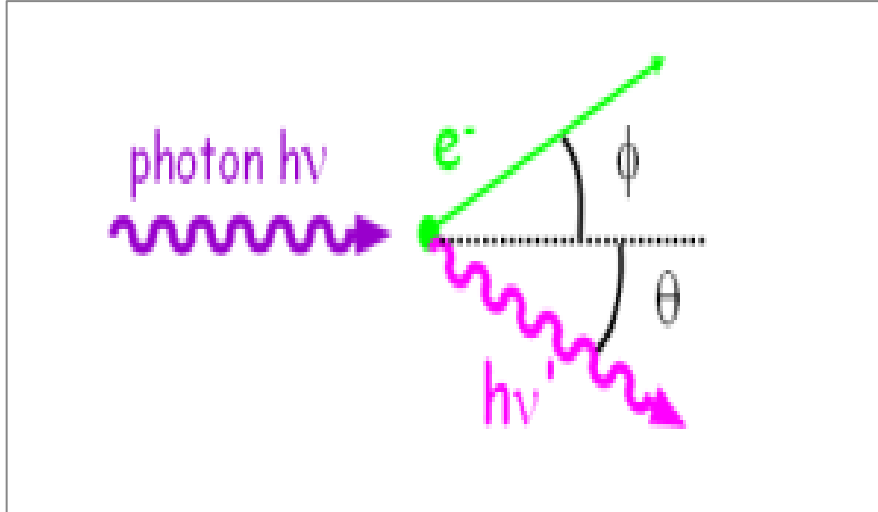


Figure I.7 : Effet Compton (Slimani, 2016).

I.5.2.3. Création de paire :

L'effet de la création de paires ou matérialisation est un processus qui se produit lorsqu'un photon incident interagit avec le champ du noyau, à condition que l'énergie de photon incident doit être supérieure à deux fois la masse de l'électron pour produisant un couple électron e^- et positron e^+ , comme montré dans la figure I.8. L'expiration de l'énergie excédent transporte l'électron et positron sous forme d'énergie cinétique écrit comme suit : (Bouakleche, 2017).

$$E_c = 2m_e c^2 + E_{e^-} + E_{e^+} \quad (I.9)$$

Avec $m_e c^2$: est l'énergie de repos de l'électron et positron qui égale 511 MeV.

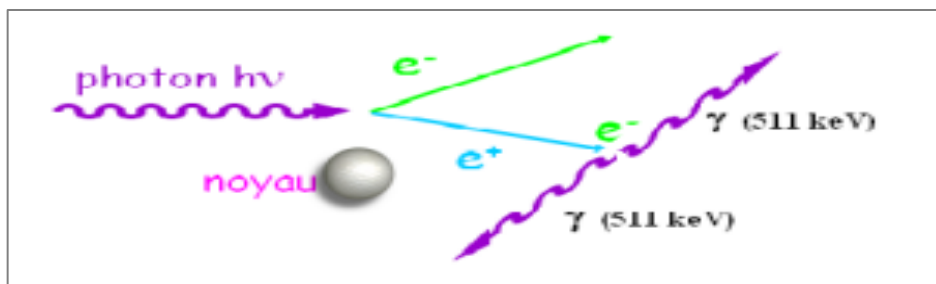


Figure I.8 Représentation schématique de l'effet création de paire (Slimani, 2016).

I.5.2.4. La Comparaison entre les trois effets :

La probabilité d'avoir un effet photoélectrique, un effet Compton ou une création de paires dépend de l'énergie du photon et du milieu rencontré.

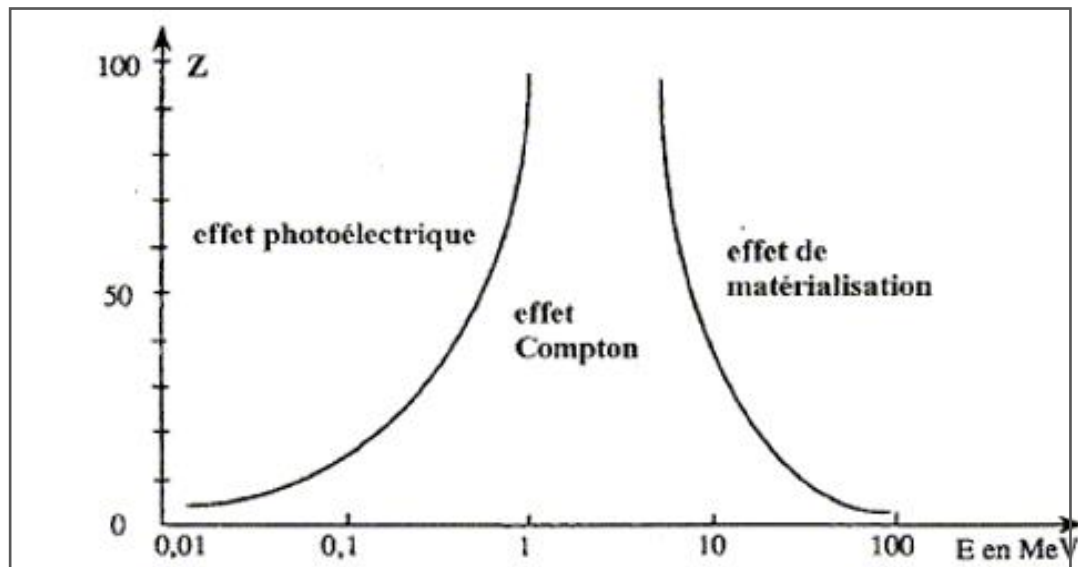


Figure I.9 : Comparaison et étude des 3 effets par modification du nombre atomique Z en fonction de l'énergie (Diana El Hajjar, 2014)

Une comparaison entre ces trois effets est présentée sur la figure I.9 pour une gamme d'énergie allant de la dizaine de keV à la centaine de MeV. L'effet photoélectrique est prédominant pour les basses énergies jusqu'à quelques centaines de keV, d'autant plus si le milieu présente un numéro atomique Z élevé. Ensuite l'effet Compton devient prédominant jusqu'à quelques MeV. Enfin, la création de paires a lieu quand l'énergie du photon est élevée (est bien sûr supérieure au seuil de 1022 keV) (Diana El Hajjar, 2014).

I.6. Fluorescence X

Un électron qui vient des couches extérieures de l'atome pour combler la vacance d'un électron éjecté va perdre son énergie sous forme d'émission d'un photon d'énergie égale à la différence entre l'énergie de la couche périphérique et la couche du cœur. L'énergie de ce photon appartient au domaine des rayons X et chaque atome va libérer des photons lors du processus de désexcitation ayant des énergies propres. Il s'agit alors « d'émission caractéristique » ou de phénomène de Fluorescence X (Benslimane, 2004).

Chapitre I : Rappel théorique sur les paramètres atomiques

Dans un analyseur FRX (Fluorescence des Rayons X), l'échantillon cible est bombardé par des rayons X incidents. à la suite de cette interaction, on trouve la production d'électrons, de rayons X et des raies caractéristiques de rayons X.

Comme la désexcitation a pour effet l'émission de photons X, certains de ces photons peuvent interagir avec des électrons situés dans des couches internes Y de l'atome, mais plus éloignées du noyau et peuvent provoquer l'extraction de ces électrons de la couche Y.

Ce mécanisme est appelé effet Auger, que nous aborderons en détails dans la section suivante. La vacance ainsi créée par l'électron arraché sera immédiatement remplie par des électrons venant de couches plus externes X (Lynch, 2001)

Chaque électron qui vient des couches externes de l'atome pour combler la vacance d'un électron émet un rayon X caractéristique (photon de fluorescence) dont l'énergie est égale à la différence d'énergie entre les deux couches électroniques d'élément (Bambyenk, *et al.*, 1972) :

$$\Delta E = E_x - E_y \quad (\text{I.10})$$

I.7. Rendement de la fluorescence

La probabilité pour qu'une lacune créée dans une couche soit comblée par une transition radiative est dite rendement de fluorescence ω de la couche considérée. Un atome excité à la capacité de retrouver son état de base en éjectant l'un de ses électrons d'une orbite moins liée. Cet effet de transition non radiative est connu sous le nom d'effet Auger, et les électrons qui en résultent sont appelés électrons-Auger. Une conséquence significative de l'effet Auger est que le nombre effectif de rayons X générés s'avère être inférieur aux attentes. En effet, pour la couche K, on note ce rendement de fluorescence ω_K (Kahoul, 2006) :

$$\omega_K = \frac{N_X}{N} = \frac{N_X}{N_X + N_{e^-}} \quad (\text{I.11})$$

Il est plus complexe de définir le rendement de fluorescence pour les autres couches telles que L, M, etc., car elles sont constituées de plusieurs sous-couches. En outre, des transitions de type Coster-Kronig peuvent se produire. Ces transitions sont de nature non radiative et se produisent entre différentes sous-couches d'une même couche électronique. Ainsi, l'évaluation du rendement de fluorescence s'avère très complexe. Puisque nous portons une attention particulière à la couche L, il est indispensable de déterminer son rendement de

Chapitre I : Rappel théorique sur les paramètres atomiques

fluorescence. La couche L se divise en trois sous-couches L_1 , L_2 et L_3 . Cette définition pose toutefois deux problèmes :

(i). On ne peut pas ioniser exclusivement une seule des sous-couches L_1 , L_2 et L_3 . L'ionisation des sous-couches varie avec les conditions expérimentales et les mesures conduisent à un rendement moyen de fluorescence $\bar{\omega}_L$, qui est considéré comme la combinaison linéaire de ω_1 , ω_2 , ω_3 et de la distribution ν_1 , ν_2 , ν_3 des lacunes résultant des transitions de C-K, avec :

ν_1, ν_2, ν_3 représentant le nombre de lacunes dans les niveaux L_1 , L_2 et L_3 , respectivement :

$$\bar{\omega}_L = \nu_1\omega_1 + \nu_2\omega_2 + \nu_3\omega_3 \quad (\text{I.12})$$

Avec :

$$\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 \geq 1 \quad (\text{I.13})$$

(ii). Dans la couche L , les transitions de Coster - Kronig peuvent avoir lieu et conduisent à un déplacement de lacunes (transition). Une lacune de la sous-couche L_1 , peut être comblée par un électron du sous-couche L_3 et la lacune L_3 à son tour par un électron d'une couche plus externe. La distribution initiale des lacunes entre les trois niveaux L_1 , L_2 et L_3 s'en trouve donc modifiée et il est nécessaire de tenir compte de cet effet (Figure I.7), $\bar{\omega}_L$ est donné par :

$$\bar{\omega}_L = \nu_1N_1 + \nu_2N_2 + \nu_3N_3 \quad (\text{I.14})$$

Avec : $N_1 + N_2 + N_3 = 1$

N_i : sont les distributions des lacunes initiales

Les relations entre les coefficients ν_i et N_i sont les suivantes :

$$\nu_1 = N_1 \quad (\text{I.15})$$

$$\nu_2 = f_{12}N_1 + N_2 \quad (\text{I.16})$$

$$\nu_3 = (f_{13} + f_{12}f_{23})N_1 + f_{23}N_2 + N_3 \quad (\text{I.17})$$

Où f_{12} , f_{23} , f_{13} sont les probabilités des transitions de Coster-Kronig ayant lieu entre $L_1 \rightarrow L_2$, $L_2 \rightarrow L_3$ et $L_1 \rightarrow L_3$ (Kahoul, 2006).

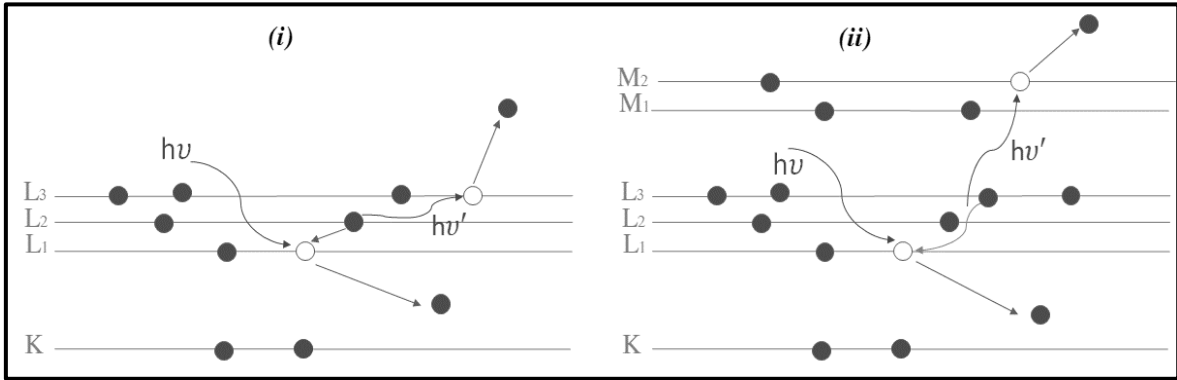


Figure I.10 : Les transitions non radiative (i) Transitions de C-K et (ii) l'effet Auger.

I.8. 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. L'interaction responsable de cet effet est celle entre les électrons. Cette force est d'autant plus prononcée que les deux électrons se trouvent dans des couches très proches, et que le nombre atomique de l'ion est élevé. Toutefois, pour une configuration initiale précise, l'effet sera d'autant plus négligeable que le n final s'éloignera du point de départ n .

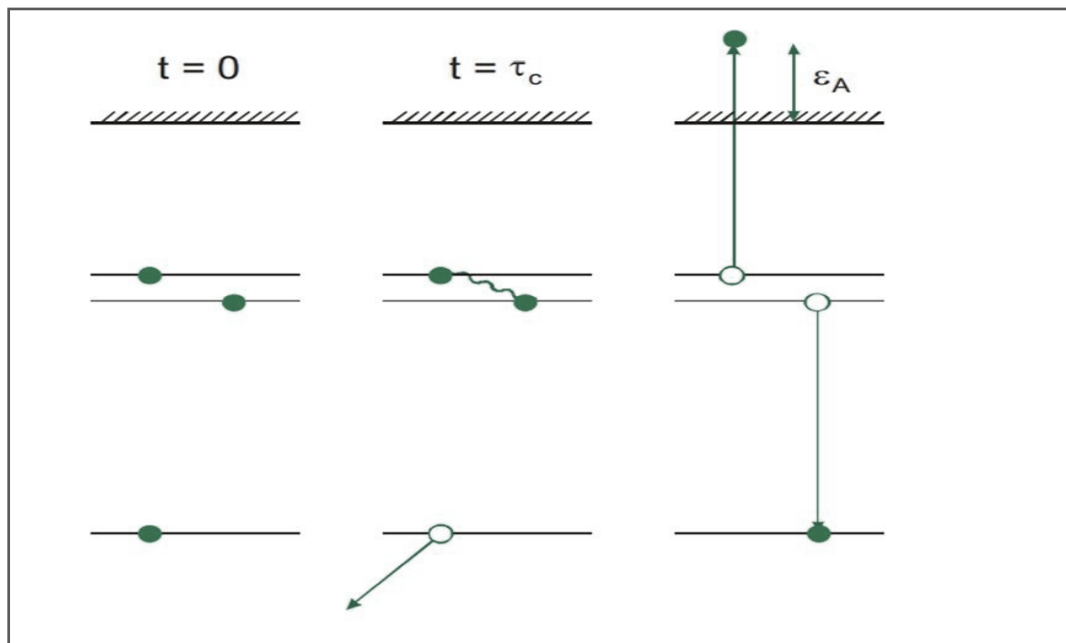


Figure I.11 : schéma de l'effet Auger (Kahoul, 2015).

I.9. Les transitions de Coster-Kronig

C'est un processus plus rapide que l'effet Auger et les transitions radiatives car il se produit entre deux niveaux $L, M, N...$, où les électrons se déplacent pour remplir la lacune existant dans le niveau le plus interne d'une couche, donc on peut retrouver les lacunes dans le niveau le plus externe d'une couche, (Derradj, 2019).

I.10. Section efficace

En physique nucléaire ou en physique des particules, la section efficace est une grandeur physique reliée à la probabilité d'interaction d'une particule pour une réaction donnée. L'unité de section efficace est le barn (b) : $1 b = 10^{-24} cm^2 = 10^{-28} m^2$. La section efficace est peu dépendante de la taille réelle de la particule en question et varie surtout en fonction de la nature exacte de la collision ou de la réaction, et des interactions existantes entre les particules concernées (Dechoucha, 2013).

I.10.1. Section efficace totale de production de rayon X :

La section efficace de production d'un rayonnement X est équivalente au produit de la section efficace d'ionisation de la couche concernée par le photon incident et du rendement de fluorescence, comme exprimé ci-dessous :

$$\sigma_X = \sigma_I \omega \quad (I.18)$$

Où σ_X la section efficace de production des rayons X, σ_I la section efficace d'ionisation et ω le rendement de fluorescence. (Bambynek et al. 1972)

I.10.2. Section efficace de de la couche L :

Pour la couche L les sections efficaces de production des raies L, et les sections efficaces d'ionisation sont liées avec les rendements de fluorescences de sous-couches (L_1, L_2, L_3), les probabilités de transitions de Coster-Kronig, les taux d'émission de rayons X. Les sections efficaces de production pour les principales raies de la couche L sont données avec les relations ci-après : (Hamouda, 2015).

$$\sigma_{L\alpha} = [(f_{12} + f_{12} f_{23}) \sigma_{L_1} + f_{23} \sigma_{L_2} + \sigma_{L_3}] \omega_3 F_{3\alpha} \quad (I.19)$$

$$\sigma_{L\beta} = [\omega_1 F_{1\beta} + f_{12} \omega_2 F_{2\beta} (f_{13} + f_{12} f_{23}) \omega_3 F_{3\alpha}] \sigma_{L_1} + (\omega_2 F_{2\beta} + f_{23} \omega_3 F_{3\beta}) \sigma_{L_2} + \omega_3 F_{3\alpha} \sigma_{L_3} \quad (I.20)$$

Chapitre I : Rappel théorique sur les paramètres atomiques

$$\sigma_{L\gamma} = (\omega_1 F_{1\gamma} + f_{12}\omega_2 F_{2\gamma})\sigma_{L1} + \omega_2 F_{2\gamma}\sigma_{L2} \quad (I.21)$$

$\sigma_{L1,2,3}$: La section efficace d'ionisation.

ω_i : Les rendements de fluorescences de la sous-couche Li .

F ($i=1,2 ; j=2,3$) : sont les probabilités de transitions de Coster-Kronig.

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

Dont ou : $F_{iy} = \frac{\Gamma_{iy}}{\Gamma_i}$

Γ_i : est la probabilité d'une transition électronique vers le niveau Li .

Γ_{iy} : est la probabilité de l'émission de raies principales L_γ (L_α, L_β et L_γ) (Hamouda, 2015).

I.10.3. Section efficace de de la couche M :

Les sections efficaces de production et les sections efficaces d'ionisation des sous-couches M_i ($i=1,\dots,5$) sont reliées entre elles par des relations simples, basées sur les rendements de fluorescence et les probabilités de transition de Coster-Kronig ((Chen and B. Crasemann, 1984), (McGuire, 1972) et (Bambyenk *et al.*, 1972)) :

$$\begin{aligned} \sigma_{M_1}^x &= \sigma_{M_1}^I \omega_1 \\ \sigma_{M_2}^x &= [\sigma_{M_2}^I + S_{12}\sigma_{M_1}^I] \omega_2 \\ \sigma_{M_3}^x &= [\sigma_{M_3}^I + S_{23}\sigma_{M_2}^I + (S_{13} + S_{12}S_{23}) \sigma_{M_1}^I] \omega_3 \\ \sigma_{M_4}^x &= [\sigma_{M_4}^I + S_{34}\sigma_{M_3}^I + (S_{24} + S_{23}S_{34})\sigma_{M_2}^I + (S_{14} + S_{12}S_{24} + S_{13}S_{34} + S_{12}S_{23}S_{34})\sigma_{M_1}^I] \omega_4 \\ \sigma_{M_5}^x &= [\sigma_{M_5}^I + f_{45}\sigma_{M_4}^I + (S_{35} + S_{45}f_{45})\sigma_{M_3}^I + (S_{25} + S_{23}S_{35} + S_{24}f_{45} + S_{23}S_{34}f_{45})\sigma_{M_2}^I + (S_{15} + \\ & S_{12}S_{25} + S_{13}S_{35} + S_{14}f_{45} + S_{12}S_{23}S_{35} + S_{12}S_{24}f_{45} + S_{13}S_{34}f_{45} + S_{12}S_{23}S_{34}f_{45}) \sigma_{M_1}^I] \omega_5 \end{aligned} \quad (I.22)$$

Alors, la section efficace totale de production de rayons X peut s'écrire :

$$\sigma_M^x = \sum_{i=1}^5 \sigma_{M_i}^x \quad (I.23)$$

Cette dernière peut être exprimée en fonction de rendements effectifs de fluorescence v_i comme suit (Bambynek et al., 1972) :

$$\sigma_M^x = \sum_{i=1}^5 v_i \sigma_{M_i}^I \quad (I.24)$$

Chapitre I : Rappel théorique sur les paramètres atomiques

Où :

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

La relation suivante établit un lien entre la section efficace totale de production de la couche M et la section efficace totale d'ionisation :

$$\sigma_M^x = \bar{\omega}_M \sigma_M^I \tag{I.26}$$

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

$$\bar{\omega}_M = \sum_{i=1}^5 v_i \omega_i \tag{I.27}$$

Et $\omega_i = \sigma_M^I / \sigma_{M_i}^I$ est le poids de la distribution initiale des lacunes dans la sous couche M_i .

Les différentes sections efficaces d'ionisation des sous-couches M_i ($i = 1, \dots, 5$) sont converties en sections efficaces de production de certaines raies M bien visibles sur les spectres de rayons X ((Pajek, et al, 1990), (Sarkar, et al, 1981), (Barich, et al, 1996) et (Ertugrul, et al, 1996)), comme $M_{\alpha,\beta}(M_{4,5}N_{6,7})$; $M_{\xi_{1,2}}(M_{4,5}N_{2,3})$; $M_{\square}(M_3N_{4,5})M_3N_1$; $M_3O_{4,5} + M_2N_4$; $M_2O_{1,4}$ et $M_1O_{2,3}$. En effet, les sections efficaces de production de rayons X de certaines raies sont reliées aux sections efficaces d'ionisation pour les différentes sous-couches $\sigma_{M_i}^I$ ($i = 1, 2, 3, 4, 5$) de la couche M de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
 \sigma_{M_1O_{2,3}}^x &= \sigma_{M_1}^x (\Gamma_{M_1O_2} + \Gamma_{M_1O_3}) / \Gamma_{M_1} \\
 \sigma_{M_2O_{1,4}}^x &= \sigma_{M_2}^x \Gamma_{M_2O_4} / \Gamma_{M_2} \\
 \sigma_{\square}^x &= \sigma_{M_3}^x (\Gamma_{M_3N_4} + \Gamma_{M_3N_5}) \Gamma_{M_3} \\
 \sigma_{\beta}^x &= \sigma_{M_4}^x \Gamma_{M_4N_6} / \Gamma_{M_4} \\
 \sigma_{\alpha}^x &= \sigma_{M_5}^x (\Gamma_{M_5N_6} + \Gamma_{M_5N_7}) \Gamma_{M_5} \\
 \sigma_{\xi_{1,2}}^x &= \frac{\sigma_{M_5}^x \Gamma_{M_5N_3}}{\Gamma_{M_5}} + \frac{\sigma_{M_4}^x \Gamma_{M_4N_2}}{\Gamma_{M_4}} \\
 \sigma_{M_3O_{4,5}}^x &= \sigma_{M_3}^x (\Gamma_{M_3O_4} + \Gamma_{M_3O_5}) / \Gamma_{M_3}
 \end{aligned}$$

Chapitre I : Rappel théorique sur les paramètres atomiques

$$\begin{aligned}\sigma^x_{M_2N_4} &= \sigma^x_{M_2} \Gamma_{M_2N_4} / \Gamma_{M_2} \\ \sigma^x_{M_3N_1} &= \sigma^x_{M_3} \Gamma_{M_3N_1} / \Gamma_{M_3}\end{aligned}\tag{I.28}$$

où Γ_{M_i} ($i = 1,2,3,4,5$) est le taux total de transition radiative est noté pour la sous-couche Mi et $\Gamma_{M_i y}$ représente le taux partiel de transition radiative qui comble une lacune dans la sous-couche Mi à partir d'une sous-couche supérieure y ($y = N_i, O_i$) ((Bhalla, 1970), (Bambyenk *et al.*, 1972))

I.11. Conclusion

Ce chapitre a permis d'établir les fondements théoriques indispensables à la compréhension des interactions entre la matière et les rayonnements, en s'appuyant sur la structure atomique. En explorant les caractéristiques des atomes, les règles de transition électronique, ainsi que les différents types de rayonnements et leurs interactions avec la matière, nous avons mis en évidence les phénomènes physiques fondamentaux tels que l'effet photoélectrique, l'effet Compton, la création de paires, la fluorescence X et l'effet Auger. Ces notions, associées aux concepts de rendement de fluorescence et de section efficace, constituent des outils essentiels pour l'analyse des interactions rayonnement-matière. Elles serviront de base pour les chapitres suivants, orientés vers l'exploitation de ces phénomènes dans les techniques analytiques et les applications expérimentales.

Chapitre I : Rappel théorique sur les paramètres atomiques

Références

Bambynek W., Carsemann B., Fink W., Freund H.U, Mark H., Swift C.D., Price R.E., Rao P. V. Rev. Mod, Phys 44, (1972) 716.

Beladel ,B.,Thèse de Doctorat, Ouargla, (2015).

Belgium W. K. Rayonnements Ionisants, Hans Suijkerbuijk Edition, (2014).

Bendjedi, A., Etude des paramètres d'interaction des rayonnements ionisants avec la matière en vue des applications analytiques. Thèse de Doctorat de l'université Mohamed Boudiaf M'silla, (2018)

Benslimane, M.,Thèse de Magister de l'université Constantine, (2004)

Bhalla, J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. 3, 916 (1970).

Bouakleche A., L'étude de l'effet Compton dans le cadre de l'électrodynamique quantique. Mémoire de master, université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem, (25/05/2017).

Bouchoucha Samiya, Sections efficaces semi-empiriques de production des couches M des éléments de numéros atomique $60 \leq Z \leq 90$ par des protons en vue des applications analytiques, université de M'sila, (25/06/2013).

Boufas, S., Synthèse et étude structurale de composés à base d'étain 2 et d'étain 4, Mémoire de magister, Université Mentouri de Constantine, (2004)

Bouhebel, S., Contribution au calcul des probabilités de transfert lacunaire de la couche (K) des éléments atomiques, Mémoire de Master, Université Mohamed El Bachir El ibrhimi, Bordj Bou Arreridj, (2023)

Braich, P. Verma, and H. Verma, J. Phys. B 30, 2359 (1997).

Chen and B. Crasemann, Phys. Rev. A 30, 170(1984).

Dechoucha, S., Sections efficaces semi-empiriques de production des couches M des éléments de numéros atomiques $60 \leq Z \leq 90$ par des protons en vue des applications analytiques, thème de master, Université Mohamed Boudiaf, M'sila, (2013)

Derradj I., Calcul des paramètres de la fluorescence X des couches atomiques internes pour des éléments de numéros atomiques $6 \leq Z \leq 99$.Thèse de Doctorat de l'université Mohamed Boudiaf M'sila, (16 /01/2019).

Chapitre I : Rappel théorique sur les paramètres atomiques

Diana El Hajjar R., Développement de la méthode PIXE à haute énergie auprès du cyclotron ARRONAX, Thèse de doctorat l'université Nantes Angers Le Mans, France (24/6/2014).

Djeddaoui H., Modélisation et simulation de l'interaction d'un faisceau d'électrons avec les bases d'ADN. Mémoire de master, Université Mohamed Boudiaf de M'sila (2020-2021)

Ertugrul, E. Tirasoglu, Y. Kurucu, S. Erzeneoglu, R. Durak, Y. Sahin, Nucl. Instr. and Meth. B 108, 18(1996).

Hamouda L., Nouvelle base de données des rendements des fluorescences de la sous-couche L_3 , Mémoire de master, Université Mohamed El Bachir Elibrahim-Bordj Bou Arreridj, (14/06/2015).

Kahoul A. Sections efficaces de production des raies L des éléments lourds en vue des applications analytiques. Thèse De Doctorat, Université Ferhat Abbas - Setif, (2006)

Kahoul R., Construction d'une nouvelle base de données des rendements de fluorescence de la sous-couche L_1 . Mémoire de master, Université Mohamed El Bachir Elibrahimi -Bordj Bou Arreridj, (14/06/2015).

Lynch, J., Analyse Physico-Chimique des Catalyseurs Industriels, Editions TECHNIP, Paris, (2001)

Meddough k., Mémoire de master, université Mohamed El Bachir Elibrahimi -de Bordj Bou-Arreridj (2018)

Merabtine W., Calcul semi-empirique du Rapport d'intensité d'émission de rayons $X^{(K^B/K^A)}$ par des photons. Mémoire de master, Université Mohamed El Bachir Elibrahimi -Bordj Bou Arreridj, (24/09/2020).

Pajek, A. Kobzev, R. Sandrik, A. Skrypnik, R. Ilkhamov, S. Khusmurodov, and G. Lapicki, Phys. Rev. A 42, 5298 ; 6582 (1990).

Rey, M., Étude du tomographe de haute résolution pour petits animaux Clear PET par la méthode de Monte Carlo, Thèse de doctorat, EPFL. (2007)

Sarkar, H. Mommsen, W. Sarter, and P. Schürkes, J. Phys. B, At. Mol. Opt. Phys. 14, 3163 (1981)

Slimani A. interaction des rayonnements avec la matière, mémoire de fin d'étude en vue de l'obtention du diplôme de master (2016).

Chapitre II

**Calcul empirique des sections efficaces
de la fluorescence X des raies L et M de
L'Or ($_{79}\text{Au}$)**

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or ($_{79}\text{Au}$)

II.1. Introduction

La spectroscopie de fluorescence X (XRF) est une méthode d'analyse robuste qui permet de déterminer et de mesurer les éléments contenus dans un échantillon. Elle se fonde sur l'émission de rayons X spécifiques par les atomes excités, suite à l'absorption d'un rayonnement incident. Pour des éléments lourds comme l'Or (Au), les transitions électroniques associées aux niveaux L et M génèrent les raies de fluorescence X les plus importantes. Ces niveaux ont des énergies inférieures à celles de la série K, qui est inaccessible pour l'Or dans le cadre de la fluorescence X standard.

Le calcul des sections efficaces de fluorescence X, qui sont définies comme la probabilité qu'un photon incident engendre une émission de fluorescence spécifique, est un élément essentiel pour l'analyse quantitative des spectres. Ces sections dépendent non seulement des caractéristiques atomiques de l'Or, mais aussi des conditions d'irradiation (énergie du rayonnement incident, angle d'incidence, etc.), ainsi que des propriétés des transitions électroniques entre les niveaux internes.

Ce chapitre se focalise sur le calcul empirique des sections efficaces de fluorescence X concernant les raies $L_I L\alpha, L\beta, L\gamma, L_{tot}$ ainsi que les transitions de la série M des raies $M_{\xi}, M_{\alpha\beta}, M_m, M_{\gamma}, M_{tot}$ de l'Or.

II.2. L'élément de l'Or

L'Or, de symbole chimique Au et de numéro atomique 79, est un métal noble appartenant au groupe 11 du tableau périodique. Connue depuis les premières civilisations humaines, il a longtemps été valorisé pour son éclat et sa rareté. Cependant, en plus de sa valeur économique et culturelle, l'Or possède un ensemble de propriétés physiques remarquables qui trouvent leur origine dans sa structure atomique et ses interactions électroniques.

À l'échelle atomique, l'Or possède une configuration électronique $[\text{Xe}] 4f^{14} 5d^{10} 6s^1$, avec un unique électron dans sa couche externe 6s. Cette configuration électronique distincte et soumise à des effets relativistes significatifs, qui ont une influence marquée sur ses propriétés physiques, y compris sa couleur unique. Sa configuration cristalline cubique à faces centrées lui donne une excellente ductilité, malléabilité, et densité atomique, facilitant la transition des couches atomiques sans déformation. L'association de ces propriétés à une

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

forte mobilité électronique permet d'expliquer sa conductivité thermique et électrique exceptionnelle, ainsi que sa remarquable résistance à la corrosion.

II.2. Base de données des sections efficaces

Notre base de données pour les sections efficaces des raies L et M se fonde sur différentes publications : (Bansal et al., 2016) , (Garg et al.,1985), (Kaya et Ertugrul, 2003), (Mann et al.,1994), (Al-Saleh et Saleh, 1999), (Rao et al., 1996), (Mandal et al., 2001), (Mann et al., 1990), (Kacal et al., 2011), (Sharma et al., 1996), (Rao et al., 1993a), (Ertugrul, 1996a), (Dogan et al., 1997), (Seven et Kocak, 2002), (Kucukonder et al., 2004), (Cengiz et al., 2010 a), (Karabulut et Gurol, 2006), (Demir et Sahin, 2012), (Kaya et al., 2001), (Sharma et al., 2005), (Han et al., 2007), (Demir et al., 2008), (Han et Demir, 2011a), (Demir et al., 2003), (Shatendra et al., 1985b), (Apaydin et al.,2008), (Bastug et al., 2002), (Rani et al., 1989), (Puri et al., 1996), (Ertugrul, 2002), (Gurol et al., 2003), (Allawadhi et al., 1995), (Apaydin et al., 2005), (Bansal et al., 2018), (Chauhan et al., 2009), (De Boer et al.,1990), (Durak et Özdemir, 2001), (Ertuğrul et al., 2004), (Ertuğrul et al., 1996), (Garg et al.,1991), (Gupta et al., 2014), (Jopson et al.,1965), (Kaur et al., 2014), (Kaya et al., 2008), (Khalfallah et al., 2015), (Konstantinov et Sazonova,1969), (Krause, 1979), (Küçükönder et al., 2008), (Kumar et al., 2008), (Kup Aylikci et al., 2019), (Mann et al., 1990), (McGuire,1972), (Meddough et al., 2023), (Öz et al., 1990), (Özdemir, 2007), (Puri, 2007), (Puri et al., 2000), (Rao et al., 1995), (Rao et al., 1996), (Rao et al., 1997), (Şahin et al., 2004), (Sampaio et al., 2015), (Sharma et al., 2006), (Shatendra et al.,1984), (Shatendra et al.,1985), (Söğüt et al., 2002), (Hubbell et al., 1994), (Chen et al., 1980), (Chen et al.,1989), (Kahoul et al., 2013).

Nous avons présenté dans les tableaux ci-dessous, les valeurs expérimentales des sections efficaces des raies L et M à différentes énergies :

Tableau II.1 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie L_I

Elément (Z)	Références	Energie (keV)	$(\sigma_{L_I})_{Exp-i} \pm \Delta(\sigma_{L_I})_{Exp-i}$ (barn/atom)
Au (79)	(Bansal et al., 2016)	15	357±25
	(Garg et al., 1985)	15.200	312.99±21.281
	(Kaya and Ertugrul, 2003)	15.73	294.50±17.65
	(Mann et al., 1994)	16.035	268±80
	(Al-Saleh and Salah, 1999)	16.04	243±20
	(Rao et al., 1996 c)	16.58	288±20
	(Al-Saleh and Salah, 1999)	16.90	214±17

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (⁷⁹Au)

(Mann et al., 1994)	17.781	199±13
(Garg et al., 1985)	17.800	215.76±16.37
(Stov and Dlouhy, 1996)	17.805	183.35±0.229
(Al-Saleh and Salah, 1999)	17.78	187±15
(Rao et al., 1995 b)	21.56	144.28±0.74
(Mandal et al., 2001)	21.6	143±17
(Mann et al., 1994)	22.581	107±9
(Garg et al., 1985)	22.600	105.75±7.2
(Mann et al., 1990)	22.600	107±9
(Kacal et al., 2011)	22.60	99.94±8.38 (NIST)
(Kacal et al., 2011)	22.60	102.2±8.57 (WinXCOM)
(Sharma et al., 1996)	23.618	104±8
(Sharma et al., 1996)	23.618	94±7
(Sharma et al., 1996)	23.618	94±7
(Rao et al., 1993 a)	23.620	108±8.0
(Mandal et al., 2001)	23.7	82±10
(Rao et al., 1993 a)	24.680	98±7.8
(Sharma et al., 1996)	24.681	84±7
(Sharma et al., 1996)	24.681	84±7
(Sharma et al., 1996)	24.681	88±7
(Mann et al., 1994)	25.770	83±5.5
(Rao et al., 1994)	25.780	87±6
(Garg et al., 1985)	25.800	79.89
(Mandal et al., 2001)	25.8	70±8
(Rao et al., 1994)	26.880	72±6
(Ertugrul et al., 2002)	31.635	40±3
(Rao et al., 1995 b)	31.64	502.22±005
(Rao et al., 1994)	32.890	44±3
(Mann et al., 1994)	32.890	39.5±2.5
(Rao et al., 1995 b)	34.17	41.08±004
(Rao et al., 1995 c)	35.56	38.62±2.8
(Rao et al., 1993 b)	36.620	34±2.8
(Mann et al., 1994)	38.184	26±2
(Rao et al., 1995 c)	39.90	25.66±1.4
(Rao et al., 1993 b)	43.690	23±1.8
(Mann et al., 1994)	43.949	17±1.3
(Rao et al., 1993 b)	48.300	15±1.2
(Rao et al., 1993 b)	50.200	15±1.0
(Rao et al., 1993 b)	53.500	12±0.8
(Ertugrul, 1996 a)	59.50	7.1±0.3
(Dogan et al., 1997)	59.50	7.707±2
(Sevsn and kocak, 2002)	59.5	7.8±0.05
(Kucukonder et al., 2004)	59.50	7.75±0.31
(Cengiz et al., 2010 a)	59.50	7.46±0.3274
(Karabulut and Gurol, 2006)	59.537	7.34±0.66
	59.537	7.4±0.5 (B = 0 T)
(Demir and Sahin, 2012)	59.537	16.5±1.0 (B = + 0.75 T)
(Demir and Sahin, 2012)	59.537	16.2±1.0 (B = _ 0.75 T)
(Demir and Sahin, 2012)	59.54	7.89±0.63
(Kaya et al., 2001)	59.54	6.67±0.42
(Sharma et al., 2005)	59.54	7.23±0.52

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

(Han et al., 2007)	59.54	8.36±0.836
(Demir et al., 2008)	59.54	8.97±1.62
(Han and Demir, 2011 a)	59.60	7.82±1.32
(Demir et al., 2003)	60.000	7.7±0.6
(Shatendra et al., 1985 b)	123.6	4.97±0.20
(Apaydin et al., 2008)		

Tableau II.2 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie L_{α}

Elément (Z)	Références	Energie (keV)	$(\sigma_{L_{\alpha}})_{Exp-i}$ $\pm \Delta(\sigma_{L_{\alpha}})_{Exp-i}$ (barn/atom)
Au (79)	(Bansal et al., 2016)	15	7530±527
	(Garg et al., 1985)	15.20	5837.5±399.43
	(Kaya and Ertugrul, 2003)	15.73	5914.0±354.86
	(Mann et al., 1994)	16.035	5228±272
	(Al-Saleh and Saleh, 1999)	16.04	4894±341
	(Rao et al., 1996 c)	16.58	5433±350
	(Bastug et al., 2002)	16.896	4601±317
	(Al-Saleh and Saleh, 1999)	16.90	4321±302
	(Rao et al., 1994)	17.780	4208±264
	(Al-Saleh and Saleh, 1999)	17.780	3557±249
	(Mann et al., 1994)	17.781	4016±200
	(Garg et al., 1985)	17.80	3938.6±268.47
	(Stov and Dlouhy, 1996)	17.805	3892.79±4.68
	(Rao et al., 1995 b)	21.56	2773.55±232
	(Mandal et al., 2001)	21.6	2488±174
	(Mann et al., 1994)	22.581	2151±125
	(Bastug et al., 2002)	22.581	2254±156
	(Garg et al., 1985)	22.60	2118.28±144.06
	(Rani et al., 1989)	22.6	1845±29
	(Mann et al., 1990)	22.60	2151±125
	(Puri et al., 1996)	22.60	2171±130
	(Kacal et al., 2011)	22.60	1947±140 (NIST)
	(Kacal et al., 2011)	22.60	1995±144 (WinXCOM)
	(Sharma et al., 1996)	23.618	1958±157
	(Sharma et al., 1996)	23.618	1938±155
	(Sharma et al., 1996)	23.618	1906±152
	(Rao et al., 1993 a)	23.62	2240±186
	(Mandal et al., 2001)	23.7	1750±122
	(Rao et al., 1993 a)	24.68	1962±166
	(Sharma et al., 1996)	24.681	1564±125
	(Sharma et al., 1996)	24.681	1578±126
	(Sharma et al., 1996)	24.681	1685±135
	(Mann et al., 1994)	25.77	1568±90
	(Bastug et al., 2002)	25.770	1353±96
	(Rao et al., 1994)	25.78	1476±148
	(Garg et al., 1985)	25.80	1483.12±101.494
	(Mandal et al., 2001)	25.8	1433±100
	(Rao et al., 1994)	26.88	1322±128

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

(Ertugrul et al., 2002)	31.635	875±35
(Rao et al., 1995 b)	31.64	965.52±098
(Rao et al., 1994)	32.89	804±78
(Mann et al., 1994)	32.89	781±45
(Bastug et al., 2002)	32.89	754±53
(Rao et al., 1995 b)	34.17	813.22±082
(Rao et al., 1995 c)	35.56	721.46±42
(Rao et al., 1993 b)	36.62	656±54
(Mann et al., 1994)	38.184	525±34
(Bastug et al., 2002)	38.134	509±38
(Rao et al., 1995 c)	39.90	462.54±42
(Garg et al., 1985)	41.00	402.70±26.192
(Rao et al., 1993 b)	43.69	436±36
(Mann et al., 1994)	43.949	361±21
(Bastug et al., 2002)	43.949	348±28
(Garg et al., 1985)	46.90	267.81±18.33
(Rao et al., 1993 b)	48.30	304±22
(Rao et al., 1993 b)	50.20	289±18
(Bastug et al., 2002)	50.214	248±20
(Rao et al., 1993 b)	53.50	225±16
(Ertugrul, 1996 a)	59.50	138.9±4.3
(Dogan et al., 1997)	59.50	143.98±12
(Ertugrul, 2002 b)	59.50	144±12
(Seven and Kocak, 2002)	59.5	143±9
(Bastug et al., 2002)	59.50	142±11
(Gurol et al., 2003 a)	59.50	154.18±12.33
(Gurol et al., 2003 a)	59.50	140.29±11.22
(Gurol et al., 2003 a)	59.50	154.73±10.83
(Gurol et al., 2003 a)	59.50	144.03±10.08
(Kucukonder et al., 2004)	59.50	169.49±8.20
(Cengiz et al., 2010 a)	59.50	140.26±9.82
(Karabulut and Gurol, 2006)	59.537	153±14
	59.537	144.7±7.0 (B = 0 T)
(Demir et al., 2012)	59.537	235.2±7.2 (B = + 0.75 T)
(Demir et al., 2012)	59.537	233.4±7.2 (B = _0.75 T)
(Demir et al., 2012)	59.54	140.782±9.49
(Garg et al., 1985)	59.54	158.86±12.70
(Kaya et al., 2001)	59.54	142±8
(Sharma et al., 2005)	59.54	144.56±12.55
(Han et al., 2007)	59.54	159±15.9
(Demir et al., 2008)	59.54	136±10.3
(Han and Demir, 2011 a)	59.60	159.56±27.03
(Demir et al., 2003)	60.00	146±9
(Shatendra., 1985 b)	123.6	109.2±10
(Dogan et al., 1997)	123.6	113.25±4.53
(Apaydin et al., 2008)		

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or ($_{79}\text{Au}$)

II.3 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie L_{β}

Elément (Z)	références	Energie (keV)	$(\sigma_{L_{\beta}})_{Exp-i}$ $\pm \Delta(\sigma_{L_{\beta}})_{Exp-i}$ (barn/atom)
Au (79)	(Garg et al., 1985)	15.20	5546±379.78
	(Kaya and Ertugrul, 2003)	15.73	5292.98±317.57
	(Mann et al., 1994)	16.035	4885±265
	(Al-Saleh and Saleh, 1999)	16.04	4616±323
	(Rao et al., 1996 c)	16.58	5363±350
	(Bastug et al., 2002)	16.896	4138±281
	(Al-Saleh and Saleh, 1999)	16.90	4114±288
	(Rao et al., 1994)	17.780	3986±258
	(Al-Saleh and Saleh, 1999)	17.78	3497±245
	(Mann et al., 1994)	17.781	3873±185
	(Garg et al., 1985)	17.80	3846.95±261.92
	(Stov and Dlouhy, 1996)	17.805	4374.064±5.24
	(Rao et al., 1995 b)	21.56	2654.08±208
	(Mandal et al., 2001)	21.6	2213±155
	(Mann et al., 1994)	22.581	2033±121
	(Garg et al., 1985)	22.581	2203±152
	(Bastug et al., 2002)	22.60	2118.28±144.056
	(Mann et al., 1990)	22.60	2033±121
	(Kacal et al., 2011)	22.60	1908±151 (NIST)
	(Kacal et al., 2011)	22.60	1908±151 (WinXCOM)
	(Sharma et al., 1996)	23.618	1838±147
	(Sharma et al., 1996)	23.618	1933±155
	(Sharma et al., 1996)	23.618	1776±141
	(Rao et al., 1993 a)	23.62	2342±192
	(Mandal et al., 2001)	23.7	1607±120
	(Rao et al., 1993 a)	24.68	2078±174
	(Sharma et al., 1996)	24.681	1594±127
	(Sharma et al., 1996)	24.681	1514±121
	(Sharma et al., 1996)	24.681	1717±137
	(Mann et al., 1994)	25.77	1479±85
	(Bastug et al., 2002)	25.77	1350±93
	(Rao et al., 1994)	25.78	1438±142
	(Garg et al., 1985)	25.80	1506.04±101.50
	(Mandal et al., 2001)	25.8	1345±102
	(Rao et al., 1994)	26.88	1298±124
	(Ertugrul et al., 2002)	31.635	803±48
	(Rao et al., 1995 b)	31.64	983.04±092
	(Rao et al., 1994)	32.89	852±76
	(Bastog et al., 2002)	32.89	762±53
	(Mann et al., 1994)	32.89	769±41
(Rao et al., 1995 b)	34.17	842.18±078	
(Rao et al., 1995 c)	35.56	652.12±38	

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

(Rao et al., 1993)	36.69	734±58
(Rao et al., 1995 c)	38.184	527±34
(Bastug et al., 2002)	38.184	537±39
(Mann et al., 1994)	39.90	472.16±38
(Garg et al., 1985)	41.00	425.62±29.43
(Rao et al., 1993 b)	43.69	486±38
(Mann et al., 1994)	43.949	366±21
(Bastug et al., 2002)	43.949	347±28
(Garg et al., 1985)	46.90	277.96±18.99
(Rao et al., 1993 b)	48.30	452±24
(Rao et al., 1993 b)	50.20	337±26
(Bastug et al., 2002)	50.214	256±20
(Rao et al., 1993 b)	53.50	268±18
(Ertugrul, 1996 a)	59.50	150.4±3.4
(Dogan et al., 1997)	59.50	140.48±12
(Seven and Kocak, 2002)	59.5	149±9
(Bastug et al., 2002)	59.50	153±12
(Kucukonder et al., 2004)	59.50	188.23±11.2
(Cengiz et al., 2010 a)	59.50	168.87±39.29
(Karabulut and Gurol, 2006)	59.537	152±14
(Demir and Sahin, 2012)	59.537	149.5±5.0 (B = 0 T)
(Demir and Sahin, 2012)	59.537	149.8±9.0 (B = + 0.75 T)
(Demir and Sahin, 2012)	59.537	149.2±9.0 (B = - 0.75 T)
(Demir and Sahin, 2012)	59.54	151.26±10.48
(Garg et al., 1985)	59.54	162.67±8.13
(Kaya et al., 2001)	59.54	157.00±14.14
(Han et al., 2007)	59.54	162±16.2
(Demir et al., 2008)	59.54	161±11.1
(Han and Demir, 2011 a)	59.54	153.44±10.721
(Sharma et al., 2005)	59.60	115.78±19.7
(Demir et al., 2003)	60.00	154±7
(Shatendra et al., 1985 b)	123.6	113.2±11
(Dogan et al., 1997)		

Tableau II.4 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie L_{γ}

Elément (Z)	références	Energie (keV)	$(\sigma_{L_{\gamma}})_{Exp-i}$ $\pm \Delta(\sigma_{L_{\gamma}})_{Exp-i}$ (barn/atom)
Au (79)	(Kaya and Ertugrul, 2003)	15.73	904.78±18.09
	(Mann et al., 1994)	16.035	838±60
	(Al-Saleh and Saleh, 1999)	16.04	777±59
	(Rao et al., 1996 c)	16.58	968±90
	(Al-Saleh and Saleh, 1999)	16.90	741±56
	(Rao et al., 1994)	17.78	734±68
	(Al-Saleh and Saleh, 1999)	17.78	707±54
	(Mann et al., 1994)	17.781	669±45
	(Garg et al., 1985)	17.80	635.156±42.56
	(Stov and Dlouhy, 1996)	17.805	749.75±0.92

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

(Rao et al., 1995 b)	21.56	469.62±044
(Mandal et al., 2001)	21.6	398±35
(Mann et al., 1994)	22.581	386±31
(Garg et al., 1985)	22.60	389.61
(Mann et al., 1990)	22.60	386±31
(Puri et al., 1996)	22.60	422±25
(Kacal et al., 2011)	22.60	342.0±27.6 (NIST)
(Kacal et al., 2011)	22.60	344.8±27.8 (WinXCOM)
(Sharma et al., 1996)	23.618	374±30
(Sharma et al., 1996)	23.618	371±30
(Sharma et al., 1996)	23.618	356±29
(Mandal et al., 2001)	23.7	316±30
(Sharma et al., 1996)	24.681	304±24
(Sharma et al., 1996)	24.681	273±22
(Sharma et al., 1996)	24.681	299±24
(Mann et al., 1994)	25.77	281±15
(Rao et al., 1994)	25.78	281±26
(Garg et al., 1985)	25.80	266.83±18.66
(Mandal et al., 2001)	25.8	266±25
(Rao et al., 1994)	26.88	256±22
(Ertugrul et al., 2002)	31.635	153±8
(Rao et al., 1995 b)	31.64	192.06±018
(Rao et al., 1994)	32.89	164±14
(Mann et al., 1994)	32.89	141±11
(Rao et al., 1995 b)	34.17	166.22±016
(Rao et al., 1995 c)	35.56	132.64±6.4
(Rao et al., 1995 c)	39.90	94.22±6.0
(Rao et al., 1993 b)	36.62	128±10
(Mann et al., 1994)	38.184	99±7
(Garg et al., 1985)	41.00	76.94±5.24
(Rao et al., 1993 b)	43.69	94±06
(Mann et al., 1994)	43.949	74±5.5
(Garg et al., 1985)	46.90	49.76±3.6
(Rao et al., 1993 b)	48.30	71±4.2
(Rao et al., 1993 b)	50.20	59±3.0
(Rao et al., 1993 b)	53.50	48±2.4
(Ertugrul, 996 a)	59.50	27.1±1.8
(Dogan et al., 1997)	59.50	26.994±5
(Seven and Kocak, 2002)	59.5	27±0.16
(Kucukonder et al., 2004)	59.50	29.09±1.5
(Cengiz et al., 2010 a)	59.50	30.68±3.60
(Gurol et al., 2003 a)	59.50	35.54±3.14
(Gurol et al., 2003 a)	59.50	26.29±2.61
(Gurol et al., 2003 a)	59.50	26.14±2.87
(Gurol et al., 2003 a)	59.50	27.63±2.54
(Karabulut and Gurol, 2006)	59.537	30.8±2.8
	59.537	26.8±1.0 (B = 0 T)
(Demir and Sahin, 2012)	59.537	26.7±1.0 (B = + 0.75 T)
(Demir and Sahin, 2012)	59.537	26.7±1.0 (B = _ 0.75 T)
(Demir and Sahin, 2012)	59.54	29.14±1.64
(Garg et al., 1985)	59.54	30.42±1.21

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (⁷⁹Au)

(Kaya et al., 2001)	59.54	28.02±2.49
(Han et al., 2007)	59.54	27.7±2.77
(Demir et al., 2008)	59.54	27.7±1.91
(Han and Demir, 2011 a)	59.54	30.05±1.93
(Sharma et al., 2005)	59.60	29.96±5.09
(Demir et al., 2003)	60.00	34±2
(Shatendra et al., 1985 b)	123.6	15.11±4
(Dogan et al., 1997)		

Tableau II.5 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie L_{tot}

Elément	références	Energie (keV)	$(\sigma_{L_{tot}})_{Exp-i}$ $\pm \Delta(\sigma_{L_{tot}})_{Exp-i}$ (barn/atom)
Au (79)	(Kaya and Ertugrul, 2003)	15.73	12406.26±708.17
	(Mann et al., 1994)	16.035	11219±677
	(Al-Saleh and Saleh, 1999)	16.04	10530±743
	(Rao et al., 1996 c)	16.58	12052±810
	(Al-Saleh and Saleh, 1999)	16.90	9390±663
	(Al-Saleh and Saleh, 1999)	17.78	7948±563
	(Mann et al., 1994)	17.781	8757±443
	(Stov and Dlouhy, 1996)	17.805	9271.97±11.13
	(Garg et al., 1985)	17.8	8636.49±589.32
	(Rao et al., 1995 b)	21.56	6041.53±558
	(Mandal et al., 2001)	21.60	5279±387
	(Mann et al., 1994)	22.581	4677±286
	(Garg et al., 1985)	22.6	4731.91±321.51
	(Mann et al., 1990)	22.6	4677±286
	(Kacal et al., 2011)	22.6	4331.84±330.47 (NIST)
	(Kacal et al., 2011)	22.6	4383.88±334.75 (WinXCOM)
	(Sharma et al., 1996)	23.618	4274±342
	(Sharma et al., 1996)	23.618	4336±347
	(Sharma et al., 1996)	23.618	4132±329
	(Rao et al., 1993 a)	23.62	5088±418
	(Mandal et al., 2001)	23.7	3787±287
	(Rao et al., 1993 a)	24.68	4485±376.8
	(Sharma et al., 1996)	24.681	3546±283
	(Sharma et al., 1996)	24.681	3449±276
	(Sharma et al., 1996)	24.681	3789±303
	(Mann et al., 1994)	25.77	3411±195.5
	(Rao et al., 1994)	25.78	3282±322
	(Garg et al., 1985)	25.8	3334.86±227.87
	(Mandal et al., 2001)	25.8	3142±240
	(Rao et al., 1994)	26.88	2948±280
	(Ertugrul et al., 2002)	31.635	1871±94
	(Rao et al., 1995 b)	31.64	2642.84±213
	(Mann et al., 1994)	32.89	1730.5±99.5
	(Rao et al., 1994)	32.89	1864±171
	(Rao et al., 1995 b)	34.17	1862.7±180
(Rao et al., 1995 c)	35.56	1544.84±89.2	

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

(Rao et al., 1995 c)	39.90	1054.58±87.4
(Rao et al., 1993 b)	36.62	1552±124.8
(Mann et al., 1994)	38.184	1177±77
(Rao et al., 1993 b)	43.69	1039±81.6
(Mann et al., 1994)	43.949	818±48.8
(Rao et al., 1993 b)	48.30	842±51.4
(Rao et al., 1993 b)	50.20	700±48
(Rao et al., 1993 b)	53.50	553±37.2
(Ertugrul, 1996 a)	59.5	323.5±9.8
(Seven and Kocak, 2002)	59.5	326.8±18.21
(Dogan et al., 1997)	59.50	319.17±17
(Kucukonder et al., 2004)	59.50	394.56±22.49
(Cengiz et al., 2010 a)	59.5	349.8±91.67
(Demir and Sahin, 2012)	59.537	328.4±13.5 (B = 0 T)
(Demir and Sahin, 2012)	59.537	428.2±18.2 (B = + 0.75 T)
(Demir and Sahin, 2012)	59.537	425.5±18.2 (B = - 0.75 T)
(Karabulut and Gurol, 2006)	59.537	343.14±31.46
(Kaya et al., 2001)	59.54	359.84±22.67
(Han and Demir, 2011 a)	59.54	333.67±24.93
(Demir et al., 2008)	59.54	357.06±35.706
(Han et al., 2007)	59.54	336.81±29.7
(Sharma et al., 2005)	59.54	334.16±21.221
(Demir et al., 2003)	59.60	313.12±53.14
(Shatendra et al., 1985 b)	60	241.7±18.6
(Dogan et al., 1997)	123.6	237.5±25

Tableau II.6 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie M_{ξ}

Element (Z)	References	Energie (keV)	$(\sigma_{M_{\xi}})_{Exp-i}$ $\pm \Delta (\sigma_{M_{\xi}})_{Exp-i}$ (barn/atom)
Au (79)	Gupta et al., 2014	3.01	511±51
	Gupta et al., 2014	3.15	480±48
	Gupta et al., 2014	3.27	385±38
	Gupta et al., 2014	3.37	460±46
	Gupta et al., 2014	3.56	501±50
	Bansal et al., 2018	5	235±24
	Sharma et al., 2006	5.96	126±12
	Bansal et al., 2018	7	60±6
	Kaur et al., 2014	8	74±9
	Bansal et al., 2018	9	44±4
	Kaur et al., 2014	10	35±4

Tableau II.7 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie $M_{\alpha\beta}$

Element (Z)	References	Energie (keV)	$(\sigma_{M_{\alpha\beta}})_{Exp-i}$ $\pm \Delta (\sigma_{M_{\alpha\beta}})_{Exp-i}$ (barn/atom)
-------------	------------	---------------	--

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

Au (79)	Gupta et al., 2014	3.01	11886±832
	Gupta et al., 2014	3.15	9476±663
	Gupta et al., 2014	3.27	10474±733
	Gupta et al., 2014	3.37	9678±677
	Gupta et al., 2014	3.56	11306±791
	Bansal et al., 2018	5	3779±378
	Sharma et al., 2006	5.96	2608±182
	Kup Aylikci et al., 2019	5.96	2530.80±127.69
		7	1631±164
	Bansal et al., 2018	7	1820±132
	Hiremath et al., 2021	8	1454±145
	Kaur et al., 2014	9	44±4
	Bansal et al., 2018	10	1429±143
	Kaur et al., 2014		

Tableau II.8 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie M_m

Element (Z)	References	Energie (keV)	$(\sigma_{M_m})_{Exp-i} \pm \Delta(\sigma_{M_m})_{Exp-i}$ (barn/atom)
Au (79)	Gupta et al., 2014	3.01	64±6
	Gupta et al., 2014	3.15	63±6
	Gupta et al., 2014	3.27	196±20
	Gupta et al., 2014	3.37	164±16
	Gupta et al., 2014	3.56	246±25
	Sharma et al., 2006	5.96	75±7
	Bansal et al., 2018	7	50±5
	Kaur et al., 2014	8	42±4
	Bansal et al., 2018	9	33±4
	Kaur et al., 2014	10	29±3

Tableau II.9 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie M_γ

Element (Z)	References	Energie (keV)	$(\sigma_{M_\gamma})_{Exp-i} \pm \Delta(\sigma_{M_\gamma})_{Exp-i}$ (barn/atom)
Au (79)	Gupta et al., 2014	3.01	300±21
	Gupta et al., 2014	3.15	384±27
	Gupta et al., 2014	3.27	435±30
	Gupta et al., 2014	3.37	404±28
	Gupta et al., 2014	3.56	319±22
	Bansal et al., 2018	5	196±20
	Sharma et al., 2006	5.96	135±20
	Bansal et al., 2018	7	89±9
	Kaur et al., 2014	8	75±8
	Bansal et al., 2018	9	58±6
	Kaur et al., 2014	10	48±5

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

Tableau II.10 : Base de données des sections efficaces de fluorescence X de la raie M_{tot}

Element (Z)	References	Energie (keV)	$(\sigma_M)_{Exp-i}$ $\pm \Delta(\sigma_M)_{Exp-i}$ (barn/atom)
Au (79)	Gupta et al., 2014	3.01	12761±910
	Gupta et al., 2014	3.15	10403±744
	Gupta et al., 2014	3.27	11490±821
	Gupta et al., 2014	3.37	10706±767
	Gupta et al., 2014	3.56	12372±888
	Bansal et al., 2018	5	4399±441
	Rao et al., 1996	5.47	3744.80±261.92
	Özdemir, 2007	5.59	2825.46±114.59
	Durak and Özdemir, 2001	5.96	3005.53±180.07
	Ertuğrul et al., 1996	5.96	2671.58±196.44
	Küçükönder et al., 2008	5.96	3071.01±160.43
	Kup Aylikci et al., 2019	5.96	2530.80±127.69
	Puri et al., 1993	5.96	3309±265
	Rao et al., 1996	5.96	3020.59±229.18
	Şahin et al., 2004	5.96	2704.32±130.96
	Sharma et al., 2006	5.96	2944±221
	Apaydin et al., 2005	5.96	2953.15±163.70
	Kumar et al., 2008	5.97	2872±120
	Shatendra et al., 1985	6	2095±440
	Rao et al., 1995	6.47	2667.66±261.92
	Mann et al., 1990	6.47	2265±165
	Bansal et al., 2018	7	1851±186
	Rao et al., 1996	7.04	1951.96±163.70
	Mann et al., 1990	7.558	1560±120
	Rao et al., 1995	7.57	2035.45±261.92
	Kaur et al., 2014	8	1668±169
	Rao et al., 1996	8.14	1382.94±98.22
	Mann et al., 1990	8.735	1150±90
	Rao et al., 1996	8.74	1198.94±98.22
	Bansal et al., 2018	9	895±90
	Rao et al., 1996	9.36	1022.14±65.48
	Kaur et al., 2014	10	1560±156
	Mann et al., 1990	10.005	805±65
	Mann et al., 1990	11.372	530±45
Kaya et al., 2008	123.6	32.05±1.68	

II.3. Méthode de calcul empirique

Le calcul empirique consiste à une interpolation directe des valeurs expérimentales φ_{exp} (ou bien des valeurs moyenne pondérées $\overline{\varphi_{exp}}$) par une fonction analytique pour les éléments atomiques. Dans notre étude, on trace ces valeurs expérimentales en fonction de $\ln E$. Ensuite, les valeurs expérimentales ainsi présentées seront interpolées en fonction de l'énergie $\ln E$.

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (${}_{79}\text{Au}$)

Les valeurs empiriques pour tous les raies L et M de l'élément atomique $Z=79$ sont tracées en fonction de $\ln(E)$, dans les figures (II.1), (II.2) et interpolées à l'aide de la formule suivante :

$$\ln(\sigma_X(\ln E)) = \sum_{i=0}^2 a_i (\ln E)^i = a_0 + a_1 \ln E + a_2 (\ln E)^2 = g(\ln E) \quad (\text{II.1})$$

Où a_i sont les coefficients d'interpolation et $X = L_L, L_\alpha, L_\beta, L_\gamma, L_{tot}, M_\xi, M_{\alpha\beta}, M_m, \text{ et } M_{tot}$.

Ainsi, les valeurs empiriques sont dérivées comme suit :

$$(\sigma_{K_i})_{\text{emp}} = e^{g(\ln E)} \quad (\text{II.2})$$

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

$$\epsilon_{rms} = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\sigma_{exp} - \sigma_{emp}}{\sigma_{emp}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.3})$$

N : est le nombre de données expérimentales.

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

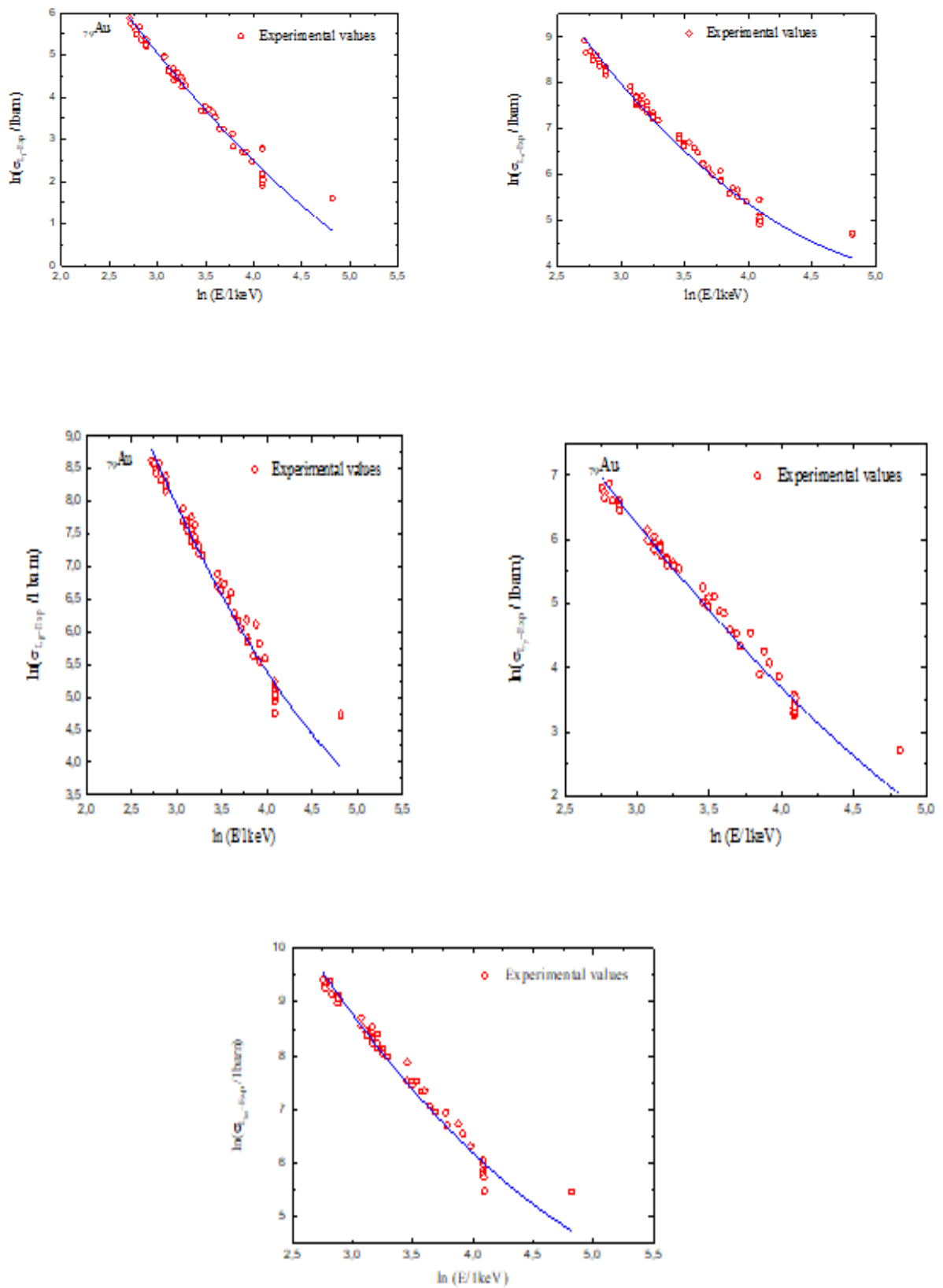


Figure II.1 : Distribution de la fluorescence X des données expérimentales des sections efficaces des raies L_L , $L\alpha$, $L\beta$, $L\gamma$, L_{tot} en fonction de l'énergie $\ln(E)$

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

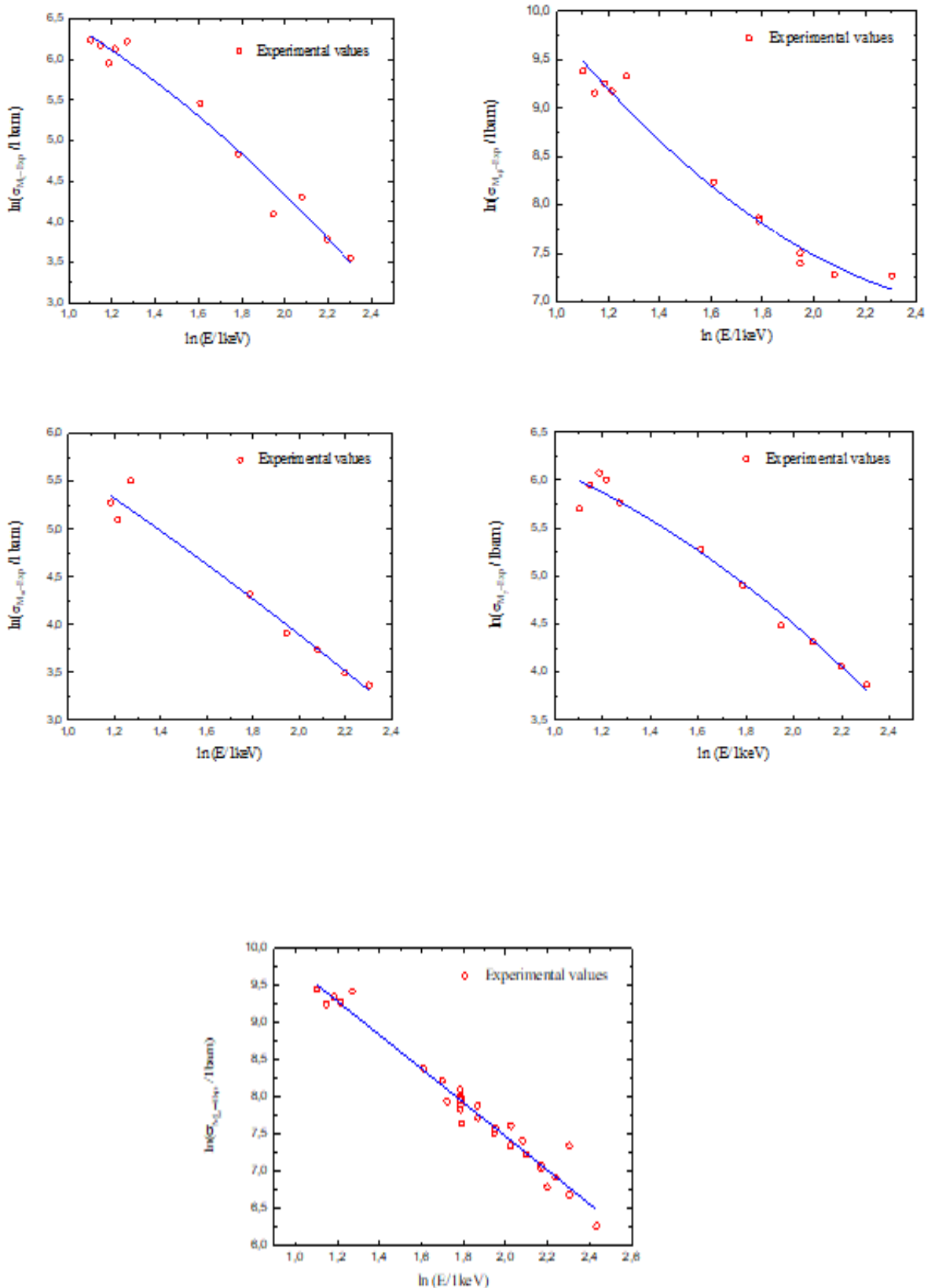


Figure II.2 : Distribution de la fluorescence X des données expérimentales des sections efficaces des raies M_{ξ} , $M_{\alpha\beta}$, M_m , M_{γ} , M_{tot} en fonction de l'énergie $\ln(E)$

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

Tableau II.11 : Les coefficients d'interpolation pour le calcul des sections efficaces empiriques de $L_I L\alpha$, $L\beta$, $L\gamma$, L_{tot} et leurs valeurs de ϵ_{rms} % correspondantes.

	E (keV)		a_i	Valuers	ϵ_{rms} %
σ_{L_I}	$16 \leq E \leq 124$	$f(Z)$	a_0	16.205141290209	9.82
			a_1	-4.603418810817	
			a_2	0.293213766935	
$\sigma_{L\alpha}$	$16 \leq E \leq 124$	$f(Z)$	a_0	23.538251822064	13.59
			a_1	-7.117358948168	
			a_2	0.643288571626	
$\sigma_{L\beta}$	$16 \leq E \leq 124$	$f(Z)$	a_0	20.658153367093	12.58
			a_1	-5.502310989034	
			a_2	0.421499527284	
$\sigma_{L\gamma}$	$16 \leq E \leq 124$	$f(Z)$	a_0	17.427473306544	9.76
			a_1	-4.601796793766	
			a_2	0.291571509707	
$\sigma_{L_{tot}}$	$16 \leq E \leq 124$	$f(Z)$	a_0	21.958956576562	10.87
			a_1	-5.747491050171	
			a_2	0.451576027337	

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

Tableau II.12 : Les coefficients d'interpolation pour le calcul des sections efficaces empiriques de M_ξ , $M_{\alpha\beta}$, M_m , M_γ , M_{tot} et leurs valeurs de $\varepsilon_{rms}\%$ correspondantes.

	E-range (keV)		a_i	Valuers	$\varepsilon_{rms}\%$
σ_{M_ξ}	$3 \leq E \leq 10$	$f(Z)$	a_0	7.583038233572	16.15
			a_1	-0.6310179052	
			a_2	-0.496520813944	
$\sigma_{M_{\alpha\beta}}$	$3 \leq E \leq 10$	$f(Z)$	a_0	13.883841846856	14.56
			a_1	-4.961581875217	
			a_2	0.88015124293	
σ_{M_m}	$3 \leq E \leq 10$	$f(Z)$	a_0	7.141958388183	14.63
			a_1	-1.359566841378	
			a_2	-0.131758968097	
σ_{M_γ}	$3 \leq E \leq 10$	$f(Z)$	a_0	6.7120787443216	11.72
			a_1	-0.095368438369	
			a_2	-0.506254303445	
$\sigma_{M_{tot}}$	$3 \leq E \leq 10$	$f(Z)$	a_0	12.000734295274	11.54
			a_1	-2.250637939631	
			a_2	-0.006008639876	

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

II.4. Discussion et comparaison des résultats

Après avoir calculé les valeurs empiriques pour l'élément de l'Or ($Z=79$), nous les avons comparées aux valeurs expérimentales rapportées par d'autres auteurs : pour les raies L (Al-Saleh and Saleh, 1999 ; Sharma et al., 1996 ; Rao et al., 1993b) et pour les raies M (Gupta et al., 2014 ; Kaur et al., 2014 ; Bansal et al., 2018). Les courbes de comparaison sont illustrées dans les Figures II.3 et II.4. Nous commençons ensuite la discussion de ces résultats.

De manière général, on observe que nos valeurs empiriques pour des raies L et M sont en bon accord avec les valeurs expérimentales publiées. En

Où la différence relative (DR) entre les valeurs empiriques obtenues et les autres calculs utilisant l'équation suivant :

$$DR(\%) = \left| \frac{\sigma_{exp} - \sigma_{emp}}{\sigma_{emp}} \right| \times 100 \quad (\text{II.4})$$

Après avoir examinées ces deux figures, nous pouvons déduire certains points selon les différentes raies de sections efficaces. En ce qui concerne les raies L nous observons :

Pour la raie L_I , Les valeurs expérimentales de (Sharma et al., 1996) sont en bon accord avec nos résultats empiriques (2.90% - 3.67%). De plus, nos valeurs empiriques sont partiellement compatibles avec ceux de (Rao et al., 1993 b) (7.60% - 40.05%), bien que ce dernier présente des variations notables au-delà de 20%. Cependant, les valeurs de (Al-Saleh and Saleh, 1999) montre une cohérence modérée avec nos valeurs empiriques, où le DR varie de 14.25% à 17.73%.

Concernant la raie L_{α} : une bonne concordance est observée entre nos calculs empiriques et ceux de (Sharma et al., 1996) (2.34% - 12.16%) et (Rao et al., 1993 b)(1.45% - 27.75%), tandis que les valeurs de (Rao et al., 1993 b) présente des désaccords importants au-delà de 20%. En outre, les valeurs de (Al-Saleh and Saleh, 1999) montre une incohérence avec nos valeurs empiriques avec un écart varie de 18.90% à 91.70%.

Notre analyse révèle un accord notable entre notre valeurs empiriques des raies L_{β} , L_{γ} , L_{tot} estimée par l'équation II. 1 et les résultats expérimentaux de ((Al-Saleh and Saleh, 1999) ; (Sharma et al., 1996) ;(Rao et al., 1993 b)) sur l'ensemble de la gamme d'énergies utilisé. En revanche, on peut noter, pour certaines valeurs d'énergies d'excitation, l'accord entre nos calculs empiriques et les données expérimentales s'avère insatisfaisant.

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

Globalement, pour la raie L_{β} , les écarts entre nos calculs empiriques actuels et les données expérimentales de (Al-Saleh and Saleh, 1999) varient entre 13.80% et 16.69%, et entre 0.50% et 4.32% celles de (Sharma et al., 1996). Une variation importante est observée pour les valeurs mesurées par (Rao et al., 1993 b), avec une déviation variant de 16.72% et 57.35%. Par ailleurs, pour la raie L_{γ} , les écarts entre nos résultats empiriques et les autres valeurs expérimentales sont de : 3.66% à 21.89% pour (Al-Saleh and Saleh, 1999), 4.72% à 14.16% pour (Sharma et al., 1996), et 14.98% à 34.28% pour (Rao et al., 1993 b). Enfin, pour la raie L_{tot} , la déviation relative est entre 15.74% et 92.01% pour (Al-Saleh and Saleh, 1999), 0.03% et 6.18% pour (Sharma et al., 1996), et 8.07% et 31.40% pour (Rao et al., 1993 b).

D'après la figure II. 4, on observe que pour la raie M_{ξ} , la comparaison entre nos valeurs empirique avec les valeurs expérimentales de (Gupta et al., 2014 ; Kaur et al., 2014 ; Bansal et al., 2018) indiquent faible concordance, et les valeurs de DR comprises respectivement entre 4.72% et 26.35%, 5.94% et 19.74%, et 19.51% et 31.66%.

Nous remarquons que pour les raies $M_{\alpha\beta}$, M_m , M_{γ} , et M_{tot} nos valeurs empiriques concordent extrêmement bien avec les valeurs expérimentales de (Kaur et al., 2014) (DR comprise entre 0.72% et 19.74%). On remarque cependant un moins bon accord entre les valeurs empiriques et ceux de (Bansal et al., 2018). En effet, DR passe de 6.12% à 15.20% pour $M_{\alpha\beta}$, varie de 2.18% à 8.18% pour M_m , comprise entre 0.20% et 11.38% pour M_{γ} , et entre 2.65% et 20.52% pour M_{tot} .

Nous observons aussi que les DR entre nos résultats empiriques et les mesures expérimentales de (Gupta et al., 2014) montrent une bonne concordance lorsque DR (%) ≤ 20 pour certaines énergies, notamment pour $M_{\alpha\beta}$ (1.58% – 39.12%), M_m (6.58% – 35.27%), M_{γ} (0.95% – 25.05%), et M_{tot} (2.12% – 33.63%). En revanche, des divergences notables apparaissent lorsque la déviation relative DR dépasse 20%, en particulier pour quelques valeurs d'énergies.

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

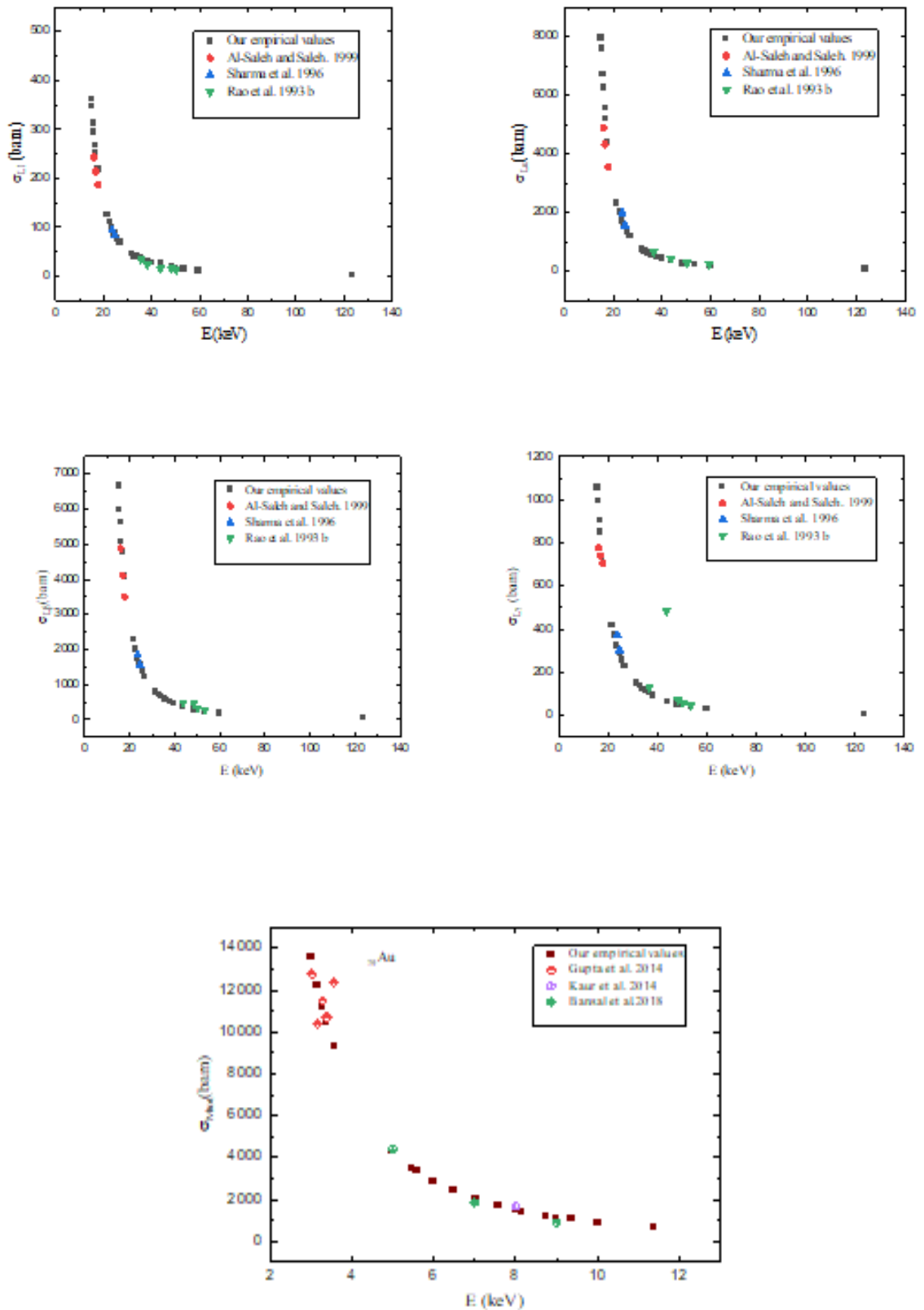


Figure II.3 : Comparaison entre les résultats empiriques des raies $L\alpha$, $L\beta$, $L\gamma$, L_{tot} déterminées et les résultats expérimentaux en fonction de l'énergie E (keV).

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

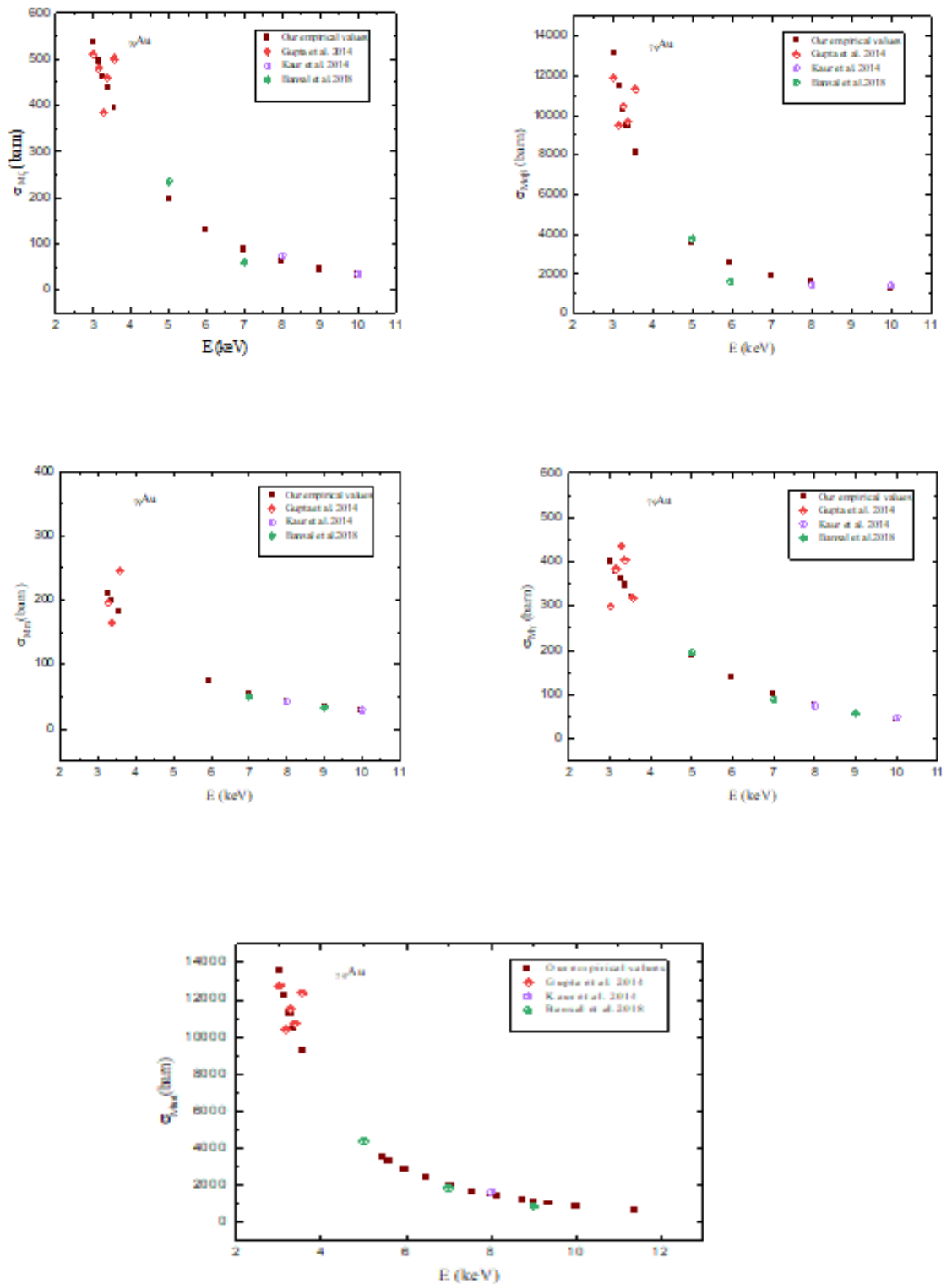


Figure II.4 : Comparaison entre les résultats empiriques des raies M_{ξ} , $M_{\alpha\beta}$, M_m , M_{γ} , M_{tot} déterminées et les résultats expérimentaux en fonction de l'énergie E (keV).

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (${}_{79}\text{Au}$)

II.5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons réalisé un calcul empirique des sections efficaces de fluorescence X pour les raies L et M de l'Or ($Z = 79$), en nous appuyant sur une vaste base de données expérimentales issues de la littérature scientifique. La méthode employée repose sur une interpolation polynomiale des valeurs expérimentales en fonction du logarithme de l'énergie du rayonnement incident. Les coefficients d'interpolation obtenus permettent une estimation précise des sections efficaces sur une large gamme d'énergies.

La comparaison entre les résultats empiriques et les données expérimentales disponibles a révélé une concordance globalement satisfaisante. En particulier, les écarts relatifs observés pour la majorité des raies sont inférieurs à 20 %, confirmant ainsi la validité de notre approche. Certaines divergences plus marquées ont néanmoins été identifiées à des énergies spécifiques, ce qui souligne la sensibilité de ces mesures aux conditions expérimentales et aux paramètres atomiques impliqués.

En résumé, cette étude fournit un cadre méthodologique fiable pour l'estimation des sections efficaces de fluorescence X de l'Or, utile tant pour les applications analytiques que pour la modélisation théorique en spectroscopie X. Ces résultats constituent également une base pertinente pour l'extension de cette méthode à d'autres éléments lourds.

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

Références

- Allawadhi, K. L., Sood, B. S., Mittal, R., Singh, N., Mann, K. S., & Vandana. X-Ray Spectrom. 24(1), 9-12. (1995).
- Al-Saleh, K.A., Saleh, N.S.,. Radiation Physics and Chemistry, 54, 117-124. (1999).
- Apaydin, G., Aylikci, V., Kaya, N., Cengiz., E., Tirasoglu, E.,. Acta Physica Polonica. A No. 6, Vol. 113. (2008).
- Apaydin, G., Tıraşoğlu, E., Çevik, U., Ertuğral, B., Baltaş, H., Ertuğrul, M., & Kobya, A. I. Radiat. Phys. Chem. 72(5), 549-554. (2005).
- Bansal, H., Kaur, G., Tiwari, M.K., Mittal, R. Eur. Phys. J. D, 70-84. (2016).
- Bansal, H., Tiwari, M. K., & Mittal, R. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 204, 232-241. (2018).
- Cengizn, E., Tirasoglu, E., Aylikci, V., Apaydin, G. Radiation Physics and Chemistry. 79, 809-815. (2010).
- Chen, M.H., Crasemann, B., Mark, H. Phys. Rev. A 21,449–453. (1980).
- Chen, M.H., Crasemann, B., Mark, H. Phys. Rev. A27, 2989–2994. (1983).
- De Boer, D. K. G. Spectrochim. Acta Part B: At. Spectrosc. 44(11), 1171-1190.
- Demir, D., Sahin, Y.,(2012). . Journal of X-Ray Science and Technology. 20, 79–89.(1989).
- Demir, L., Han, I., Sahin, M. Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 162, 44-48. (2008).
- Demir, L., Sahin, M., Kurucu, Y., Karabulut, A., Sahin, Y. Radiation Physics and Chemistry. 67, 605–612.(2003).
- Dogan, O., Simsek, O., Turgut, U., Ertugrul, M. Physica Scripta. Vol. 56, 580-583.(1997).
- Durak, R., & Özdemir, Y. Spectrochim. Acta B: At. Spectrosc. 56(4), 455-464.(2001).
- Ertugrul, M. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 18-22. (1996).
- Ertugrul, M. Applied Radiation and Isotopes. 57, 63–66.(2002).
- Ertuğrul, M., Sade, K., & Erdoğan, H. X-Ray Spectrom. 33(2), 136-145. (2004).

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (⁷⁹Au)

- Ertuğrul, M., Tıraşoğlu, E., Kurucu, Y., Erzeneoğlu, S., Durak, R., & Şahin, R. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 18-22.(1996).
- Garg, R. R., Singh, S., Shahi, J. S., Mehta, D., Singh, N., Trehan, P. N., Kumar, S., Garg, M.L., & Mangal, P. C. X-Ray Spectrom. 20(2), 91-95.(1991).
- Gupta, S., Kaur, G., Bansal, H., Mittal, V. K., & Mittal, R. Eur. Chem. J. 5(2), 363-369.(2014).
- Gurol, A., Karabulut, A., Polat, R., Budak, G., Sahina, Y., Ertugrul, M. Radiation Physics and Chemistry. 66, 197–205.(2003).
- Han, I., Demir, L. Spectroscopy Letters. 44, 95–102.(2011).
- Han, I., Demir, L., Agbaba, M. Radiation Physics and Chemistry. 76, 1551–1559.(2007).
- Hubbell, J.H., Trehan, P.N., Singh, N., Chand, B., Mehta, D., Garg, M.L., Garg, R.R., Singh, S., Puri, S. J. Phys. Chem. Ref. Data 23,339.(1994).
- Jopson, R. C., Mark, H., Swift, C. D., & Williamson, M. A. Phys Rev. 137(5A), A1353-A1357.(1965).
- Kacal, M.R., Duraka, R., Akmanb, F., Turhana, M.F., Hanc, I. Radiation Physics and Chemistry 80, 692–700.(2011).
- Kahoul, A., Aylikci, V., Deghfel, B., Küp Aylikci, N., Nekkab, M. Spectrosc. Radiat. Transf. 145, 205–2013.(2014).
- Karabulut, A., Gurol, A. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B 244, 303–306.(2006).
- Kaya, A., Ertugrul, M., Dogan, O., Sogut, O., Turgut, U., Simsek, O. Analytica Chimica Acta. 441, 317–323.(2001).
- Kaya, N., Apaydın, G., Aylikci, V., Cengiz, E., & Tıraşoğlu, E. Radiat. Phys. Chem. 77(2), 101-106. Radiat. Phys. Chem. 77(2), 101-106. (2008).
- Khalfallah, F., Deghfel, B., Kahoul, A., Aylikci, V., Küp Aylikci, N., & Nekkab, M. Radiat. Phys. Chem. 112, 71–75. (2015).
- Konstantinov, A.A., & Sazonova, T. E. Radiat. Phys. Acad. USSR, Phys. Ser., 32, 581. (1969).

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (⁷⁹Au)

Krause, M. O. J. Phys. Chem. Ref. Data, 8(2), 307-327. (1979).

Küçükönder, A., Sögüt, Ö., Dozen, C., & Durdu, B. G. Eur. Phys. J. D. 46(1), 37-39. (2008).

Kumar, S., Sharma, V., Mehta, D., & Singh, N. Phys. Rev. A. 77(3), 032510. (2008).

Küp Aylıkci, N., Aylıkci, V., Tıraşoğlu, E., & Depci, T. Adıyaman University Journal of Science. 9(2) 274-289. (2019).

Mandal, A.C., Sarkar, M., Bhattacharya, D., Sen, P. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B 174, 41-46. (2001).

Mann, K. S., Singh, N., Mittal, R., Allawadhi, K. L., & Sood, B. S. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 23(15), 2497-2504. (1990).

Mann, K.S., Singh, N., Mittal, R., Allawadhi, K.L., Sood, B.S.J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 23, 3521-3530. Printed in the UK. (1990).

Mann, K.S., Singh, N., Mittal, R., Sood, B.S., Allawadhi, K.L. X-Ray Spectrometry, Vol. 23, 208-217. (1994).

McGuire, E. J. Phys. Rev. A. 5(3), 1043-1047. (1972).

Öz, E., Erdoğan, H., & Ertuğrul, M. X-Ray Spectrom. 28(3), 198-202. (1999).

Özdemir, Y. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B: Beam Interact. Mater. At. 256(2), 581-585. (2007).

Puri, S. At. Data Nucl. Data Tables. 93(5), 730-741.(2007).

Puri, S., Mehta, D., Chand, B., Singh, N., Mangal, P.C., & Trehan, P.N. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 73(3), 319-323. (2000).

Puri, S., Mehta, D., Singh, N., Trehan, P.N. Physical Review A. Volume 54, Number 1. (1996).

Rao, D. V., Cesareo, R., & Gigante, G. E. Radiat. Phys. Chem. 46(3), 317-320. (1995).

Rao, D. V., Cesareo, R., & Gigante, G. E. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B: Beam Interact. Mater. At. 108(3), 227-232. (1996).

Rao, D. V., Cesareo, R., & Gigante, G. E. Phys. Chem. 49(4), 503-504. (1997).

Rao, D. V., Cesareo, R., Gigante, G. E. Appl. Radiat. Isot. Vol. 45, No. 5. pp. 621-626. (1994).

Chapitre II : Calcul empirique des sections efficaces de la fluorescence X des raies L et M de L'Or (^{79}Au)

- Rao, D.V., Cesareo, R., Gigante, G.E. *Physical Review A* . Volume 47, Number 2. (1993).
- Rao, D.V., Cesareo, R., Gigante, G.E. *X-ray Spectrometry*. Vol. 22, 401-405. (1993).
- Rao, D.V., Cesareo, R., Gigante, G.E. *Physica Scripta*. Vol.51, 252-256. (1995).
- Rao, D.V., Cesareo, R., Gigante, G.E. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B: Beam Interact. Mater. At.* 108(3), 227-232. (1996).
- Şahin, M., Demir, L., & Kurucu, Y.J. *Radioanal. Nucl. Chem.* 261(2), 415-419. (2004).
- Sampaio, J. M., Madeira, T. I., Parente, F., Indelicato, P., Santos, J. P., & Marques, J. *P.Radiat. Phys. Chem.* 107, 36-39. (2015).
- Sharma, J.K., Singh, N., Mittal, R., Sood, B.S., Allawadhi, K.L. *X-ray Spectrometry*, Vol. 25, 239-244. (1996).
- Sharma, M., Sharma, V., Kumar, S., Puri, S., & Singh, N. *Radiat. Phys. Chem.* 75(11),1503-1509. (2006).
- Sharma, M., Singh, P., Shahi, J. S., Mehta, D., Singh, N. *X-Ray Spectrom.* 34, 35–41.(2005).
- Shatendra, K., Allawadhi, K. L., & Sood, B. S. *Phys B+C*. 124(2), 279-281. (1984).
- Shatendra, K., Allawadhi, K.L., Sood., B.S. *Physical Review A*. Volume 31, Number 5. (1985).
- Shatendra, K., Singh, N., Mittal, R., Allawadhi, K. L., & Sood, B. S. *X-Ray Spectrom.* 14(4), 195-198. (1985).
- Sögüt, Ö., Büyükkasap, E., Küçükönder, A., Ertuğrul, M., Doğan, O., Erdoğan, H., & Şimşek, Ö. *X-Ray Spectrom.* 31(1), 62-70. (2002).

Conclusion générale

Conclusion générale

Conclusion générale

Ce mémoire a porté sur l'étude des paramètres atomiques relatifs à la fluorescence X, avec une application particulière à l'élément Or ($Z=79$). Dans une première partie, nous avons rappelé les fondements théoriques essentiels de la structure atomique, des transitions électroniques, des mécanismes d'interaction entre la matière et les rayonnements, ainsi que les concepts fondamentaux liés à la fluorescence X, notamment l'effet photoélectrique, l'effet Auger et les transitions de Coster-Kronig. Ces notions sont indispensables pour comprendre les processus physiques sous-jacents à l'émission de rayons X caractéristiques.

Le second chapitre a été consacré à l'exploitation d'une large base de données expérimentale provenant de la littérature, pour le calcul empirique des sections efficaces de fluorescence X de l'Or. Les valeurs ont été interpolées en fonction de l'énergie incidente ($\ln E$), permettant d'ajuster des fonctions analytiques décrivant l'évolution des sections efficaces des raies L_I , L_{α} , L_{β} , L_{γ} , L_{tot} et M_{ξ} , $M_{\alpha\beta}$, M_m , M_{γ} , M_{tot} . L'accord obtenu entre les courbes interpolées et les données expérimentales démontre la pertinence de l'approche empirique adoptée, et met en évidence l'influence significative des effets relativistes sur les orbitales internes de l'Or, élément à numéro atomique élevé.

Les résultats obtenus sont en accord avec les valeurs expérimentales publiées et confirment l'importance des effets relativistes dans le comportement atomique de l'Or, notamment en ce qui concerne ses raies L et M. Cette étude contribue ainsi à l'amélioration de la connaissance des processus d'émission de fluorescence X et de leur modélisation pour des éléments lourds.

Résumé

Ce mémoire porte de l'étude des sections efficaces de fluorescence X, avec une application spécifique à l'élément de l'Or ($Z=79$). Il est divisé en deux chapitres principaux : la première traite des concepts théoriques fondamentaux liés à la structure atomique, aux interactions entre les rayonnements et la matière, ainsi qu'aux processus physiques tels que l'effet photoélectrique, l'effet Auger et les transitions de Coster-Kronig. Le second chapitre est consacré au calcul empirique des sections efficaces des raies L et M de l'Or, en se basant sur une large base de données expérimentale. Les résultats, ajustés en fonction de l'énergie incidente, montrent un bon accord avec les données de la littérature et confirment l'influence significative des effets relativistes pour cet élément lourd.

Mots-clés : Calcul empirique, Section efficace, Fluorescence X

Abstract

The work focuses on the study of X-ray fluorescence cross sections, with a specific application to the element gold ($Z=79$). It is divided into two main chapters: the first discusses fundamental theoretical concepts such as atomic structure, radiation-matter interactions, and physical processes including the photoelectric effect, Auger effect, and Coster-Kronig transitions. The second chapter is dedicated to the empirical calculation of L and M X-ray fluorescence cross sections gold, based on a large experimental database. The results, fitted as a function of the incident energy, show good agreement with data from the literature and highlight the significant influence of relativistic effects for this heavy elements.

Keywords: Empirical calculation, Cross section, Coster-Kronig transitions, X-ray fluorescence

المخلص

تناول هذا البحث دراسة المقاطع العرضية لفلورة الأشعة السينية، مع تطبيق خاص على عنصر الذهب (العدد الذري 79). يتكون البحث من فصلين رئيسيين: الفصل الأول يستعرض الأسس النظرية المتعلقة بالبنية الذرية، والتفاعلات بين الأشعة والمادة، والعمليات الفيزيائية مثل تأثير الظاهرة الكهروضوئية، وتأثير أوجر، وانتقالات كوستر-كرونيج. أما الفصل الثاني فيركز على الحساب التجريبي للمقاطع العرضية لخطوط L و M لعنصر الذهب، بالاعتماد على قاعدة بيانات تجريبية واسعة. أظهرت النتائج تطابقاً جيداً مع البيانات المنشورة، مما يؤكد الأثر الكبير للتأثيرات النسبية في العناصر الثقيلة مثل الذهب.

كلمات مفتاحية: الحساب التجريبي، المقطع العرضي، انتقالات كوستر-كرونيج، فلورة الأشعة السينية