

République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Mohamed El Bachir El Ibrahimi – Bordj Bou Arreridj
Faculté des Sciences et de la Technologie
Département Sciences de la Matière

جامعة محمد البشير الإبراهيمي «برج بو عريريج»
كلية العلوم والتكنولوجيا
قسم علوم المادة



Mémoire de fin d'études

PRESENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLOME DE : Master

Filière : Physique
Option : Physique des Matériaux

THÈME :

Contribution au calcul des probabilités de transfert lacunaire
de la couche K (η_{KL}) des éléments atomiques

Préparé par : BOUHEBEL SANA

Soutenu le : 25/06/2023

Devant le jury :

Président :	Daoudi Salim	Pr	Université de BBA
Rapporteur :	Bendjedi Ahlam	MCB	ENS Sétif
Co-rapporteur :	Kahoul Abdelhalim	Pr	Université de BBA
Examineur :	Khalfallah Farid	MCA	Université de BBA

Année Universitaire 2022-2023

DEDICACE

En exprimant ma gratitude, je dédie cet humble travail à ceux qui ont été d'une grande aide, et quoi que je dise, je ne pourrai jamais exprimer mon amour sincère pour eux :

À mes chers parents pour tout leur amour pour moi

Mon cher père et mon modèle dans la vie Mustapha pour son soutien moral et matériel et ses encouragements tout au long de ma vie, ma chère mère Zohra qui a illuminé mon chemin et ma encouragé et soutenu tout au long de mes études.

À mon cher frère : Saïd.

À mes chères sœurs : Sara et Fatima.

À mes chères cousines : Rayane et Douaa.

À toute ma famille Bouhebel et benmansour.

Je n'oublie pas mes amis :

Nassima et Khawla et Massousda et aya et Hadjer et Lamia.

Laila, Nahla et ma deuxième famille Güzel çiçekler.

SaNa Bouhbel.

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 remercie les encadrants, Pr. Kahoul Abdelhalim et Dr. Bendjedi Ahlam, qui m'ont aidé à avancer dans ce travail grâce aux conseils, orientations et soutiens qui m'ont été apportés tout au long de cette recherche. Je remercie particulièrement le professeur pour sa gentillesse, sa patience, et aussi pour le temps qu'il a consacré à la réalisation de ce travail.

J'exprime toute ma reconnaissance à Pr. Daoudi Salim, de bien vouloir nous fait l'honneur de présider le jury de ce mémoire.

J'adresse mes sincères remerciements aux Dr. Khalfallah Farid, membre de jury, pour avoir accepté de juger ce travail.

Mes sincères remerciements ont toute ma famille, tous ceux qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail, vous avez toute ma gratitude et mes remerciements.

SaNa Bouhebel.

CHAPITRE I

<i>Figure I.1:</i> L'évolution du modèle de l'atome.	5
<i>Figure I.2:</i> atomes et leurs couches électroniques.	6
<i>Figure I.3:</i> transition entre les niveaux.....	7
<i>Figure I.4:</i> les transitions et notations de Siegbahn (Barahona, 2015).	9
<i>Figure I.5:</i> Les rayonnements électromagnétiques.	10
<i>Figure I.6:</i> Constitution des rayonnements (ionisant, non ionisant) (Tehami, 2018). .	13
<i>Figure I.7:</i> Interaction des particules chargées avec la matière.	14
<i>Figure I.8 :</i> Différents processus d'interaction photons – matière (Bensaci et Benchaïb, 2014).	14
<i>Figure I.9:</i> La diffusion Rayleigh (diffusion élastique) (Stan, 2010).	15
<i>Figure I.10:</i> La diffusion Compton (diffusion inélastique) (Stan, 2010).	16
<i>Figure I.11:</i> L'effet photoélectrique (Stan, 2010).	17
<i>Figure I.12 :</i> La production de paires (Stan, 2010).....	18
<i>Figure I.13:</i> Domaine de prédominance de l'effet photoélectrique, effet Compton et production de pair (matérialisation) en fonction de Z du milieu et de l'énergie du photon (Zidi, 2021).	18
<i>Figure I.14:</i> Contributions respectives au coefficient d'absorption linéique des trois modes d'absorption de l'énergie des photons par la matière en fonction de l'énergie des photons (Tehami, 2018).....	19
<i>Figure I.15:</i> l'atténuation d'un faisceau de photons dans la matière (Rebouli, 2022). 20	
<i>Figure I.16:</i> Réarrangement atomique suite à une éjection d'électron	20
<i>Figure I.17:</i> Collision avec ionisation et excitation.....	21
<i>Figure I.18:</i> Les transitions radiatives.....	22
<i>Figure I.19:</i> processus de fluorescence X.	23
<i>Figure I.20:</i> Représentation d'une transition Auger.	24
<i>Figure I.21:</i> Le rendement de fluorescence ω en fonction du numéro atomique Z pour la couche K (Derradj, 2019).	25

CHAPITRE II

<i>FigureII.1:</i> Les valeurs de l'écart type(z_i) et Le z-score moyen(\bar{z}) en fonction du numéro atomique Z des éléments de numéro atomique de ^{19}K à ^{92}U	48
<i>FigureII.2:</i> Droite de régression de Y en fonction de X	49
<i>FigureII.3:</i> Les valeurs moyennes pondérées recommandée ($\eta_{\text{KL-W}}$) en fonction de numéro atomique Z des éléments de ^{19}K à ^{92}U	51
<i>Figure II.4:</i> Les valeurs du rapport R en fonction de numéro atomique Z des éléments de ^{19}K à ^{92}U	52
<i>FigureII.5:</i> Nos valeurs semi-empirique du probabilité de transfert lacunaire ($\eta_{\text{KL-semi-emp}}$) comparer aux valeurs théorique de Venugopala Rao et al. (1972) et les valeurs empiriques de Puri et al. (1993) et Schönfeld et Janßen (1996).....	56



CHAPITRE I

Tableau I.1 : la masse et charge des particules 5
Tableau I.2 : les nombres quantiques et les nombres maximaux d'électrons..... 8

CHAPITRE II

Tableau II.1: Siegbahn, IUPAC, et $n_l j$ électron configuration (EC) notations pour les transitions radiatives (Zidi,2021) 35
Tableau II.2: Principales transitions atomiques permises relatives à l'ionisation de la couche L et correspondance entre la notation quantique et celle de Seigbahn (Meddah, 2021). 35
Tableau II.3: la famille I_a Alcalins. 36
Tableau II.4: la famille II_a Alcalino-terreux. 36
Tableau II.5: la famille III_a les Terreux..... 37
Tableau II.6: la famille IV_a Les Carbonides. 37
Tableau II.7: la famille V_a Les azotides. 38
Tableau II.8: la famille VI_a Les chalcogènes. 38
Tableau II.9: la famille VII_a les halogènes. 38
Tableau II.10: la famille VIII_a les gaz nobles. 39
Tableau II.11: la famille III_B à II_B les éléments de transition 39
Tableau II.12: la famille les lanthanides 40
Tableau II.13: la famille les actinides 41
Tableau II.14: Valeurs expérimentales des probabilités de transfert lacunaire de la couche K (η_{KL}) des éléments de numéro atomique $19 \leq Z \leq 92$ (Rebouli, 2022). 43
Tableau II.15: nos valeurs semi-empirique du probabilité de transfert lacunaire ($\eta_{KL-semi-emp}$) et valeurs théorique de Venugopala Rao et al. (1972) et les valeurs empiriques de Puri et al. (1993) et Schönfeld and Janßen (1996). 54



Table des matières

Introduction générale	1
-----------------------------	---

CHAPITRE I*Les paramètres atomiques*

I.1. Introduction	3
I.2. Le modèle de l'Atome	4
I.2.1. Couches électroniques	5
I.2.2. Transitions électroniques	7
I.2.2.1. Transition entre les couches	7
I.2.3. Loi de Moseley.....	8
I.2.4. Règles de sélection.....	8
I.2.5. Notation de Siegbahn.....	9
I.3. Type des Rayonnements	9
I.3.1. Rayonnements électromagnétique	10
I.3.1.1. Rayonnements électromagnétiques non ionisant	10
I.3.1.2. Rayonnements électromagnétiques ionisant	11
I.3.2. Rayonnements particulaire	12
I.3.2.1. Rayonnements particulaire ionisée directement (masse et charg)	12
I.3.2.2. Rayonnements particulaire ionisants indirectement (masse et charge nulle)	
.....	12
I.4. Interactions rayonnement- matière	13
I.4.1. Interaction particule – matière	13
I.4.2. Interaction RX et R γ (photons) avec matière	14
I.4.2.1. La diffusion élastique.....	15
I.4.2.2. La diffusion inélastique	15
I.4.2.3. L'effet photoélectrique	16
I.4.2.4. Production (création) de pair	17
I.4.3. Compétition entre les trois effets	18
I.4.4. Atténuation dans la matière (la perte d'énergie)	19
I.4.5. Couche de demi-atténuation	19
I.5. La probabilité de transfert lacunaire	20
I.5.1. Excitation et Désexcitation.....	21
I.5.1.1. Excitation et ionisation	21
I.5.1.2. Désexcitation	21
I.5.2. Les transitions radiatives	21
I.5.2.1. Fluorescence des rayons X	21
I.5.2.2. Principes de la fluorescence X	22
I.5.3. Les transitions non- radiatives	23
I.5.3.1. L'effet Auger et les transitions Coster-Kronig	23
I.5.3.2. Principe de l'effet Auger	24
I.6. Rendement de fluorescence.....	25

I.6.1. Le rendement de fluorescence en absence et en présence de transitions de Coster-Kronig	25
I.7. La section efficace	27
I.7.1. Calcul des largeurs	30
I.8. la relation entre η_{KL} et $\omega_K, \frac{K_{\beta}}{K_{\alpha}}$	30
Références Bibliographiques.....	31

CHAPITRE II

Calcul semi-empirique du probabilités de transfert lacunaire de la couche k (η_{KL}) des elements de numéro atomique $19 \leq z \leq 92$

II.1. Introduction	33
II.2. Probabilité de transfert lacunaire(η_{KL})	34
II.2.1. Les transitions radiatives.....	34
II.2.1.1. Dans la couche K	34
II.2.1.2. Dans la couche L	35
II.2.2. Les éléments dans tableau périodique	35
II.2.2.1. Les métaux alcalins	36
II.2.2.2. Les métaux alcalino-terreux	36
II.2.2.3. Les terreux (La famille de Bore)	37
II.2.2.4. Les Carbonides (la famille du carbone)	37
II.2.2.5. Les azotides	38
II.2.2.6. Les chalcogènes (sulfurides)	38
II.2.2.7. Les Halogènes.....	38
II.2.2.8. Les gaz nobles (rares)	39
II.2.2.9. Les éléments de transition	39
II.2.2.10. Les lanthanides	40
II.2.2.11. Les actinides	40
II.3. Base de donnée.....	41
II.3.1. La valeur moyenne pondérée et l'écart type.....	41
II.4. Méthode du calcul	48
II.4.1. Méthode moindre carrée	48
II.4.1.1. Approximation polynomiale de degré 03	49
II.4.2. Méthode Semi-empirique	50
II.5. Discussion et comparaison des résultats	53
References Bibliographies	57
Conclusion générale	61



INTRODUCTION GENERALE

La physique est une discipline qui cherche à comprendre les lois fondamentales de l'univers en étudiant la matière, l'énergie et leurs interactions. Elle explore une vaste gamme de phénomènes, allant des objets macroscopiques tels que les planètes et les étoiles, jusqu'aux particules subatomiques comme les quarks et les électrons.

La physique atomique est une branche de la physique moderne qui se concentre spécifiquement sur l'étude des atomes, qui sont les unités de base de la matière. Elle explore les caractéristiques des atomes, leurs interactions entre eux et avec le rayonnement. Un atome est composé d'un noyau central qui contient des protons chargés positivement et des neutrons sans charge électrique. Autour du noyau, des électrons chargés négativement orbitent à grande vitesse. L'interaction électromagnétique entre les électrons et le noyau détermine la stabilité de l'atome et ses propriétés chimiques. Les électrons tournant autour du noyau existent à différents niveaux d'énergie et un atome peut être dans un état stable lorsque tous les niveaux d'énergie sont occupés par des électrons. Mais, sous effet de la particule ou rayon, l'atome est ionisé et laissé dans un état d'excitation, c'est-à-dire qu'il devient dans un état instable (création un trou). La désexcitation se fait par une transition électronique (remplissage de trou) un électron d'un niveau plus élevé descend. L'atome tend à retrouver son état stable par émission radiative des rayons X ou par des processus non radiatifs d'Auger ou de Coster-Kronig.

La probabilité transfert lacunaire est définie comme le nombre de trous qui apparaissent dans la couche supérieure après leur disparition de la couche intérieure.

Dans ce mémoire, on a présenté la probabilité transfert lacunaire entre les deux couches K et L, et l'on a calculé les valeurs semi-empirique des probabilités de transfert lacunaire de la couche K (η_{KL}) pour les éléments de numéro atomique ($19 \leq Z \leq 92$).

Ce mémoire est divisé en deux chapitres :

- ❖ Dans le premier chapitre, nous présentons un rappel théorique sur quelques paramètres atomiques : fluorescence X et effets Auger, transition de Coster-Kronig, rendement de fluorescence, probabilité de transfert lacunaire et sections efficaces. Et, nous avons expliqué interaction rayonnement- matière.

- ❖ Le deuxième chapitre est consacré au calcul semi-empirique de la probabilité de transfert lacunaire de la couche K (η_{KL}). Le calcul est basé sur les valeurs moyennes pondérées de données expérimentales de la base de données (Rebouli, 2022). Nous avons pu trouver de nouvelles valeurs semi-empiriques de la probabilité de transfert lacunaire (η_{KL}) des éléments de numéro atomique $19 \leq Z \leq 92$.

CHAPITRE I

Les paramètres atomiques



I.1. Introduction

L'atome est un modèle théorique qui explique la structure de base de la matière. Les modèles de l'atome ont évolué au fil du temps et la compréhension scientifique de cette minuscule particule a évolué. Ce concept est apparu pour la première fois au IV^e siècle av. J.-C., lorsque le philosophe grec Démocrite croyait que l'atome est l'unité de base de la matière et ne peut être divisé en parties plus petites.

1.2. Le modèle de l'Atome

En 1803, John Dalton a développé la théorie de l'atome et a suggéré que les atomes sont de petits corps indivisibles et différents par la forme, puis il a développé le premier modèle de l'atome, car il supposait l'existence de corps solides et les atomes homogènes comme une base pour la matière (Le Sech et Ngô, 2010).

En 1897, Joseph Thomson a découvert une particule et, grâce à ses expériences, il a été en mesure de prouver que l'atome est divisible et est constitué de particules plus petites, appelées électrons. Bien que le modèle de Thomson ait réussi à exprimer l'électron, ce modèle a rapidement été prouvé faux par les résultats d'expériences menées par Hans Geiger et Ernst Marsden sous la supervision d'Ernest Rutherford. Il a émis l'hypothèse que le noyau d'un atome est constitué de particules chargées positivement appelées protons. Il a développé un modèle qui ressemblait au système solaire. Mais ce modèle présente quelques problèmes. Le premier problème est que les particules à charge positive sont toujours attirées vers les particules à charge négative. Avec la rotation continue de l'électron autour du noyau, l'énergie est perdue, ce qui signifie qu'au fil du temps, elle est resserrée par le noyau et son trajet devient hélicoïdal et tombe sur le noyau et l'atome s'effondre, et avec cette perte, les électrons devraient émettre de l'énergie sous la forme d'un spectre continu, ce qui peut entraîner un arc-en-ciel. Mais lorsque les scientifiques ont examiné le spectre produit par les atomes gazeux excités, ils ont remarqué une série de lignes de lumière de couleurs différentes séparées par des espaces noirs. Ces spectres générés par ces atomes excités caractérisaient chacun des éléments (Le Sech et Ngô, 2010).

En 1913, Niels Bohr a développé un nouveau modèle de l'atome appelé le modèle de la couche électronique. Ce modèle est caractérisé par l'existence de niveaux d'énergie séparés dans lesquels les électrons tournent et des orbites fixes autour du noyau. Lorsqu'un électron se déplace sur son orbite, l'énergie de l'atome ne change pas. Si l'atome gagne de l'énergie, l'électron sautera sur une orbite d'énergie plus élevée et plus éloignée du noyau. Après cela, la théorie de la mécanique quantique en 1926 est apparue, car elle a montré que l'électron n'est pas seulement une petite particule tournant autour du noyau. Au contraire, il se propage autour du noyau, et nous l'appelons le nuage électronique. Ainsi, nous sommes arrivés à la théorie moderne de l'atome, ce qui

signifie que le noyau est composé de protons chargés positivement et de neutrons chargés neutres entourés d'un nuage d'électrons chargé négativement (Meddough, 2018).



Figure 1.1 : l'évolution du modèle de l'atome.

1.2.1. Couches électroniques

L'atome est constitué d'un noyau, contient des nucléons (protons, symbole p et neutrons, symbole n) avec une charge $(+Ze)$, où son symbole est $(\overset{A}{Z}X)$. Des électrons (symbole e^-) existent sur des couches (**K, L, M, N, O...**) qui gravitent autour du noyau, il est à noter que les électrons n'occupent pas le même niveau d'énergie selon le principe d'exclusion de Pauli, car ils sont répartis en niveaux selon $2n^2$ C'est nombre maximal d'électrons de certaines couches.

A : c'est le nombre de masse

Z : est le numéro atomique (qui est le nombre de protons et électrons).

Tableau I.1 : la masse est chargée des particules.

Symbole	p	e^-	n
La masse (Kg)	1.67×10^{-27}	9.10×10^{-31}	1.67×10^{-27}
Charge en Coulomb (C)	$+1.6 \times 10^{-19}$	-1.6×10^{-19}	Neutre

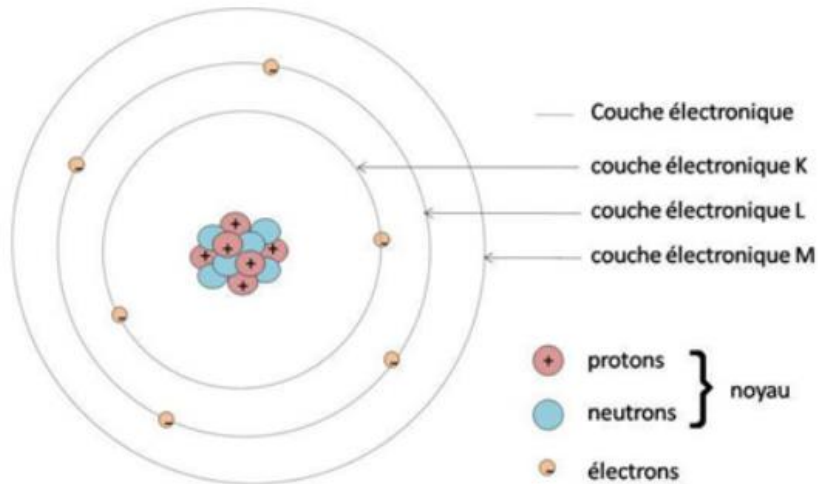


Figure I.2 : atomes et leurs couches électroniques.

État quantique d'un électron dans un atome est défini par quatre nombres quantiques principal n et azimutal l et magnétique m et le spin s :

❖ **LE NOMBRE QUANTIQUE PRINCIPAL n**

Correspond aux valeurs possibles de la distance au noyau, il définit la couche électronique. Les couches successives en partant du noyau sont notées K, L, M, N ..., pour les valeurs respectives $n = 1, 2, 3, 4 \dots$

❖ **LE NOMBRE QUANTIQUE AZIMUTAL l**

Correspond aux valeurs possibles du moment angulaire L de l'électron par rapport au noyau. Il détermine la forme de l'orbitale et définit les sous-couches qui sont notées s, p, d, f..., pour des valeurs respectives $l = 0, 1, 2, 3 \dots$ avec $0 \leq l \leq n - 1$.

❖ **LE NOMBRE QUANTIQUE MAGNETIQUE m**

Correspond aux valeurs possibles du moment magnétique M de l'électron dans un champ magnétique. Il ne peut prendre que les valeurs données par la relation $-l \leq m \leq l$.

❖ **LE NOMBRE QUANTIQUE DE SPIN s**

Est caractéristique de chaque électron d'une orbitale, en outre par son s correspondant au moment angulaire propre sous spin de l'électron. Il ne peut prendre que les deux

valeurs opposées $s = \pm \frac{1}{2}$. Une orbitale comprend deux états, correspondant respectivement à $(s = +\frac{1}{2})$ et $(s = -\frac{1}{2})$ (Bensaci and Benchaib, 2014).

1.2.2. Transitions électroniques

1.2.2.1. Transition entre les couches

Lorsqu'un électron est retiré de sa coque E_x (par l'effet d'une particule chargée ou d'un photon entrant...), il laisse un vide, ce qui permet à l'électron de passer dans cette coque depuis la couche supérieure E_y jusqu'à combler le vide. Cela conduit à l'émission d'un rayonnement électromagnétique dont la fréquence est :

$$\nu = \frac{|E_x - E_y|}{h} \tag{I.1}$$

Avec h est la constante de Planck ($h = 6.626.10^{-34} \text{J s}$).

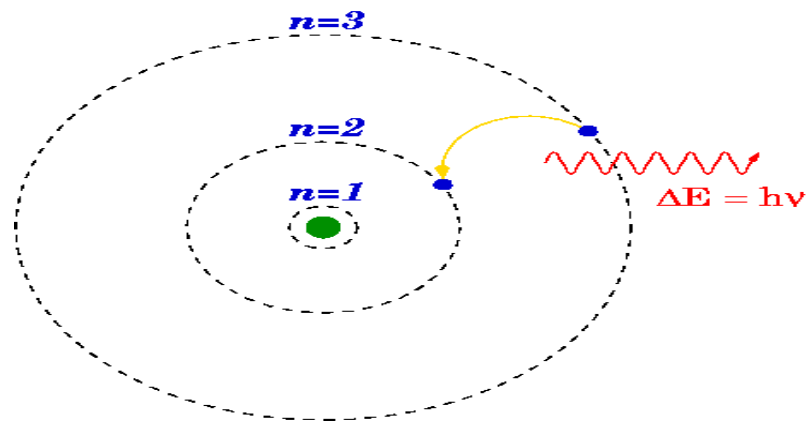


Figure I.3 : transition entre les niveaux.

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

- ❖ Si un électron de la couche K est arraché et remplacé par un électron de la couche L, une raie appelée est K_{α} émise, et pour l'électron qui arrive sur la couche K provient de la couche M, la raie correspondante est appelée K_{β} Ainsi de suite.
- ❖ Si trou se trouve sur la couche L, les électrons en provenance des couches M, N, O engendreront respectivement des raies $L_{\alpha}, L_{\beta}, L_{\gamma}$. Donc, pour différencier les rayons X provenant de ces sous-couches, les raies sont nommées $K_{\alpha 1}, K_{\alpha 2}, K_{\beta 1}, L_{\alpha 1}, L_{\gamma 1}, \dots$ (Bendjedi, 2018).

1.2.3. Loi de Moseley

Développé par Henry Moseley, c'est une loi qui décrit les propriétés du spectre (par exemple $K_{\alpha 1}$).

Loi de Moseley pour montrer la fréquence des spectres :

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

Où K_1 et K_2 Sont des constantes ayant des valeurs définies pour chaque raie (constante d'écran) (Meddah, 2021).

1.2.4. Règles de sélection

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

$$\begin{cases} \Delta n = \pm 0 \\ \Delta l = \pm 1 \\ \Delta j = 0, \pm 1 \end{cases} \tag{I.3}$$

Où l et j sont respectivement les nombres quantiques associés aux moments angulaires orbitaux et totaux de l'électron en transition (Beladel, 2015). Le nombre quantique de moment angulaire total j , il vaut $j = |l \pm s|$. Il quantifie le moment angulaire total J de l'électron.

Tableau I.2 : les nombres quantiques et les nombres maximaux d'électrons.

Niveau d'énergie	Couche	Sous-couche	Azimutal ℓ ($0 \leq \ell \leq n - 1$)	Magnétique $m\ell$ ($-\ell \leq m\ell \leq \ell$)	nombre maximal d'e ⁻	Moment angulaire total (j)
1	K	K (1S)	0	0	2e ⁻	1/2
2	L	L ₁ (2S)	0	0	8e ⁻	1/2
		L ₂ (2p)	1	{-1, 0, 1}		1/2
		L ₃ (2p)				3/2
3	M	M ₁ (3S)	0	0	18e ⁻	1/2
		M ₂ (3p)	1	{-1, 0, 1}		1/2
		M ₃ (3p)				3/2
		M ₄ (3d)	2	{-2, -1, 0, 1, 2}		3/2
		M ₅ (3d)				5/2
4	N	N ₁ (4S)	0	0	32e ⁻	1/2
		N ₂ (4p)	1	{-1, 0, 1}		1/2
		N ₃ (4p)				3/2
		N ₄ (4d)	2	{-2, -1, 0, 1, 2}		3/2
		N ₅ (4d)				5/2
		N ₆ (4f)	3	{-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3}		5/5
		N ₇ (4f)				7/2

1.2.5. Notation de Siegbahn

La notation de Siegbahn consiste à utiliser la lettre correspondante à la raie concernée. Si l'électron qui comble la lacune de la couche vient de la couche par exemple, la raie émise est notée suivie d'un caractère ayant un numéro, un indice. Tandis que, dans la notation IUPAC, on désigne la raie par ces deux couches (ou sous-couches) mises en jeu. Ainsi, cette même raie, notée en notation de Siegbahn, s'écrit en notation IUPAC (Rebouli, 2022).

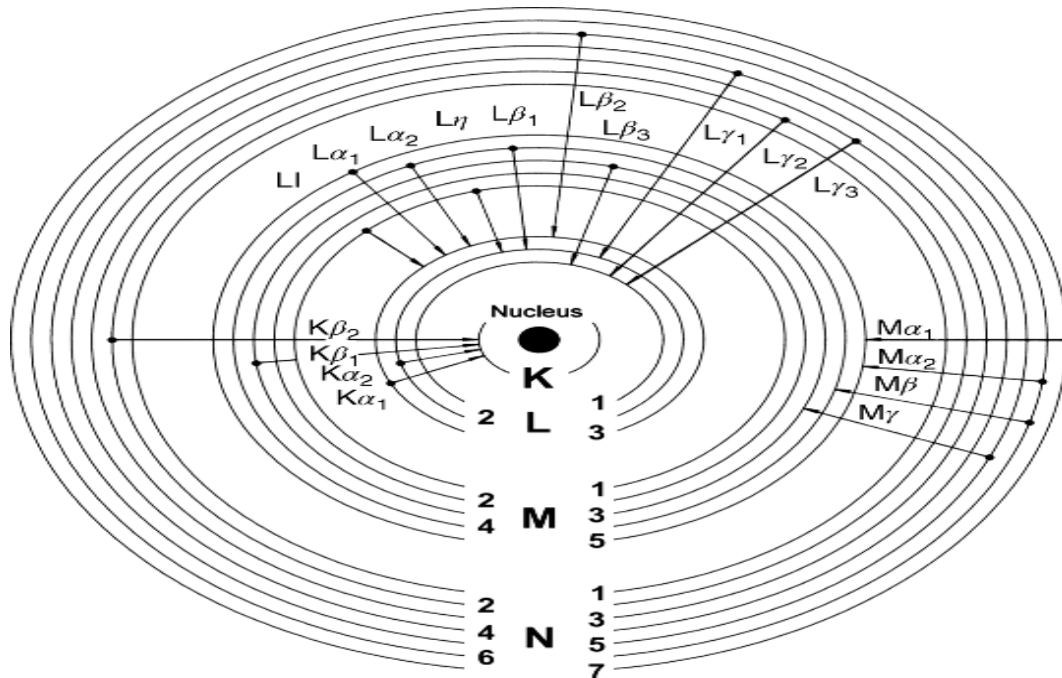


Figure I.4 : les transitions et notations de Siegbahn (Barahona, 2015).

Cette notation empirique est très utilisée en spectrométrie des rayons X. Dans une série donnée en nomenclatures, l'émission X correspondant à la transition d'un électron d'une couche quelconque vers une autre couche telle que constitue la raie. Pour identifier les différentes raies qui correspondent à différentes transitions électroniques vers une même couche, deux notations sont généralement utilisées : la notation de Siegbahn et la notation IUPAC (Rebouli, 2022).

1.3. Les Types des Rayonnements

Le Rayonnement C'est un type de propagation d'énergie à travers l'espace sous forme d'ondes électromagnétiques ou de particules, On peut classer ces rayonnements en deux types :

I.3.1. Rayonnements électromagnétique

Il s'agit d'un champ magnétique qui s'étend dans le vide sous forme d'ondes (masse nulle), caractérisée par ses différentes longueurs d'onde et ses fréquences comme (UV, RX, IR, micro-onde.....).

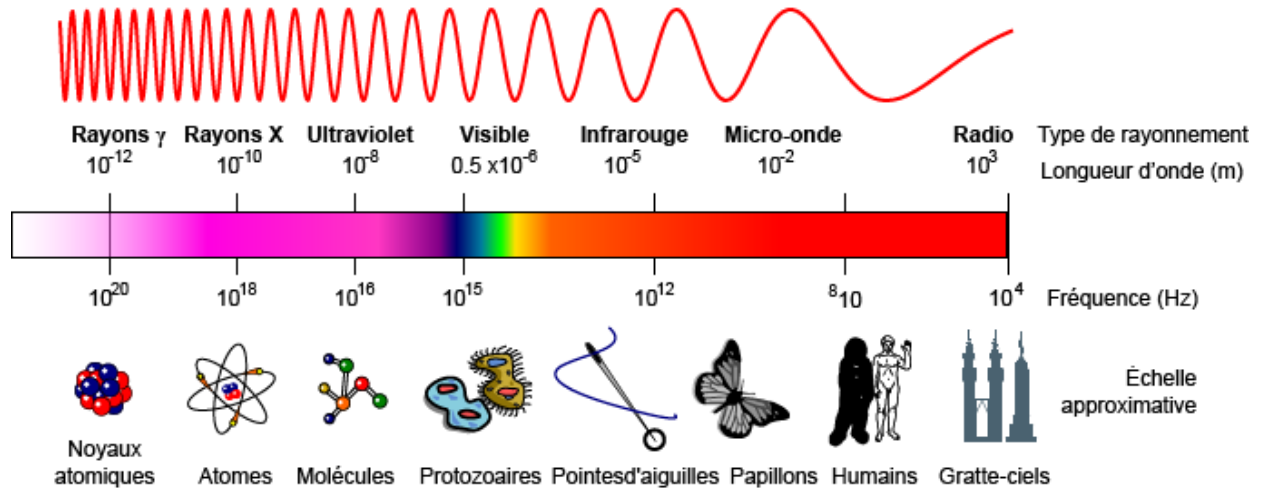


Figure I.5: Les rayonnements électromagnétiques.

Il existe deux types de rayonnements électromagnétiques :

I.3.1.1. Rayonnements électromagnétiques non ionisant

Ce sont des rayons dont l'énergie est insuffisante pour ioniser les atomes de la matière

$$(E < E_1) \tag{I.4}$$

E : l'énergie de photon (rayon).

E_1 : l'énergie de liaisons de e^- .

❖ **Les ondes radio :**

Ce sont des ondes électromagnétiques caractérisées par leur grande longueur d'onde (>1 m) et sont générées par le courant alternatif, où elles sont utilisées dans les communications radio et radio...etc.

❖ **Les micro-onde**

Ce sont des ondes électromagnétiques leur longueur d'onde ($1 - 10^{-2}$ m) et sont générées par le courant alternatif, où il est utilisé dans les micro-ondes domestiques et certaines applications astronomiques ... etc.

❖ *Infrarouge*

Ce sont des ondes électromagnétiques leur longueur d'onde ($10^{-2} - 10^{-5} \text{ m}$) et sont générés par la vibration des atomes et les molécules dans le corps sont utilisées dans le chauffage, le chauffage et l'imagerie thermique.... etc.

❖ *Visible*

Ce sont des ondes électromagnétiques leur longueur d'onde ($10^{-5} - 10^{-7} \text{ m}$) et se composent d'une gamme de couleurs primaires, à savoir le rouge, l'orange, le jaune, le vert, le bleu et le violet. Les rayons visibles sont émis par le soleil ou d'autres sources lumineuses et sont utilisés dans l'éclairage, les jeux et l'animation.... etc.

❖ *Ultraviolet*

Ce sont des ondes électromagnétiques leur longueur d'onde ($10^{-7} - 10^{-8} \text{ m}$), il produit le rayonnement ultraviolet du soleil et utilise le rayonnement dans le traitement de l'eau.....etc.

1.3.1.2. Rayonnements électromagnétiques ionisant

Ce sont les rayons dont l'énergie provoque l'ionisation des atomes du matériau, où les rayons ($RX, R\gamma$) sont considérés comme ionisants indirects parce qu'ils sont électriquement neutres, car ils transfèrent une partie ou la totalité de leur énergie en une seule réaction à particules chargées du milieu.

❖ *Rayon X*

Les rayons X ont été découverts en 1895 par le physicien Wilhelm Roentgen, après avoir remarqué l'effet des films photographiques avec des rayons sortant du tube cathodique sur lequel il menait des expériences, il a ensuite analysé ces rayons et a dit qu'ils étaient beaucoup plus petits que les rayons lumineux et les a appelés rayons X parce qu'ils sont inconnus et que l'inconnu en mathématiques est X (Derradj, 2019).

Donc les rayons X sont des ondes électromagnétiques (Et on peut dire que ce sont des photons) leur longueur d'onde ($10^{-8} - 10^{-12} \text{ m}$) Ils sont produits lors de la désexcitation d'un atome, et utilisés dans la radiographie...etc.

L'énergie portée par ces photons est donnée par :

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} \quad (\text{I.5})$$

❖ Rayon γ

Sont des ondes électromagnétiques (Et on peut dire que ce sont des photons) leur longueur d'onde ($10^{-12} - 10^{-15}\text{m}$) Ils sont libérés lors de processus nucléaires, tels que la fusion nucléaire et la désintégration radioactive des atomes..., et sont utilisés dans des applications nucléaires....etc.

❖ Photons d'annihilation

Résultant de l'annihilation d'un positron avec un électron.

❖ Photons de freinage

Émis pendant la décélération d'électrons en matière.

I.3.2. Rayonnements particulaire

C'est le rayonnement émis par les particules : protons, électrons, neutrons et particules alpha..., et il existe deux types de rayonnements particulaire.

I.3.2.1. Rayonnements particulaire ionisée directement (masse et charge)

C'est le rayonnement émis par les particules chargées : particules légères telles que les électrons et autres particules lourdes telles que les protons, les particules alpha et les ions lourds, qui ont une énergie qui provoque l'ionisation des atomes directement car cette énergie est déposée en une seule étape, à travers le Coulomb processus d'interaction entre la particule qui tombe et les électrons en orbite (Tehami, 2018).

I.3.2.2. Rayonnements particulaire ionisants indirectement (masse et charge nulle)

C'est le rayonnement émis par les particules (neutrons) dont l'énergie provoque l'ionisation des atomes du matériau, sont considérés comme ionisants indirects parce qu'ils sont électriquement neutres, et car ils transfèrent une partie ou la totalité de leur énergie en une seule réaction à particules chargées du milieu.

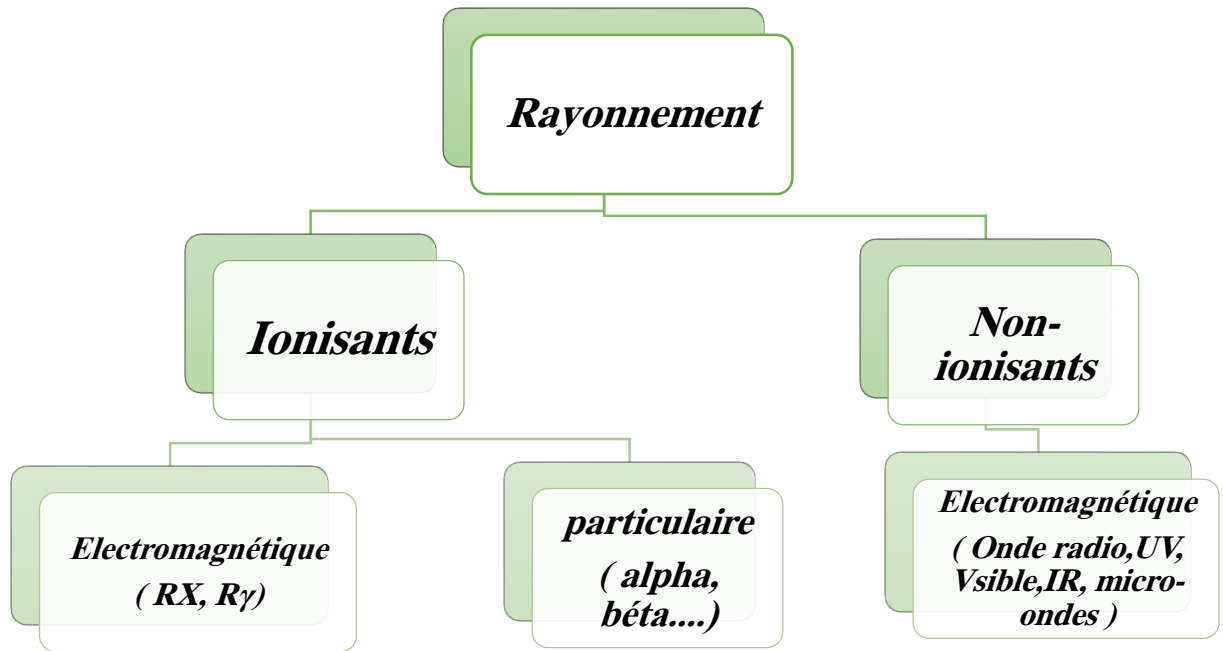


Figure I.6: Constitution des rayonnements (ionisant, non ionisant).

I.4. Interactions rayonnement- matière

Interactions, ce sont des processus par lequel l'énergie ou la direction des particules est modifiée, en transférant l'énergie du rayonnement incident au milieu traversé.

I.4.1. Interaction particule – matière

En traversant la matière, les particules chargées interagissent principalement avec les électrons et très rarement avec le noyau. En raison des collisions de particules avec des électrons atomiques, ils déposent leurs énergies soit dans des excitations à des niveaux d'énergie plus élevés. Les atomes peuvent retourner à leurs états fondamentaux en émettant des photons. Les particules peuvent mener des interactions avec des noyaux, si l'interaction se déroule via la force coulombienne, la perte d'énergie serait très faible, si l'interaction se produit par l'intermédiaire de la force coulombienne, la perte d'énergie serait importante, mais celle-ci caractérise par une très courte portée de l'ordre de Fermi, aussi la plupart de l'énergie déposée par une particule chargée dans un milieu est attribuée à ses collisions avec les électrons atomiques (Rebouli, 2022).

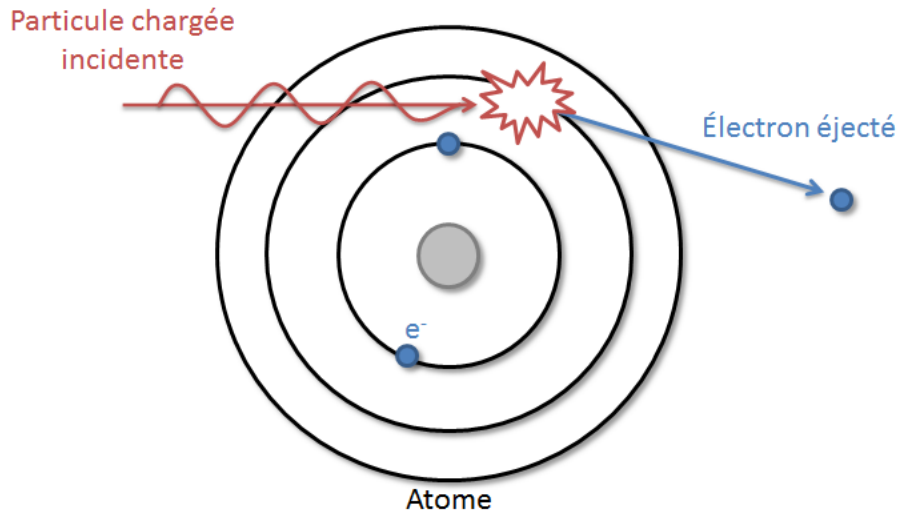


Figure I.7: Interaction des particules chargées avec la matière.

I.4.2. Interaction RX et $R\gamma$ (photons) avec matière

Les photons peuvent avoir diverses interactions avec les électrons ou les noyaux de la matière. Les principaux processus d'interaction des photons avec la matière sont :

Avec les électrons :

- ✚ L'effet photoélectrique.
- ✚ La diffusion Rayleigh et Thomson (élastique).
- ✚ La diffusion Compton (inélastique).

Avec les noyaux :

- ✚ La production de paires dans un champ coulombien.

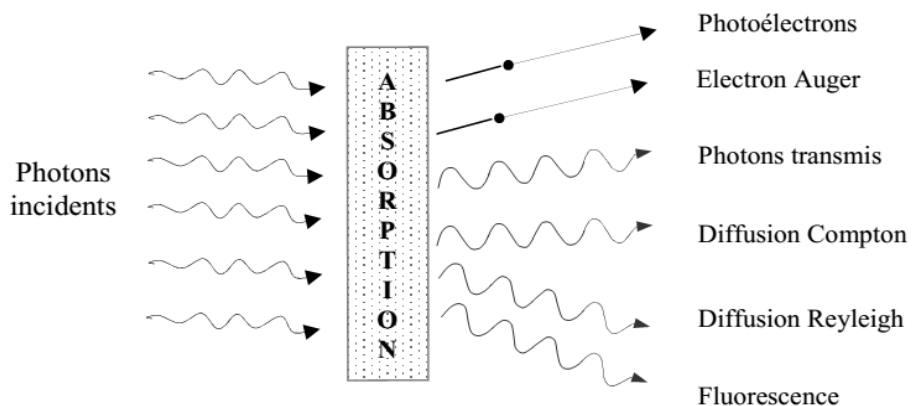


Figure I.8 : Différents processus d'interaction photons – matière
(Bensaci et Benchaib, 2014).

I.4.2.1. La diffusion élastique

Lors d'une diffusion élastique, l'énergie cinétique totale du système est conservée par l'interaction. Durant celle-ci, une partie de l'énergie cinétique incidente est transférée au noyau (Richi, 2012).

Il existe deux types de diffusion : la diffusion Rayleigh et la diffusion Thomson.

❖ La diffusion Rayleigh Thomson

La diffusion d'un photon de faible énergie s'effectue sur un électron, pour que ce soit l'ensemble de l'atome qui absorbe le recul. Le transfert d'énergie à l'atome est alors négligeable : le photon est dévié de sa trajectoire initiale sans perte d'énergie. La diffusion est dite élastique ou encore cohérente. Ce type d'interaction est d'autant plus fréquent les éléments lourds et l'énergie des photons est faible (Stan, 2010).

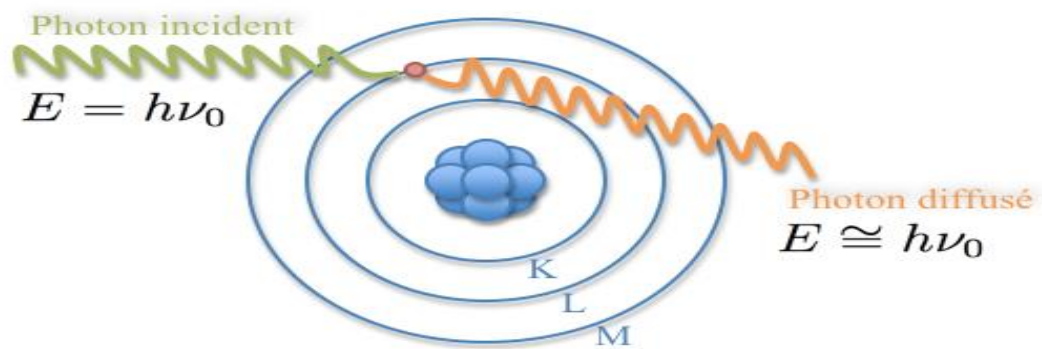


Figure I.9: La diffusion Rayleigh (diffusion élastique) (Stan, 2010).

I.4.2.2. La diffusion inélastique

Dans ce cas il y a transfert d'une partie de l'énergie incidente vers le noyau cible. Ce dernier subit alors un réarrangement interne le menant vers un état excité qui se désexcitera par la suite par émission de rayonnement (Richi, 2012).

❖ La diffusion Compton

C'est la diffusion du photon incident due à sa collision avec un électron, où il provoque une diminution de l'énergie d'un photon et le transfert d'une partie de celle-ci à l'électron diffusant. Cela conduit à un allongement de la longueur d'onde λ et à une modification de la direction du trajet des photons, car cet allongement de λ entraîne une modification de l'énergie. Dans l'effet Compton, le photon incident se comporte, comme une particule possédant une quantité de mouvement p donnée par la relation de

cinématique relativiste qui associe à toute particule de vitesse v ($v = c$ pour le photon dans le vide) et d'énergie la quantité de mouvement : (Larfance, 2015)

$$p = \frac{E v}{c^2} = \frac{h v}{c} \tag{I.6}$$

La direction de la vitesse du photon diffusé fait un angle avec la direction du faisceau incident. Il possède une énergie plus petite après la collision et la différence d'énergie est transmise à l'électron qui est appelé électron de recul. Si (λ_0, ν_0) (λ_1, ν_1) désignent respectivement les longueurs d'onde et fréquences des photons incidents et diffusés, on peut établir la relation de Compton donnant la différence de la longueur d'onde des photons incidents et diffusés. Elle est indépendante de l'énergie initiale du photon et il vaut. Schématise ce phénomène qui peut s'écrire sous la forme :

(Tehami, 2018)

$$\lambda_1 - \lambda_0 = \frac{h(1 - \cos \theta)}{m_e c} \tag{I.7}$$

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

m_e : est la masse de l'électron

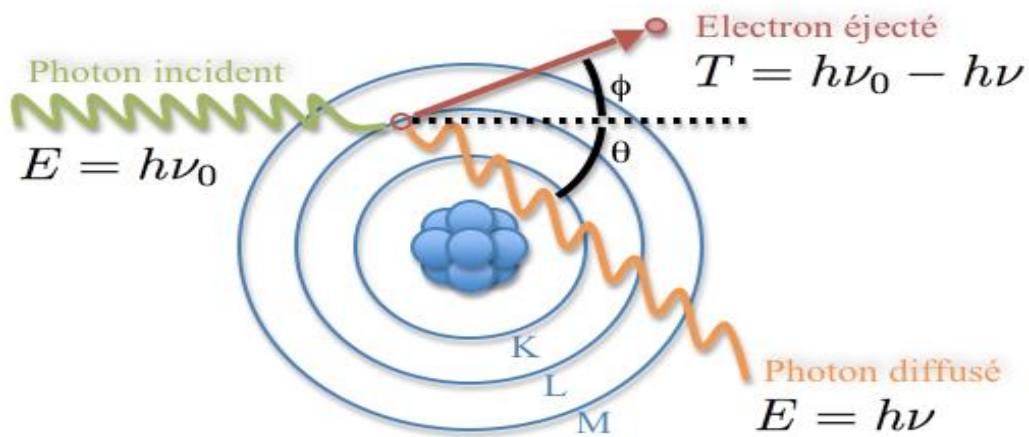


Figure I.10 : La diffusion Compton (diffusion inélastique)

(Stan, 2010).

I.4.2.3. L'effet photoélectrique

Un phénomène physique durant lequel un matériau émet des électrons lorsque est exposé à un rayonnement électromagnétique (photon), Si l'énergie initiale du photon

est supérieure à l'énergie d'ionisation de l'électron ($E_l < E_i$), ce dernier peut être ionisé et éjecté de l'atome avec une énergie cinétique (Larfance, 2015) :

$$T = h\nu_0 - E_l \quad (\text{I.8})$$

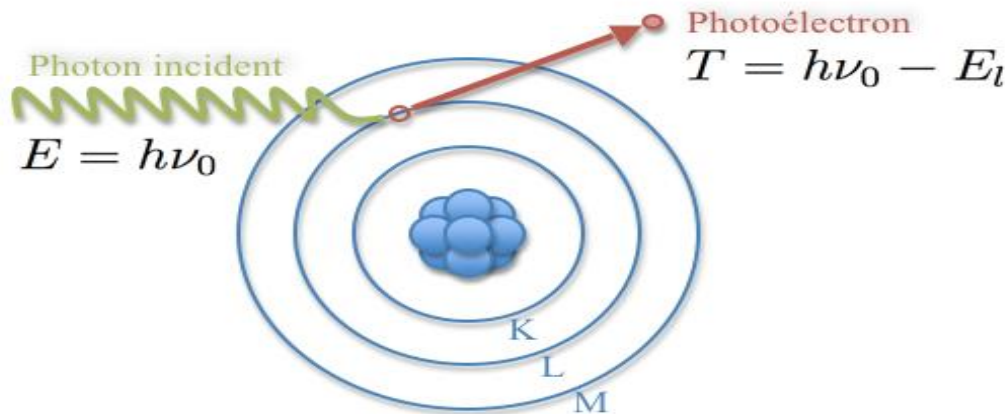


Figure I.11: L'effet photoélectrique (Stan, 2010).

I.4.2.4. Production (création) de paire

Lorsqu'un photon d'énergie $h\nu$ supérieure à deux fois la masse de l'électron (1,022 MeV) rencontre la matière, il peut y avoir le processus de matérialisation, c'est-à-dire la transformation de ce photon en deux particules qui sont un électron (e^-) et un positron (e^+) (antiparticule de l'électron e^-). L'énergie cinétique de l'électron créé est la même que celle du positron, elle est égale à :

$$E_{e^-} = E_{e^+} = \frac{1}{2} \cdot (h\nu - 2m_{e^-} \cdot c^2) \quad (\text{I.9})$$

Le processus de la matérialisation ne pourra pas se faire dans le vide. La présence de la matière est obligatoire (selon les lois de conservations d'énergie et d'impulsion). Le positron créé possède une courte durée de vie, donc après sa création, il interagit avec le premier électron qu'il rencontre, et donc s'annihilent en créant deux photons de 511Kev émis en sens opposés l'un de l'autre (Le Sech et Ngô, 2010).

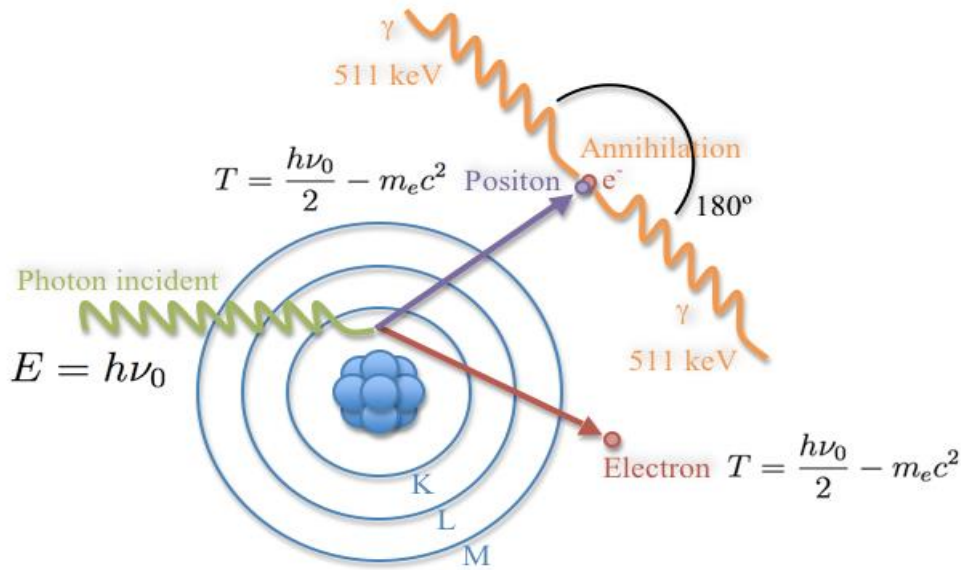


Figure I.12 : La production de paires (Stan, 2010).

1.4.3. Compétition entre les trois effets

La probabilité d'avoir un effet photoélectrique, un effet Compton ou de créer des paires dépend de l'énergie du photon et du support rencontré (Zidi, 2021).

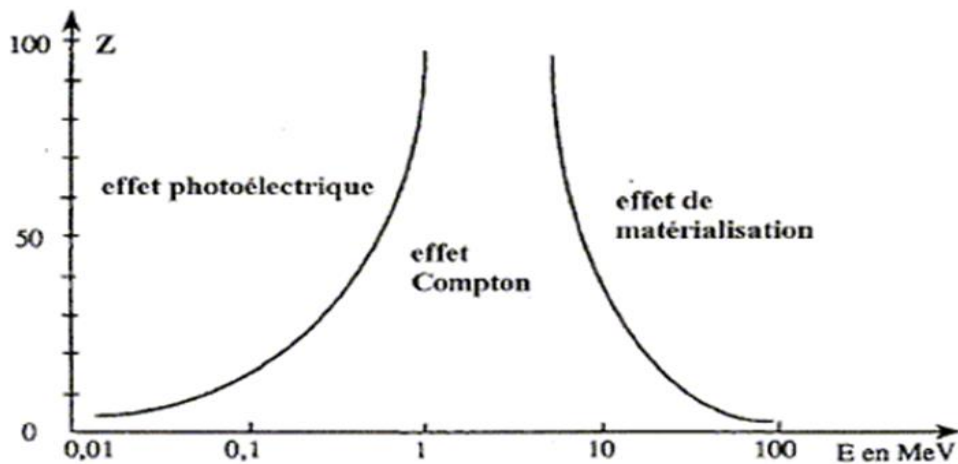


Figure I.13: Domaine de prédéminance de l'effet photoélectrique, effet Compton et production de pair (matérialisation) en fonction de Z du milieu et de l'énergie du photon (Zidi, 2021).

Une comparaison entre ces trois effets est présente sur la figure I.14 pour un domaine 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 (Zidi, 2021).

1.4.4. Atténuation dans la matière (la perte d'énergie)

L'atténuation du faisceau de photons incidents résulte de l'absorption des photons par l'effet photoélectrique, l'effet Compton et, si l'énergie des photons est suffisante, par la création de paires électrons-positrons. Si on appelle σ_{tot} la section efficace totale d'absorption des photons et si on désigne par σ, κ, τ sections efficaces d'absorption respectivement de l'effet photoélectrique, de l'effet Compton et de la création de paires, contributions respectives au coefficient d'absorption linéique des trois modes d'absorption de l'énergie des photons par la matière en fonction de l'énergie des photons qui peut s'écrire sous la forme :

$$\sigma_{tot} = \sigma + \kappa + \tau \tag{I.10}$$

μ : est le coefficient d'absorption linéique. Le nombre de photons transmis $N(z)$ est donné par une loi exponentielle décroissante :

$$N(z) = N_0 \exp(-\mu z) \tag{I.11}$$

Les valeurs des coefficients d'atténuation linéique décroissent avec l'énergie. Le coefficient d'atténuation (absorption) massique μ_m est défini par le rapport (Tehami, 2018):

$$\mu_m = \frac{\mu}{\rho} = \frac{\sigma_{tot} N}{M} \tag{I.12}$$

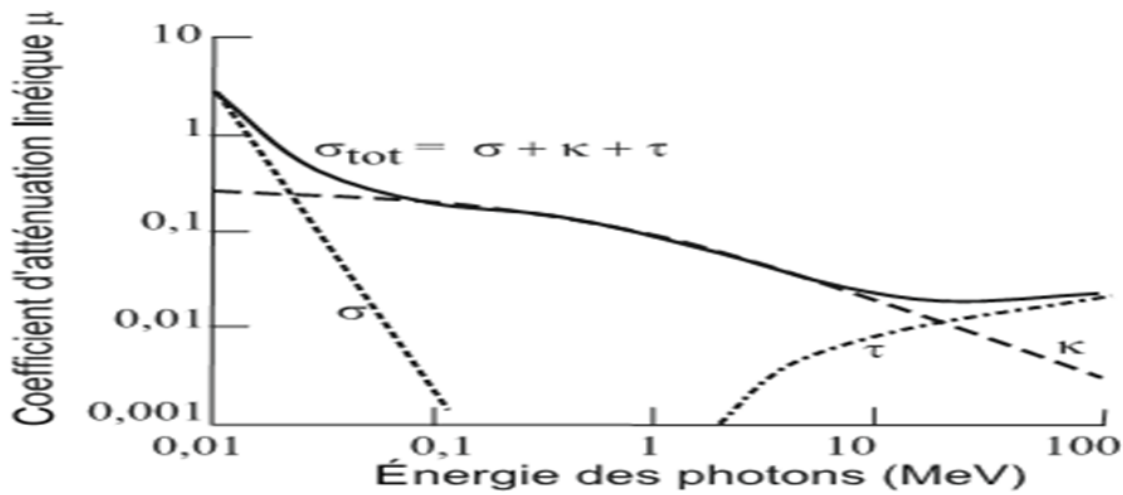


Figure I.14: Contributions respectives au coefficient d'absorption linéique des trois modes d'absorption de l'énergie des photons par la matière en fonction de l'énergie des photons (Tehami, 2018).

1.4.5. Couche de demi-atténuation

Le coefficient linéique d'atténuation est inversement proportionnel à une grandeur appelée couche de demi-atténuation, qui est l'épaisseur de matériau nécessaire pour

atténuer la moitié des photons incidents. En effet, en écrivant $\frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\mu CDA}$, il vient immédiatement (Rebouli, 2022) :

$$CDA = \frac{\ln 2}{\mu} \tag{I.13}$$

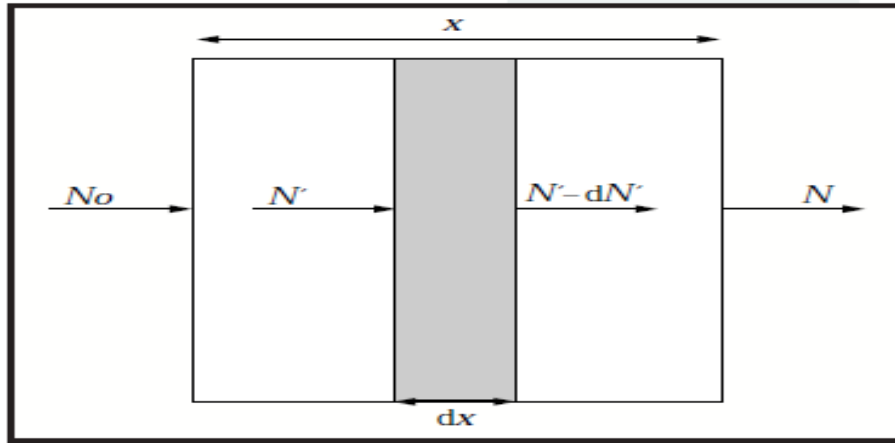


Figure I.15 : l’atténuation d’un faisceau de photons dans la matière (Rebouli, 2022).

I.5. La probabilité de transfert lacunaire

La lacune est connue pour être le trou laissé par l’électron après qu’il s’éjecte de son orbite après avoir utilisé des rayons gamma, des électrons de haute énergie, des ions optiques ou des ions lourds ... (ionisation) sur quelques couches, par exemple K. Cette lacune peut être transmise de la couche k vers les sous-couches L1, L2 ou L3 par des transitions non radiatives et radiatives. La transition non radiative, connue sous le nom de transition Auger, est significative dans les éléments en Z bas, d’autre part les transitions radiatives, connu sous le nom de fluorescence des rayons X, est important dans les éléments Z élevés (Mirji et al, 2015).

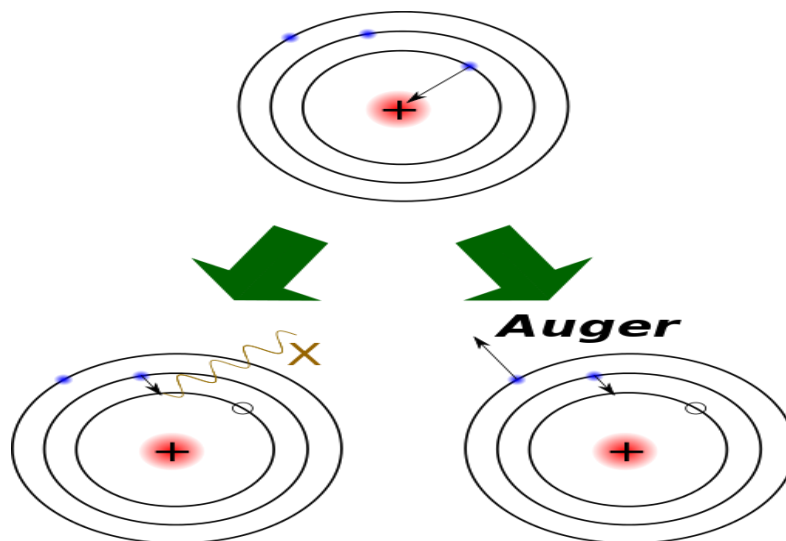


Figure I.16 : Réarrangement atomique suite à une éjection d’électron.

1.5.1 Excitation et Désexcitation

1.5.1.1. Excitation et ionisation

Dans un atome, les électrons sont disposés en couches (niveaux d'énergie). Plus la couche est proche du noyau, plus la liaison entre le noyau et l'électron est forte. Lorsqu'un photon interagit avec un atome, il est possible que les électrons reçoivent une énergie ($E_i < E_j$) qui leur permet de se libérer de leur orbite et de quitter l'atome, c'est ce qu'on appelle l'ionisation.

Mais lorsque cette énergie n'est pas suffisante pour provoquer l'ionisation ($E_i < E_1$), les électrons acquièrent cette énergie et les font se déplacer vers des orbites plus élevées et l'atome devient excité .

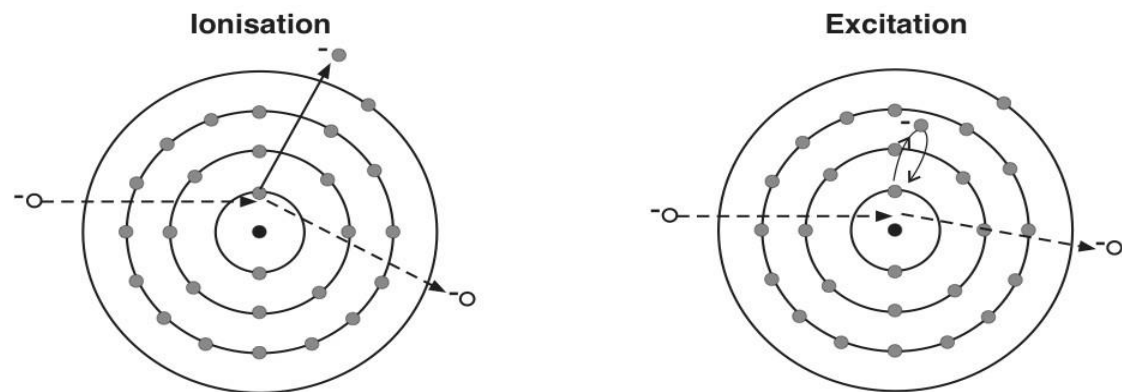


Figure I.17 : Collision avec ionisation et excitation.

1.5.1.2. Désexcitation

L'atome ionisé se trouve dans un état excité et instable. Le retour à l'état fondamental se fait par des transitions électroniques depuis les niveaux d'énergie supérieurs vers le niveau vacant, en suivant soit une désexcitation radiative (fluorescence), soit une désexcitation non radiative (effet Auger) (Derradj, 2019).

1.5.2. La transition radiative

Connu sous le nom de fluorescence des rayons X :

1.5.2.1. Fluorescence des rayons X

L'apparition d'une lacune dans la couche K conduit à la transmission d'électron des couches supérieures L et M ou N, où l'électron perdra de l'énergie, qui sera émise sous forme de photon. L'énergie de ce photon est dans la gamme de rayons X, égale à la différence d'énergie entre la couche intérieure et la couche supérieur : (Richard V. Murphy, Ph. D., 2010)

$$\Delta E_x = |E_k - E_{(L,M,N)}| \quad (\text{I.14})$$

✚ Cas de la couche K

La transition $K\alpha$: résultat d'émission radiative d'un électron de la couche L vers la couche K.

La transition $K\beta$: résultent d'émission radiative d'un électron de la couche M où N vers la couche K, et c'est dix transitions.

✚ Cas de la couche L

Si lacune survient dans la couche L, elle génère des transitions qui proviennent de trois couches supérieures M, N et O en fonction du lieu de lacune où il y a trois transitions principales $L\alpha$, $L\beta$, $L\gamma$.

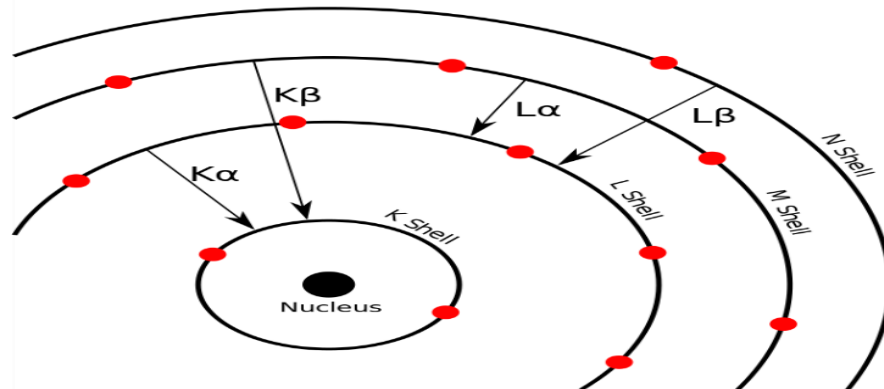


Figure I.18 : Les transitions radiatives.

1.5.2.2. Principes de la fluorescence X

Dans un analyseur FRX, l'échantillon est bombardé par des rayons X. Ceci produit l'émission d'électrons, de rayons X et de raies caractéristiques de rayons X. Certains rayons X interagissent avec les électrons des couches internes Y dans l'échantillon ce qui provoque leur éjection. Les trous créés dans la couche internes Y sont immédiatement remplis par les électrons tombant des couches externes X, où Y est un niveau plus externe que X. Chaque transition électronique émet un rayon X caractéristique (photon de fluorescence) dont l'énergie est égale à la différence d'énergie entre les deux couches d'élément : (Richard V. Murphy, Ph. D., 2010)

$$\Delta E = E_x - E_y \quad (\text{I.15})$$

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

$$\Delta E = E_K - E_{L_2} \tag{I.16}$$

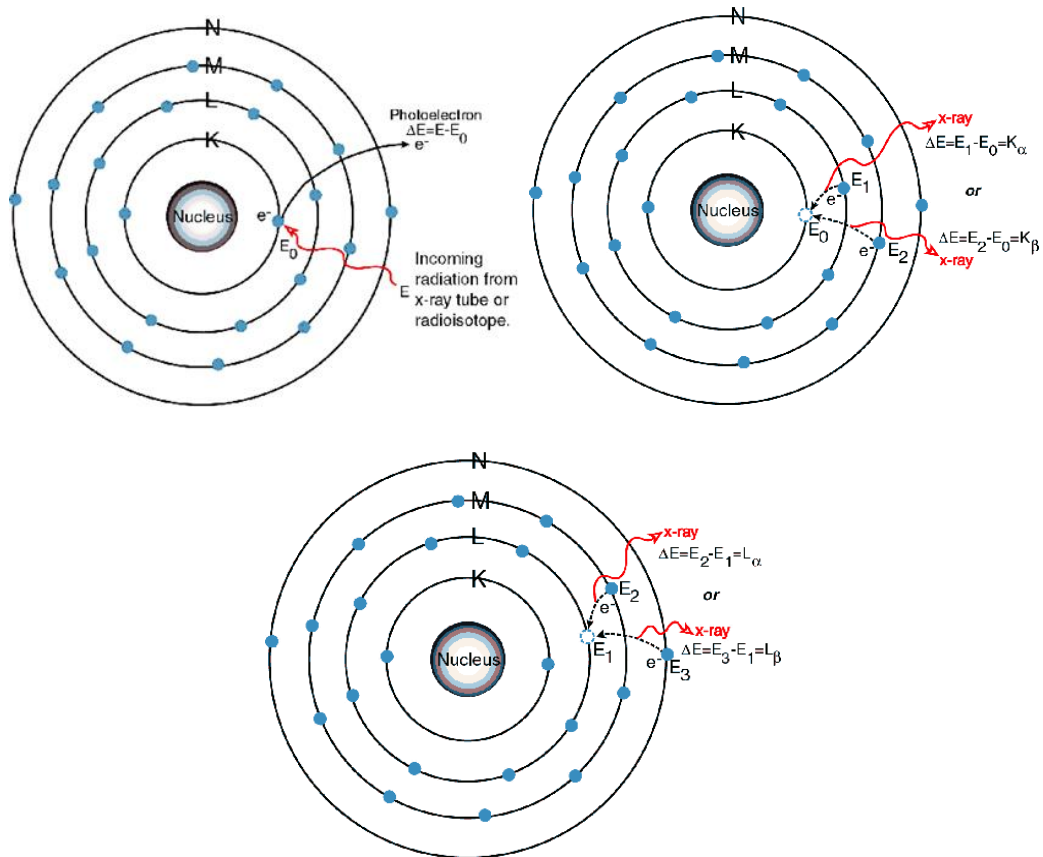


Figure I.19 : processus de fluorescence X.

1.5.3. Les transitions non- radiatives

Connue sous le nom de transition Auger

1.5.3.1. L'effet Auger et les transitions Coster-Kronig

L'apparition d'une lacune dans la couche (par exemple K) conduit à la transmission d'électron des couches supérieures (L et M ou N), où l'électron libère de l'énergie, qui est émise sous la forme d'un photon. Parfois, ce photon entre en collision avec l'électron dans une couche supérieure lors de sa sortie et éjecte l'électron et c'est l'effet Auger. Des transitions peuvent également se produire qui sont des transitions Coster-Kronig, inter-niveaux. Les transitions Coster-Kronig (inter-niveaux) étant en général plus rapides que les transitions inter-couches (radiatives ou non) il découle de ce phénomène que les lacunes produites sur les niveaux internes vont se retrouver dans une grande

proportion sur le niveau le plus externe d'une couche. Il existe une condition très rare appelée transitions Super Coster-Kronig où les trois électrons (émis par la réaction, ceux qui comblent l'espace et ceux émis par l'excitation) appartiennent au même niveau d'énergie (Derradj, 2019).

1.5.3.2. Principe de l'effet Auger

Une excitation extérieure arrache un électron de la couche E_1 . L'atome passe alors de son état d'énergie fondamental à un état d'énergie excité correspondant à l'ionisation de la couche E_1 . La désexcitation peut alors se faire de deux manières, soit par émission d'un photon, soit par émission d'un électron Auger, cette dernière étant la plus probable dans la gamme d'énergie (0 – 3 KeV). Dans ce cas, un électron de la couche E_2 comble le trou de la couche E_1 et l'énergie ainsi libérée est communiquée à un électron de la couche E_3 qui est alors émis, c'est l'électron Auger.

L'énergie de l'électron Auger correspond à la différence d'énergie entre les états énergétiques sous la forme : (Meddah, 2021)

$$E_{cin}(LMN) = E_L(L) - E_L(M) - E_L(N) \quad (\text{I.17})$$

$E_L(L)$ et $E_L(M)$: sont les énergies de liaison respectivement de l'électron L et de l'électron M .

$E_L(N)$: est l'énergie nécessaire à l'émission de l'électron N quand il y a déjà un trou sur M .

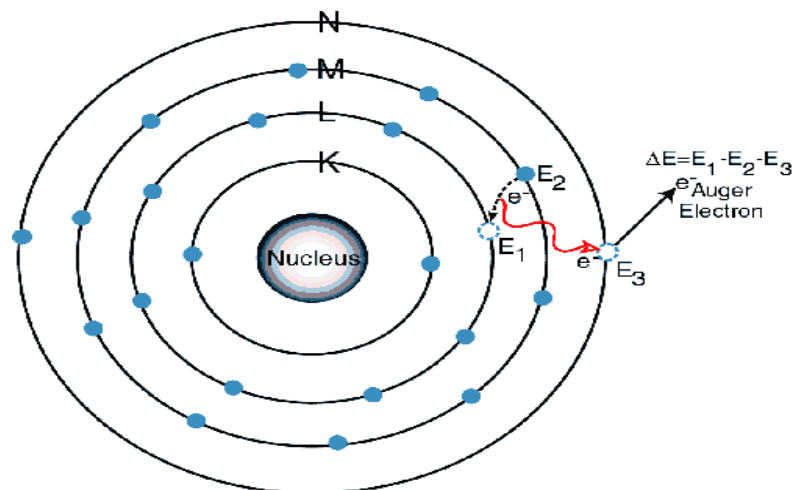


Figure I.20 : Représentation d'une transition Auger.

1.6. Rendement de fluorescence

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

$$\omega_K = \frac{N_X}{N} = \frac{N_X}{N_X + N_A} \tag{I.18}$$

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

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

On peut écrire le rendement de fluorescence par d'autre relation qui est relié avec la section efficace sous la forme (Derradj, 2019) :

$$\omega_K = \frac{\sigma_K^X}{\sigma_K^I} \tag{I.19}$$

σ_K^X : est la section efficace de production de photons émis.

σ_K^I : est la section efficace d'ionisation.

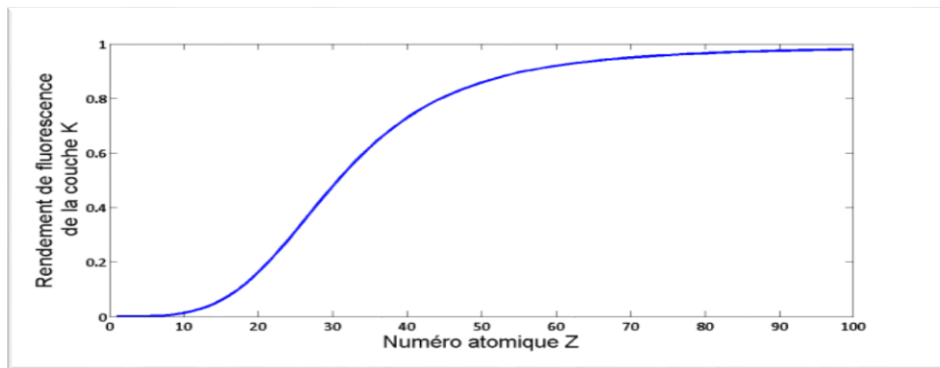


Figure I.21: Le rendement de fluorescence ω en fonction du numéro atomique Z pour la couche K (Derradj, 2019).

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

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

$$\omega_{ji} = \frac{\sigma_{ji}^X}{\sigma_{ji}^I} \tag{I.20}$$

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

$$\omega_j = \sum_{i=1}^K N_{ji} \omega_{ji} \tag{I.21}$$

Où les N sont les sections efficaces relatives d'ionisation de la sous couche i de la couche j :

$$N_{ji} = \frac{\sigma_{ji}^x}{\sum_i \sigma_{ji}^i} \quad (\text{I.22})$$

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

$$\omega_j = \sum_{i=1}^K V_{ji} \omega_{ji} \quad (\text{I.23})$$

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

$$\begin{aligned} V_{j1} &= N_{j1} \\ V_{j2} &= N_{j2} + f_{12}^j N_{j1} \\ V_{j3} &= N_{j3} + f_{23}^j N_{j2} + (f_{13}^j + f_{12}^j f_{23}^j) N_{j1} \end{aligned} \quad (\text{I.24})$$

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

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

$$\begin{aligned} V_{L1} &= N_{L1} \\ V_{L2} &= N_{L2} + f_{12}^L N_{L1} \\ V_{L3} &= N_{L3} + f_{23}^L N_{L2} + (f_{13}^L + f_{12}^L f_{23}^L) N_{L1} \end{aligned} \quad (\text{I.25})$$

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

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

$$\omega_i = \frac{\Gamma_{X_i}}{\Gamma_{T_i}} \quad (\text{I.26})$$

Le rendement d'Auger est :

$$a_i = \frac{\Gamma_{a_i}}{\Gamma_{T_i}} \quad (\text{I.27})$$

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

$$f_{ik} = \frac{\Gamma_{k_i}}{\Gamma_{T_i}} \quad (\text{I.28})$$

La probabilité totale ω étant définie comme la relation entre la probabilité de trois paramètres, le rendement de fluorescence, l'effet Auger et les transitions de Coster-Kronig (Meddah, 2021) :

$$\omega = \omega_i^k + a_i^k + \sum_{j=i+1}^k f_{ij}^k = 1 \quad (\text{I.29})$$

1.7. La section efficace

La section efficace d'émission de rayons X est la probabilité d'émission de rayons X résultant de l'interaction d'un photon avec un électron atomique.

La section efficace d'émission de rayons X σ_K^P de la coque K est produit de la section efficace de photo-ionisation σ_K et le rendement de fluorescence ω_K comme sous (Sharma et Mittal Singla, 2010) :

$$\sigma_K^P = \sigma_K \omega_K \quad (\text{I.30})$$

La section efficace de production des raies K sera calculée à partir des expressions suivantes :

$$\sigma_{K\beta}^X = \frac{1}{1 + \left(\frac{K\beta}{K\alpha}\right)^{-1}} \sigma_K^I \omega_K \quad (\text{I.31})$$

$$\sigma_{K\alpha}^X = \frac{1}{1 + \left(\frac{K\beta}{K\alpha}\right)} \sigma_K^I \omega_K \quad (\text{I.32})$$

σ_K^I : sont les sections efficaces de photo ionisation de la couche K, définie comme la somme pondérée des sections efficaces de photo ionisation de chaque niveau appartenant à la configuration d'un trou de la couche K

$$\sigma_K^I = \frac{\sum_i (2j_i + 1) \sigma_i^I(K)}{\sum_i (2j_i + 1)} \quad (\text{I.33})$$

Où $2j_i + 1$ est le nombre d'états correspondant au niveau i

$\frac{K\alpha}{K\beta}$: le rapport d'intensité.

Les deux relations (I.31) et (I.32) peuvent réécrire sous la forme :

$$\sigma_{K\alpha}^X = F_{K\alpha} \sigma_K^I \omega_K \quad (\text{I.34})$$

$$\sigma_{K\beta}^X = F_{K\beta} \sigma_K^I \omega_K \quad (\text{I.35})$$

Avec : $F_{K\alpha} = \frac{1}{1 + \left(\frac{K\beta}{K\alpha}\right)}$, $F_{K\beta} = \frac{1}{1 + \left(\frac{K\alpha}{K\beta}\right)}$

L'expression de la section efficace d'émission de rayons X de la coche L est plus compliquée que celle de l'émission de rayons X de la couche K en raison des transitions Coster-Kronig en tant qu'énergie du photon émis après la création d'une lacune dans les sous-couches atomiques L_1 , L_2 et L_3 devient cohérente avec l'une des transitions autorisées pour le réajustement atomique. Le résultat est l'émission de groupes de photons résolus par les détecteurs de photons actuellement disponibles, qui sont nommés L_l , $L\alpha$, $L\beta$ et $L\gamma$. Les expressions des sections efficaces d'émission globales de rayons X (Sharma et Mittal Singla, 2010).

Sera calculée à partir des expressions suivantes (Rebouli, 2022) :

$$\sigma_{L_{3l}} = [(\sigma_3 + \eta_{KL3} \sigma_K) + (\sigma_2 + \eta_{KL2} \sigma_K) f_{23} + (\sigma_1 + \eta_{KL1} \sigma_K) (f_{13} + f_{12} f_{23})] \omega_3 F_{3l} \quad (\text{I.36})$$

$$\sigma_{L_{3\alpha}} = [(\sigma_3 + \eta_{KL3} \sigma_K) + (\sigma_2 + \eta_{KL2} \sigma_K) f_{23} + (\sigma_1 + \eta_{KL1} \sigma_K) (f_{13} + f_{12} f_{23})] \omega_3 F_{3\alpha} \quad (\text{I.37})$$

$$\sigma_{L_{3\beta}} = [(\sigma_3 + \eta_{KL3} \sigma_K) + (\sigma_2 + \eta_{KL2} \sigma_K) f_{23} + (\sigma_1 + \eta_{KL1} \sigma_K) (f_{13} + f_{12} f_{23})] \omega_3 F_{3\beta} \quad (\text{I.38})$$

$$\sigma_{L_{2\beta}} = [(\sigma_2 + \eta_{KL2} \sigma_K) + (\sigma_1 + \eta_{KL1} \sigma_K) f_{12}] \omega_2 F_{2\beta} \quad (\text{I.39})$$

$$\sigma_{L_{2\gamma}} = [(\sigma_2 + \eta_{KL2} \sigma_K) + (\sigma_1 + \eta_{KL1} \sigma_K) f_{12}] \omega_2 F_{2\gamma} \quad (\text{I.40})$$

$$\sigma_{L_{1\beta}} = (\sigma_1 + \eta_{KL1} \sigma_K) \omega_1 F_{1\beta} \quad (\text{I.41})$$

$$\sigma_{L_{1\gamma}} = (\sigma_1 + \eta_{KL1} \sigma_K) \omega_1 F_{1\gamma} \quad (\text{I.42})$$

Où $\sigma_i (i = 1, 2, 3)$ est la section efficace de photo-ionisation de la sous-couche L_i ,

$\omega_i (i = 1, 2, 3)$. Est le rendement de fluorescence de la sous-couche L_i ,

$f_{ij} (i = 1, 2 \text{ et } j = 2, 3)$ est les probabilités des transitions de Coster-Kronig, les valeurs η_{KL1} , η_{KL2} et η_{KL3} dans les équations ci-dessus représentent les probabilités de transfert lacunaire totales et $F_{ij} (F_{31}, F_{3\alpha}, F_{3\beta} \dots)$ Sont les fractions des transitions radiatives de la sous-couche $L_i (i = 1, 2, 3)$ contenue dans le j ème ligne spectral.

Les valeurs de F_{ij} sont données dans les relations suivantes :

$$F_{3\alpha} = \frac{[\Gamma(M_4 - L_3) + \Gamma(M_5 - L_3)]}{\Gamma_3} \quad (\text{I.43})$$

$$F_{3l} = \frac{\Gamma(M_1 - L_3)}{\Gamma_3} \quad (\text{I.44})$$

$$F_{3\beta} = \frac{[\Gamma(N_1-L_3)+\Gamma(N_4-L_3)+\Gamma(N_5-L_3)+\Gamma(O_1-L_3)+\Gamma(O_{4,5}-L_3)]}{\Gamma_3} \quad (I.45)$$

$$F_{2\beta} = \frac{[\Gamma(M_4-L_2)+\Gamma(M_3-L_2)]}{\Gamma_2} \quad (I.46)$$

$$F_{1\beta} = \frac{[\Gamma(M_{2,3}-L_1)+\Gamma(M_{4,5}-L_1)]}{\Gamma_1} \quad (I.47)$$

$$F_{1\gamma} = \frac{[\Gamma(N_2-L_1)+\Gamma(N_3-L_1)+\Gamma(O_2-L_1)+\Gamma(O_3-L_1)+\Gamma(P_{2,3}-L_1)]}{\Gamma_1} \quad (I.48)$$

Où $\Gamma_i (i = 1, 2, 3)$ est la largeur radiative totale de les sous-couches L_i et $\Gamma(X_i - Y_j)$ est la largeur partielle. A partir des équations (I.36) - (I.42), on peut écrire les équations suivantes :

$$\sigma_{L3x} = \sigma_{L3l} + \sigma_{L3\alpha} + \sigma_{L3\beta} \quad (I.49)$$

$$\sigma_{L2x} = \sigma_{L2\beta} + \sigma_{L2\gamma} \quad (I.50)$$

$$\sigma_{L1x} = \sigma_{L1\beta} + \sigma_{L1\gamma} \quad (I.51)$$

Les quantités dans ces équations sont décrites plus haut. La probabilité de transfert lacunaire de la couche K vers les sous-couches L_i est définie comme le nombre des lacunes des sous-couches L_i produites lors de la désintégration d'une lacune de la couche K par des transitions radiatives K- L_i ou par des transitions Auger K- $L_i L_j$ et K- $L_i X$ (avec : X= M, N, O ...).

Le nombre moyen de η_{KLi} :

$$\eta_{KLi}(T) = \eta_{KLi}(R) + \eta_{KLi}(A) \quad (I.52)$$

Où $\eta_{KLi}(R)$ et $\eta_{KLi}(A)$ sont les probabilités de transfert lacunaire de la couche K vers les sous-couches L_i des transitions radiatives et Auger.

η_{KLi} Ont été calculés à l'aide des équations suivantes :

$$\eta_{KL1}(T) = \frac{\Gamma_R(KL_1)+2\Gamma_A(KL_1L_1)+\Gamma_A(KL_1L_2)+\Gamma_A(KL_1L_3)+\Gamma_A(KL_1X)}{\Gamma(K)} \quad (I.53)$$

$$\eta_{KL2}(T) = \frac{\Gamma_R(KL_2)+2\Gamma_A(KL_2L_2)+\Gamma_A(KL_1L_2)+\Gamma_A(KL_1L_3)+\Gamma_A(KL_2X)}{\Gamma(K)} \quad (I.54)$$

$$\eta_{KL3}(T) = \frac{\Gamma_R(KL_3)+2\Gamma_A(KL_3L_3)+\Gamma_A(KL_1L_3)+\Gamma_A(KL_2L_3)+\Gamma_A(KL_3X)}{\Gamma(K)} \quad (I.55)$$

Avec : X= M, N, O ... et $\eta_{KL}(T) = \sum_i \eta_{KLi}(T)$

$\Gamma_R(KL_i)$: est la largeur partielle radiative de la couche K.

$\Gamma_A(K - L_i L_j)$ et $\Gamma_A(K - L_i X)$: sont les largeurs partielles sans rayonnement et $\Gamma(K)$ est la largeur totale de niveau K.

I.7.1. Calcul des largeurs

Un atome avec une lacune est dans un état excité, soit la largeur ou l'incertitude totale sur l'énergie de cet état, qui est reliée à sa durée de vie moyen τ par (Meddah, 2021) :

$$\Gamma_{x_i, a_i} = \frac{\hbar}{\tau} \quad (\text{I.56})$$

Où Γ_{x_i} est la largeur radiative, est Γ_{x_i} la largeur non-radiative.

I.8. la relation empirique entre η_{KL} et $\omega_K, \frac{K_\beta}{K_\alpha}$

Les trois paramètres atomiques, le rendement de fluorescence, le rapport d'intensité de la couche K et la probabilité de transfert lacunaire sont reliés par une expression empirique :

$$\eta_{KL} = \frac{2 - \omega_K}{1 + \left(\frac{K_\beta}{K_\alpha}\right)} \quad (\text{I.57})$$

Références Bibliographiques

Axel Araneda Barahona., Development of a Methodology for the Determination of a TXRF Spectrometer Sensitivity Curve. Thèse d'ingénieur en physique, Université de Concepción, Chile, (2015).

Beladel B., Thèse de Doctorat, Ouargla, 2/12/2015.

Bendjedi A., Etude des paramètres d'interaction des rayonnements ionisants avec la matière en vue des applications analytiques. Thèse de Doctorat, université Mohamed Boudiaf M'sila, 29/09/ 2018.

Bensaci F., Benchaib H. Etude théorique de la spectroscopie de fluorescence des rayons X (XRF) pour l'étude des matériaux. Mémoire de master, université de Bordj Bou-Argeridj, (2014).

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, université Mohamed Boudiaf - M'sila, 16/01/2019.

Lafrance R., Physique 3Onde, optique et physique moderne, CHENELIERE EDUCATION, Canada, (2015).

Le Sech C., Ngô Ch. Physique Nucléaire Des quatre applications, DUNOD, Paris, (2010).

Meddah S., Etude des paramètres atomiques intrinsèques pour l'émission des rayons X : Rapport de l'intensité de la raie L. Mémoire de master, université de Bordj Bou-Argeridj, (2021).

Meddough k., Mémoire de master, université de Bordj Bou-Argeridj, (2018).

Mirji S., Bennal A.S., Badiger N.M., Tiwari M.K., Lodha G.S. Chemical sensitivity of K-L vacancy transfer probability in compounds of 3d atoms using synchrotron radiation. Chem. Phys. Lett., 634 (2015) 271–276.

Rebouli H., Les probabilités de transfert lacunaire de la couche K (η_{KL}) : Base de données. Mémoire de master, université de Bordj Bou-Argeridj, (2022).

Richard V. Murphy, Ph. D., Livret de renseignements sur la certification et la préparation relatives aux évaluations de RNCAN – Opérateur d'analyseurs portatifs à fluorescence X, Version 3 - Révisé, Canada, 17 Décembre 2010.

Richi W., Calcul des corrections d'absorption des Neutrons par La Méthode de Monte Carlo sur des échantillons de Poudres Cristallines. Thèse de magister, Université 8 Mai 1945-Geulma, (2012).

Sharma A., Mittal Singla R. Vacancy alignment in atomic inner shells: Theory and Experiment aspects, Lap Lambert Academic Publishing, 13 July 2010.

Stan N., Étude et construction d'un tomographe TEP/TDM pour petits animaux, combinant modules phoswich à scintillateurs et détecteur à pixels hybrides. Thèse de doctorat, Université de la méditerranée, Aix-Marseille II-France, 20 /7/2010.

Tehami I., Base de donnée des rapports d'intensité des éléments atomiques $11 \leq Z \leq 96 \frac{K_{\beta}}{K_{\alpha}}$. Mémoire de master, université de Bordj Bou-Argeridj, (2018).

Zidi A., Calcul du rapport d'intensité d'émission des rayons X ($\frac{K_{\beta}}{K_{\alpha}}$) des éléments lourds. Mémoire de master, université de Bordj Bou-Argeridj, (2021).

CHAPITRE II

*Calcul semi-empirique des
probabilités de transfert lacunaire
de la couche k (η_{KL}) des éléments
de numéro atomique $19 \leq Z \leq 92$*



II.1. Introduction

L'interaction rayonnement-matière apparaît sous plusieurs formes, telles que l'effet photoélectrique, la diffusion Compton, la réaction de particules chargées de Coulomb, et cette réaction conduit à l'ionisation de l'atome, quand un électron est éjecté de son orbite, il quitte une lacune et cela stimule les électrons des orbites supérieures à remplir et donc cette lacune apparaît dans une autre orbite.

Dans ce mémoire, on a présenté la probabilité de transfert lacunaire entre les deux couches K et L, et dans ce chapitre on a étudié les valeurs semi-empirique des probabilités de transfert lacunaire de la couche K (η_{KL}) pour les éléments de numéro atomique ($19 \leq Z \leq 92$).

II.2. Probabilité de transfert lacunaire (η_{KL})

La lacune est connue pour être le trou laissé par l'électron après qu'il s'éjecte de son orbite après avoir utilisé des rayons gamma, des électrons de haute énergie, des ions optiques ou des ions lourds... sur la couche K. Cette lacune peut être transmise de la couche K vers les sous-couches L1, L2 ou L3 par des transitions non radiatives et radiatives. La transition non radiative, connue sous le nom de transition Auger, est significative dans les éléments en Z bas, d'autre part, les transitions radiatives, connu sous le nom de fluorescence des rayons X, est important dans les éléments Z élevés (Mirji et al, 2015).

II.2.1. Les transitions radiatives

II.2.1.1. Dans la couche K

L'apparition d'une lacune dans la couche K entraîne des transitions à partir des couches supérieures L, M et N où il y a deux transitions principales K_{α} et K_{β} .

La transition K_{α}

La raie d'émission résulte de l'émission radiative d'un électron de la couche L avec nombre quantique principale est 2 vers la couche K avec nombre quantique principale est 1, Ce sont trois transitions :

- $K_{\alpha 1}$ résulte de transitions d'électron de la sous-couche L_3 vers la couche K.
- $K_{\alpha 2}$ résulte de transitions d'électron de la sous-couche L_2 vers la couche K.
- $K_{\alpha 3}$ résulte de transitions d'électron de la sous-couche L_1 vers la couche K.

La raie K_{α} est typiquement la ligne spectrale la plus intense pour un élément donné, aussi connue sous le nom série de Lyman (Zidi, 2021).

La transition K_{β}

Résultent d'émission radiative d'un électron de la couche M ou N avec nombre quantique principal est 3,4 vers la couche K (Zidi, 2021).

Tableau II.1: Siegbahn, IUPAC, et nlj électron configuration (EC) notations pour les transitions radiatives (Zidi, 2021).

<i>Seigbahn</i>		<i>IUPAC</i>	<i>EC</i>
K_{α}	$K_{\alpha 1}$	$k-L_3$	$1s_{1/2}-2s_{1/2}$
	$K_{\alpha 2}$	$K-L_2$	$1s_{1/2}-2p_{1/2}$
	$K_{\alpha 3}$	$K-L_1$	$1s_{1/2}-2p_{3/2}$
K_{β}	$K_{\beta 1}$	$K-M_3$	$1s_{1/2}-3p_{3/2}$
	$K_{\beta 2}$	$K-M_2$	$1s_{1/2}-3p_{1/2}$
	$K_{\beta 5}$	$K-M_{4,5}$	$1s_{1/2}-3d_{3/2} / 3d_{5/2}$
	$K_{\beta 2}$	$K-N_{2,3}$	$1s_{1/2}-4p_{1/2} / 4p_{3/2}$
	$K_{\beta 4}$	$K-N_{4,5}$	$1s_{1/2}-4d_{3/2} / 4d_{5/2}$

II.2.1.2. Dans la couche L

Si lacune survient dans la couche L, elle génère des transitions qui proviennent de trois couches supérieures M, N et O en fonction du lieu de lacune où il y a trois transitions principales L_{α} , L_{β} , L_{γ} .

Tableau II.2 : Principales transitions atomiques permises relatives à l'ionisation de la couche L et correspondance entre la notation quantique et celle de Seigbahn (Meddah, 2021).

<i>Sous-couche L₁</i>			<i>Sous-couche L₂</i>			<i>Sous-couche L₃</i>		
<i>Sieg bah n</i>	<i>IUPAC</i>	<i>EC</i>	<i>Sieg bah n</i>	<i>IUPAC</i>	<i>EC</i>	<i>Sieg bah n</i>	<i>IUPAC</i>	<i>EC</i>
$L_{\beta 4}$	L_1-M_2	$2s_{1/2}-3p_{1/2}$	L_{η}	L_2-M_1	$2p_{1/2}-3s_{1/2}$	L_1	L_3-M_1	$2p_{3/2}-3s_{1/2}$
$L_{\beta 3}$	L_1-M_3	$2s_{1/2}-3p_{3/2}$	$L_{\beta 17}$	L_2-M_3	$2p_{1/2}-3p_{3/2}$	L_t	L_3-M_2	$2p_{3/2}-3p_{1/2}$
$L_{\beta 10}$	L_1-M_4	$2s_{1/2}-3d_{3/2}$	$L_{\beta 1}$	L_2-M_4	$2p_{1/2}-3d_{3/2}$	L_s	L_3-M_3	$2p_{3/2}-3p_{3/2}$
$L_{\beta 9}$	L_1-M_5	$2s_{1/2}-3d_{5/2}$	$L_{\gamma 5}$	L_2-N_1	$2p_{1/2}-4s_{1/2}$	$L_{\alpha 2}$	L_3-M_4	$2p_{3/2}-3d_{3/2}$
$L_{\gamma 2}$	L_1-N_2	$2s_{1/2}-4p_{1/2}$	$L_{\gamma 1}$	L_2-N_4	$2p_{1/2}-4d_{3/2}$	$L_{\alpha 1}$	L_3-M_5	$2p_{3/2}-4d_{5/2}$
$L_{\gamma 3}$	L_1-N_3	$2s_{1/2}-4p_{3/2}$	L_{ν}	L_2-N_6	$2p_{3/2}-3f_{5/2}$	$L_{\beta 6}$	L_3-N_1	$2p_{3/2}-4s_{1/2}$
$L_{\gamma 4}$	L_1-O_3	$2s_{1/2}-5p_{3/2}$	$L_{\gamma 6}$	L_2-O_4	$2p_{1/2}-5d_{3/2}$	$L_{\beta 15}$	L_3-N_4	$2p_{3/2}-4d_{3/2}$
			$L_{\gamma 8}$	L_2-O_1	$2p_{1/2}-5s_{1/2}$	$L_{\beta 7}$	L_3-O_1	$2p_{3/2}-5s_{1/2}$
						$L_{\beta 5}$	$L_3-O_{4,5}$	$2p_{3/2}-5d_{3/2}, 5d_{5/2}$

II.2.2. Les éléments dans tableau périodique

Afin d'étudier la probabilité de transfert lacunaire de la couche K (η_{KL}) plusieurs études expérimentales ont été faites sur différents éléments du tableau périodique, dans notre base de données (Rebouli, 2022) la gamme sélectionnée était où notre base comprend toutes les familles du tableau. Il n'y a pas de valeurs plus petites (les éléments

légers) que puisqu'il y a un manque de transition vers les couches L et M, il n'y a pas de valeurs plus grandes (les éléments lourds) que parce qu'elles sont difficiles à manipuler et il y a une pénurie de transition vers la couche L.

II.2.2.1. Les métaux alcalins

Sont les éléments du 1^{er} groupe du tableau périodique à l'exception de l'Hydrogène, ce sont les éléments de bloc s, et il possède un électron dans la couche de valence (type ns^1).

Tableau II.3 : la famille I_a Alcalins.

Famille I _a :Alcalins	
Eléments	EC
¹⁹ K	[Ar] 4s ¹
³⁷ Rb	[Kr] 5s ¹
⁵⁵ Cs	[Xe] 6s ¹
⁸⁷ Fr	[Rn] 7s ¹

Quelques propriétés de cette famille :

- ❖ Les métaux alcalins qu'ont 1e⁻ auront donc tendance à donner facilement cet électron pour saturer le niveau d'énergie et à former un cation de charge +1.
- ❖ Ils sont très électropositifs.
- ❖ Très réactifs, les métaux alcalins doivent être conservés dans des huiles.

II.2.2.2. Les métaux alcalino-terreux

Sont les éléments du 2^e groupe du tableau périodique, ce sont les éléments de bloc s, et il possède deux électrons dans la couche de valence (type ns^2).

Tableau II.4 : la famille II_a Alcalino-terreux.

Famille II _a : Alcalino-terreux	
Eléments	EC
²⁰ Ca	[Ar] 4s ²
³⁸ Sr	[Kr] 5s ²
⁵⁶ Ba	[Xe] 6s ²
⁸⁸ Ra	[Rn] 7s ²

Quelques propriétés de cette famille :

- ❖ Les métaux alcalino-terreux qu'ont 2e⁻ auront donc tendance à donner facilement des électrons pour saturer le niveau d'énergie et à former un cation de charge +2
- ❖ Ils sont électropositifs.
- ❖ Sont conducteurs d'électricité et de chaleur

- ❖ Ces éléments ne se trouvent jamais sous forme métallique libre dans la nature est comme les alcalins, ils sont très réactifs.

II.2.2.3. Les terreux (La famille de Bore)

Sont les éléments du 13^e groupe du tableau périodique, ce sont les éléments de bloc p, et il possède trois électrons dans la couche de valence (type $ns^2 np^1$).

Tableau II.5 : la famille III_a les Terreux.

Famille III _a : les Terreux	
Eléments	Ec
³¹ Ga	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ¹
⁴⁹ In	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5p ¹
⁸¹ Tl	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ¹

Quelques propriétés de cette famille :

- ❖ Les terreux (La famille de Bore) qu'ont 3e⁻ auront donc tendance à donner facilement trois électrons pour saturer le niveau d'énergie et à former un cation de charge +3.
- ❖ Les éléments de cette famille ne sont généralement pas rencontrés librement dans la nature.
- ❖ Ils sont électropositifs.

II.2.2.4. Les Carbonides (la famille du carbone)

Sont les éléments du 14^e groupe du tableau périodique, ce sont les éléments de bloc p, et il possède quatre électrons dans la couche de valence (type $ns^2 np^2$).

Tableau II.6 : la famille IV_a Les Carbonides.

Famille IV _a : Les Carbonides	
Eléments	EC
³² Ge	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ²
⁵⁰ Sn	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5p ²
⁸² Pb	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ²

Quelques propriétés de cette famille :

- ❖ Les Carbonides (la famille du carbone) qu'ont 4e⁻ donc ils peuvent en céder ou en attirer pour se saturer et former respectivement un cation de charge +4 ou un anion de charge -4.
- ❖ Le carbone (C), le silicium (Si) et le germanium (Ge) sont des métalloïdes, L'étain (Sn) et le plomb (Pb) sont des métaux.

II.2.2.5. Les azotides

Sont les éléments du 15^e groupe du tableau périodique, ce sont les éléments de bloc p, et il possède cinq électrons dans la couche de valence (type $ns^2 np^3$).

Tableau II.7 : la famille V_a Les azotides.

Famille V _a : Les azotides	
Eléments	EC
³³ As	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ³
⁵¹ Sb	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5p ³
⁸³ Bi	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ³

Quelques propriétés de cette famille :

- ❖ Les azotides qu'ont 5e⁻ auront donc tendance à attirer 3 électrons pour de saturer sa couche externe et à former un anion de charge -3.
- ❖ Les éléments sont électronégativités.

II.2.2.6. Les chalcogènes (sulfurides)

Sont les éléments du 16^e groupe du tableau périodique, ce sont les éléments de bloc p, et il possède six électrons dans la couche de valence (type $ns^2 np^4$).

Tableau II.8 : la famille VI_a Les chalcogènes.

Famille VI _a : Les chalcogènes	
Eléments	EC
³⁴ Se	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁴
⁵² Te	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁴
⁸⁴ Po	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁴

Quelques propriétés de cette famille :

- ❖ Les chalcogènes (sulfurides) qu'ont 6e⁻ auront donc tendance à attirer 2 électrons pour de saturer sa couche externe et à former un anion de charge -2.
- ❖ Les chalcogènes sont des éléments non-métalliques et semi-métal.

II.2.2.7. Les Halogènes

Sont les éléments du 17^e groupe du tableau périodique, ce sont les éléments de bloc p, et il possède sept électrons dans la couche de valence (type $ns^2 np^5$).

Tableau II.9: la famille VII_a les halogènes.

Famille VII _a : les halogènes	
Eléments	EC
³⁵ Br	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁵
⁵³ I	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁵
⁸⁵ At	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁵

Quelques propriétés de cette famille :

- ❖ Les Halogènes qu'ont $7e^-$ ont donc tendance à attirer 1 électron pour de saturer sa couche externe et à former un anion de charge -1.
- ❖ Les éléments le plus électronégatif du tableau périodique.
- ❖ Les halogènes sont des éléments non-métalliques.

II.2.2.8. Les gaz nobles (rares)

Sont les éléments du 18^e groupe du tableau périodique, ce sont les éléments de bloc p (Ne, Ar, Kr, Xe) Ce sont les éléments les plus stables où ils possèdent huit électrons dans la couche de valence donc totalement remplie (type ns^2np^6), Sauf l'hélium, il n'a que deux électrons dans la couche de valence et aussi totalement remplie.

Tableau II.10 : la famille VIII_a les gaz nobles.

Famille VIII _a : les gaz nobles	
Eléments	EC
³⁶ Kr	[Ar] $4s^2 3d^{10} 4p^6$
⁵⁴ Xe	[Kr] $5s^2 4d^{10} 5p^6$
⁸⁶ Rn	[Xe] $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6$

Quelques propriétés de cette famille :

- ❖ Les gaz nobles se présentent sous forme de gaz, incolores, inodores et insipides.
- ❖ Les énergies d'ionisation sont très élevées.
- ❖ Les gaz nobles sont considérés comme les éléments les moins réactifs du tableau périodique.

II.2.2.9. Les éléments de transition

Sont les éléments constitués des groupes 3 à 12 du tableau périodique et ce sont les éléments de bloc d (type $ns^2(n-1)d^{(1\text{à}10)}$).

Tableau II.11 : la famille III_B à II_B les éléments de transition.

Famille III _B à II _B : Les éléments de transition					
Elément	EC	Elément	EC	Elément	EC
²¹ Sc	[Ar] $3d^1 4s^2$	³⁹ Y	[Kr] $4d^1 5s^2$	⁷² Hf	[Xe] $5d^2 6s^2$
²² Ti	[Ar] $3d^2 4s^2$	⁴⁰ Zr	[Kr] $4d^2 5s^2$	⁷³ Ta	[Xe] $5d^3 6s^2$
²³ V	[Ar] $3d^3 4s^2$	⁴¹ Nb	[Kr] $4d^4 5s^1$	⁷⁴ W	[Xe] $5d^4 6s^2$
²⁴ Cr	[Ar] $3d^5 4s^1$	⁴² Mo	[Kr] $4d^5 5s^1$	⁷⁵ Re	[Xe] $5d^5 6s^2$
²⁵ Mn	[Ar] $3d^5 4s^2$	⁴³ Tc	[Kr] $4d^5 5s^2$	⁷⁶ Os	[Xe] $5d^6 6s^2$
²⁶ Fe	[Ar] $3d^6 4s^2$	⁴⁴ Ru	[Kr] $4d^7 5s^1$	⁷⁷ Ir	[Xe] $5d^7 6s^2$
²⁷ Co	[Ar] $3d^7 5d^1 4s^2$	⁴⁵ Rh	[Kr] $4d^8 5s^1$	⁷⁸ Pt	[Xe] $5d^9 6s^1$
²⁸ Ni	[Ar] $3d^8 4s^2$	⁴⁶ Pd	[Kr] $4d^{10}$	⁷⁹ Au	[Xe] $5d^{10} 6s^1$
²⁹ Cu	[Ar] $3d^{10} 4s^1$	⁴⁷ Ag	[Kr] $4d^{10} 5s^1$	⁸⁰ Hg	[Xe] $5d^{10} 6s^2$
³⁰ Zn	[Ar] $3d^{10} 4s^2$	⁴⁸ Cd	[Kr] $4d^{10} 5s^2$		

Quelques propriétés de cette famille (Boukelkou, 2013) :

- ❖ Tous les éléments de transition sont des métaux. Ils sont presque tous durs, à haute température de fusion et d'ébullition.
- ❖ Ils conduisent bien la chaleur et l'électricité, certains sont des aimants (fer, cobalt, nickel).
- ❖ Les énergies d'ionisation sont relativement faibles et donc les degrés d'oxydation sont nombreux. Ils peuvent monter jusqu'à 8 dans la deuxième et la troisième ligne (Ru, Os).
- ❖ Mélanger de deux ou plusieurs éléments est former des alliages.
- ❖ Tous les éléments presque tous durs.

II.2.2.10. Les lanthanides

Est constitué par 15 éléments compris entre ($Z=57$ à 71) et, on appelle cette série les Terres Rares. Les éléments 4f occupent dans le tableau périodique une position particulière, puisqu'ils sont tous réunis dans une même case, ce qui conduit à l'écriture d'une ligne supplémentaire (Lemmouchi, 2010).

Tableau II.12 : la famille les lanthanides

Famille : les lanthanides			
Éléments	EC	Éléments	EC
$_{57}\text{La}$	$[\text{Xe}] 5d^1 6s^2$	$_{65}\text{Tb}$	$[\text{Xe}] 4f^9 6s^2$
$_{58}\text{Ce}$	$[\text{Xe}] 4f^1 5d^1 6s^2$	$_{66}\text{Dy}$	$[\text{Xe}] 4f^{10} 6s^2$
$_{59}\text{Pr}$	$[\text{Xe}] 4f^3 6s^2$	$_{67}\text{Ho}$	$[\text{Xe}] 4f^{11} 6s^2$
$_{60}\text{Nd}$	$[\text{Xe}] 4f^4 6s^2$	$_{68}\text{Er}$	$[\text{Xe}] 4f^{12} 6s^2$
$_{61}\text{Pm}$	$[\text{Xe}] 4f^5 6s^2$	$_{69}\text{Tm}$	$[\text{Xe}] 4f^{13} 6s^2$
$_{62}\text{Sm}$	$[\text{Xe}] 4f^6 6s^2$	$_{70}\text{Yb}$	$[\text{Xe}] 4f^{14} 6s^2$
$_{63}\text{Eu}$	$[\text{Xe}] 4f^7 6s^2$	$_{71}\text{Lu}$	$[\text{Xe}] 4f^{14} 5d^1 6s^2$
$_{64}\text{Gd}$	$[\text{Xe}] 4f^7 5d^1 6s^2$		

Quelques propriétés de cette famille (Ibessaten et Lahbib, 2016) :

- ❖ Les électrons 4 f des lanthanides étant des électrons de cœur, l'état d'oxydation le plus stable (+3) est homogène pour toute la série et résulte de la perte des électrons 6 s et 5 d.
- ❖ Le rayon ionique des lanthanides est lié au remplissage de l'orbital 4f. Il diminue régulièrement le long de la série.

II.2.2.11. Les actinides

Est constitué par 15 éléments compris entre ($Z=89$ à 103). Et ce sont tous des éléments radioactifs. Les éléments 5f occupent dans le tableau périodique une position

particulière, puisqu'ils sont tous réunis dans une même case, ce qui conduit à l'écriture d'une ligne supplémentaire (Lemmouchi, 2010).

Tableau II.13 : la famille les actinides

Famille : les actinides	
Eléments	EC
⁸⁹ Ac	[Rn] 6d ¹ 7s ²
⁹⁰ Th	[Rn] 6d ² 7s ²
⁹¹ Pa	[Rn] 5f ² 6d ¹ 7s ²
⁹² U	[Rn] 5f ³ 6d ¹ 7s ²

Quelques propriétés de cette famille (Lemmouchi, 2010) :

- ❖ Les structures électroniques de La série des actinides au remplissage des orbitales 5f.
- ❖ Les degrés d'oxydation sont de (II) à (VII).
- ❖ La série 5f présente une diminution du rayon ionique lorsque le numéro atomique (Z) des éléments augment.

II.3. Base de donnée

Notre base de donnée de la probabilité transfert lacunaire η_{KL} est basée sur le travail de Mlle Rebouli (Rebouli, 2022) pour les éléments atomiques de ¹⁹K à ⁹²U. Il y a presque 259 valeurs du paramètre atomique dans notre base de données tirées directement de la littérature pour lesquels de ¹⁹K à ⁹²U. Toutes ces valeurs sont obtenues par excitation des atomes par des photons, (Sauf ces éléments ³⁶Kr, ⁴³Tc, ⁵⁴Xe, ⁶¹Pm, ⁷⁶So, ⁸⁴Po, ⁸⁵At, ⁸⁶Rn, ⁸⁷Fr, ⁸⁸Ra, ⁸⁹Ac, ⁹¹Pa, car il n'y a pas de valeurs expérimentales).

II.3.1. La valeur moyenne pondérée et l'écart type

Lorsqu'il existe différentes mesures pour la même quantité, dans ce cas, la probabilité de transfert lacunaire (η_{KL}), le calcul de la valeur moyenne pondérée est donné par la relation suivante (Zidi, 2021) :

$$\eta_{KL-W} = \left[\left(\sum_{i=1}^N (\Delta(\eta_{KL})_{\text{exp}-i})^{-2} \right)^{-1} \sum_{i=1}^N \left[\frac{(\eta_{KL})_{\text{exp}-i}}{(\Delta(\eta_{KL})_{\text{exp}-i})^2} \right] \right] \quad (\text{II.1})$$

- $(\eta_{KL})_{\text{exp}-i}$: Les rapports d'intensités expérimentales.
- N : Le nombre de données expérimentales.
- $\Delta(\eta_{KL})_{\text{exp}-i}$: L'incertitude sur les valeurs expérimentales.

Nous avons calculé l'erreur sur la valeur moyenne pondérée par la moyenne des écarts avec les données expérimentales :

$$\Delta(\eta_{KL})_w = \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (\Delta(\eta_{KL})_{\text{exp}-i})^{-2}}} \quad (\text{II.2})$$

On a utilisé la relation (II.1) pour calculer les valeurs pondérées (η_{KL-w}) et relation (II.2) l'incertitude $\Delta(\eta_{KL})_w$, puis nous avons calculé l'écart type (z_i) et le z-score moyen (\bar{z}) selon les équations suivantes :

$$z_i = \frac{(\eta_{KL})_{\text{exp}-i} - (\eta_{KL})_w}{\sqrt{(\Delta(\eta_{KL})_{\text{exp}-i})^2 + (\Delta(\eta_{KL})_w)^2}} \quad (\text{II.3})$$

Le z-score moyen est défini par : $\bar{z} = \frac{\sum_{i=1}^n z_i}{n}$ (II.4)

n : indique le nombre de points expérimentaux pour chaque élément.

Après pour trouver des bonnes valeurs, nous avons choisi une gamme [-1,1] dépend de (z_i) et on a précisé les valeurs inférieures et supérieures en gras. Ensuite, on a rejeté toutes les valeurs qui n'appartiennent pas à la gamme et recalculent les valeurs moyennes pondérées recommandées (η_{KL-w_r}) par la relation (II.1) et l'incertitude par la relation (II.2). Et nous avons fait tous ces calculs avec le logiciel Excel.

Dans le tableau **II.14** : on a présenté les mesures expérimentales des probabilités de transfert lacunaire de la couche K ($\eta_{KL-\text{exp}}$) pour les atomes ^{19}K à ^{92}U (Rebouli, 2022) et la référence à partir de laquelle la valeur a été prise et aussi présente les valeurs moyennes pondérées (η_{KL-w}) et les valeurs moyennes pondérées recommandées (η_{KL-w_r}) et l'incertitude $\Delta(\eta_{KL})_w$ et l'écart type (z_i) et Le z-score moyen (\bar{z}).

Tableau II.14: Valeurs expérimentales des probabilités de transfert lacunaire de la couche K (η_{KL}) des éléments de numéro atomique $19 \leq Z \leq 92$ (Rebouli, 2022).

Z, Element	$(\eta_{KL})_{exp-i}$ $\pm \Delta(\eta_{KL})_{exp-i}$	References	$(\eta_{KL})_w$ $\pm \Delta(\eta_{KL})_w$	z_i	\bar{z}
Z=19, K	1.721±0.153	(Sögüt et al., 2009)	1.721±0.153	0.0000	0.0000
Z=20, Ca	1.689±0.143	(Sögüt et al., 2009)	1.689±0.143	0.0000	0.0000
Z=21, Sc	1.5986±0.0815	(Aylikci et al., 2015)	1.5986±0.0815	0.0000	0.0000
Z=22, Ti	1.586±0.127 1.568±0.05 1.568±0.05 1.5763±0.0804	(Sögüt et al., 2009) (Han and Demir, 2010) (Han and Demir, 2010) (Aylikci et al., 2015)	1.5704±0.0314	0.119 -0.041 -0.041 0.068	0.027
Z=23, V	1.544±0.061 1.528±0.122 1.5459±0.0788	(Ertugrul et al., 2006) (Sögüt et al., 2009) (Aylikci et al., 2015)	1.5425±0.0449	0.02 -0.112 0.037	-0.018
Z=24, Cr	1.493±0.037 1.509±0.044 1.538±0.123 1.410±0.05 1.410±0.05 1.410±0.05 1.5161±0.0773 1.539±0.014	(Sögüt, 2006) (Ertugrul et al., 2006) (Sögüt et al., 2009) (Han and Demir, 2010) (Han and Demir, 2010) (Han and Demir, 2010) (Aylikci et al., 2015) (Mirji et al., 2015)	1.5123±0.0113 1.5032±0.026	-0.499 -0.073 0.208 -1.996 -1.996 -1.996 0.049 1.484	-0.602
Z=25, Mn	1.467±0.044 1.483±0.12 1.505±0.120 1.4793±0.0754 1.507±0.084	(Ertugrul et al., 2006) (Öz, 2006) (Sögüt et al., 2009) (Aylikci et al., 2015) (Turhan et al., 2020)	1.4789±0.0321	-0.218 0.033 0.21 0.005 0.312	0.068
Z=26, Fe	1.453±0.042 1.451±0.13 1.442±0.144 1.436±0.05 1.436±0.05 1.436±0.05 1.492±0.055 1.482±0.008 1.4488±0.0739	(Ertugrul et al., 2006) (Öz, 2006) (Sögüt et al., 2009) (Han and Demir, 2010) (Han and Demir, 2010) (Han and Demir, 2010) (George et al., 2014) (George et al., 2014) (Aylikci et al., 2015)	1.4777±0.0075	-0.579 -0.205 -0.248 -0.825 -0.825 -0.825 0.258 0 -0.389	-0.404
Z=27, Co	1.415±0.057 1.418±0.11 1.420±0.142 1.384±0.05 1.384±0.05 1.454±0.098 1.435±0.098 1.4169±0.0723 1.445±0.003	(Ertugrul et al., 2006) (Öz, 2006) (Sögüt et al., 2009) (Han and Demir, 2010) (Han and Demir, 2010) (Anand et al., 2015) (Anand et al., 2015) (Aylikci et al., 2015) (Anand et al., 2018)	1.4444±0.0030 1.4448±0.003	-0.515 -0.24 -0.172 -1.206 -1.206 0.098 -0.096 -0.38 0.141	-0.397
Z=28, Ni	1.394±0.042 1.388±0.11 1.364±0.123 1.388±0.05 1.388±0.05 1.388±0.05 1.388±0.05 1.412±0.048 1.404±0.042 1.3853±0.0707 1.389±0.082 1.415±0.079	(Ertugrul et al., 2006) (Öz, 2006) (Sögüt et al., 2009) (Han and Demir, 2010) (Han and Demir, 2010) (Han and Demir, 2010) (Han and Demir, 2010) (Anand et al., 2015) (Anand et al., 2015) (Aylikci et al., 2015) (Anand et al., 2018) (Turhan et al., 2020)	1.3946±0.0162	-0.013 -0.059 -0.247 -0.126 -0.126 -0.126 -0.126 0.343 0.209 -0.128 -0.067 0.253	-0.018
Z=29, Cu	1.361±0.041	(Ertugrul et al., 2006)	1.3742±0.0133	-0.306	-0.041

	1.357±0.12 1.342±0.121 1.387±0.05 1.386±0.111 1.375±0.105 1.3523±0.0690 1.375±0.017 1.385±0.039	(Öz, 2006) (Söğüt et al., 2009) (Han and Demir, 2010) (Anand et al., 2015) (Anand et al., 2015) (Aylikci et al., 2015) (Mirji et al., 2015) (Anand et al., 2018)		-0.142 -0.265 0.247 0.106 0.008 -0.312 0.037 0.262	
Z=30, Zn	1.330±0.040 1.327±0.09 1.298±0.104 1.352±0.043 1.3439±0.045 1.3311±0.0679 1.345±0.008 1.338±0.085 1.354±0.082	(Ertuğrul et al., 2006) (Öz, 2006) (Söğüt et al., 2009) (Anand et al., 2015) (Anand et al., 2015) (Aylikci et al., 2015) (Mirji et al., 2015) (Akman,2016b) (Anand et al., 2018)	1.3441±0.0075	-0.346 -0.189 -0.442 0.181 -0.004 -0.19 0.082 -0.071 0.12	-0.096
Z=31, Ga	1.298±0.10 1.309±0.062	(Öz, 2006) (Akman,2016b)	1.3035±0.9217	-0.006 0.006	0.0000
Z=32, Ge	1.262±0.10 1.290±0.069	(Öz, 2006) (Akman,2016b)	1.2810±0.0568	-0.165 0.101	-0.032
Z=33, As	1.238±0.037 1.231±0.09 1.185±0.083	(Ertuğrul et al., 2006) (Öz, 2006) (Söğüt et al., 2009)	1.2294±0.0316	0.177 0.017 -0.5	-0.102
Z=34, Se	1.204±0.036 1.203±0.08 1.235±0.099 1.214±0.076	(Ertuğrul et al., 2006) (Öz, 2006) (Söğüt et al., 2009) (Akman,2016b)	1.2079±0.0288	-0.085 -0.058 0.263 0.075	0.049
Z=35, Br	1.200±0.048 1.174±0.07	(Ertuğrul et al., 2006) (Öz, 2006)	1.1817±0.396	0.046 -0.019	0.013
Z=36, Kr					
Z=37, Rb	1.12±0.05 1.123±0.045 1.128±0.07	(Puri et al., 1993) (Ertuğrul et al., 2006) (Öz, 2006)	1.1228±0.0302	-0.048 0.004 0.068	0.008
Z=38, Sr	1.10±0.05 1.104±0.055 1.102±0.07 1.341±0.107	(Puri et al., 1993) (Ertuğrul et al., 2006) (Öz, 2006) (Söğüt et al., 2009)	1.1223±0.0313 1.1019±0.0327	-0.378 -0.289 -0.265 1.962	0.257
Z=39, Y	1.07±0.05 1.081±0.06 1.082±0.064	(Puri et al., 1993) (Öz, 2006) (Akman,2016b)	1.1223±0.0313	-0.887 -0.61 -0.566	-0.688
Z=40, Zr	1.03±0.05 1.064±0.032 1.061±0.07 1.082±0.031 1.093±0.059	(Puri et al., 1993) (Ertuğrul et al., 2006) (Öz, 2006) (Turşucu et al., 2012) (Akman,2016b)	1.0684±0.0185	-0.72 -0.119 -0.102 0.377 0.398	-0.033
Z=41, Nb	1.02±0.05 1.042±0.031 1.044±0.06 1.028±0.031 1.041±0.052	(Puri et al., 1993) (Ertuğrul et al., 2006) (Öz, 2006) (Turşucu et al., 2012) (Akman,2016b)	1.0346±0.0179	-0.275 0.207 0.15 -0.184 0.116	0.003
Z=42, Mo	1.02±0.05 1.03±0.08 1.026±0.041 1.028±0.05 1.070±0.097 1.039±0.005 1.047±0.030 1.020±0.050	(Puri et al., 1993) (Santra et al., 2005) (Ertuğrul et al., 2006) (Öz, 2006) (Söğüt et al., 2009) (Bennal et al., 2010) (Turşucu et al., 2012) (Akman,2016b)	1.0386±0.0046	-0.37 -0.107 -0.305 -0.211 0.323 0.059 0.277 -0.37	-0.088

Z=43, Tc					
Z=44, Ru	1.041±0.029 1.020±0.043	(Turşucu et al., 2012) (Akman,2016b)	1.0344±0.0240	0.175 -0.292	-0.059
Z=45, Rh	0.992±0.029	(Turşucu et al., 2012)	0.992±0.029	0.0000	0.0000
Z=46, Pd	1.028±0.050 0.99±0.08 0.990±0.043 0.934±0.029 0.989±0.041	(Şimşek et al., 2003) (Santra et al., 2005) (Ertuğrul et al., 2006) (Turşucu et al., 2012) (Akman,2016b)	0.9720±0.0186 0.9895±0.0278	1.05 0.219 0.384 -1.103 0.378	0.186
Z=47, Ag	0.995±0.030 0.964±0.06 0.967±0.029 0.940±0.080 0.973±0.006 0.977±0.028 0.969±0.007 0.965±0.021 0.978±0.042	(Şimşek et al., 2003) (Baydaş,2005) (Ertuğrul et al., 2006) (Söğüt et al., 2009) (Bennal et al., 2010) (Turşucu et al., 2012) (George et al., 2014) (George et al., 2014) (Akman,2016b)	0.9715±0.0043	0.775 -0.125 -0.153 -0.393 0.203 0.194 -0.304 -0.303 0.154	0.005
Z=48, Cd	0.968±0.039 0.957±0.05 0.99±0.18 0.962±0.038 1.036±0.104 0.964±0.004 0.947±0.028 0.959±0.040	(Şimşek et al., 2003) (Baydaş, 2005) (Santra et al., 2005) (Ertuğrul et al., 2006) (Söğüt et al., 2009) (Bennal et al., 2010) (Turşucu et al., 2012) (Akman,2016b)	0.9637±0.0039	0.11 -0.134 0.146 -0.045 0.695 0.054 -0.591 -0.117	0.015
Z=49, In	0.957±0.035 0.950±0.028 0.951±0.006 0.941±0.041	(Şimşek et al., 2003) (Ertuğrul et al., 2006) (Bennal et al., 2010) (Akman,2016b)	0.9509±0.0057	0.172 -0.031 0.012 -0.239	-0.022
Z=50, Sn	0.928±0.037 0.935±0.05 0.943±0.037 0.942±0.005 0.944±0.027 0.936±0.041	(Şimşek et al., 2003) (Baydaş,2005) (Ertuğrul et al., 2006) (Bennal et al., 2010) (Turşucu et al., 2012) (Akman,2016b)	0.9417±0.0048	-0.367 -0.133 0.035 0.043 0.084 -0.138	-0.079
Z=51, Sb	0.912±0.027 0.926±0.06 0.924±0.037 0.899±0.040	(Şimşek et al., 2003) (Baydaş,2005) (Ertuğrul et al., 2006) (Akman,2016b)	0.9135±0.0182	-0.046 0.199 0.255 -0.330	0.019
Z=52, Te	0.908±0.03 0.909±0.027 0.923±0.046 0.888±0.017 0.895±0.023 0.887±0.040	(Ertuğrul et al., 2003) (Şimşek et al., 2003) (Ertuğrul et al., 2006) (George et al., 2014) (George et al., 2014) (Akman,2016b)	0.8970±0.0106	0.346 0.414 0.551 -0.449 -0.079 -0.242	0.090
Z=53, I	0.898±0.018 0.917±0.036	(Şimşek et al., 2003) (Ertuğrul et al., 2006)	0.9018±0.0161	-0.157 0.385	0.114
Z=54, Xe					
Z=55, Cs	0.897±0.036 0.887±0.013 0.900±0.05 0.917±0.041	(Ertuğrul,2002b) (Şimşek et al., 2003) (Baydaş,2005) (Akman,2016b)	0.8910±0.0114	0.159 -0.231 0.175 0.611	0.179
Z=56, Ba	0.874±0.037 0.905±0.04 0.890±0.05 0.882±0.026 0.832±0.042 0.878±0.005 0.878±0.009	(Ertuğrul,2002b) (Ertuğrul et al., 2003) (Baydaş,2005) (Ertuğrul et al., 2006) (Söğüt et al., 2009) (Streevidya et al., 2014) (Streevidya et al., 2014)	0.8783±0.0042 0.8787±0.0042	-0.115 0.664 0.233 0.140 -1.097 -0.046 -0.030	0.060

	0.910±0.043	(Akman,2016b)		0.734	
Z=57, La	0.889±0.037 0.892±0.04 0.883±0.06 0.873±0.035 0.975±0.060 0.884±0.071 0.897±0.045	(Ertuğrul,2002b) (Ertuğrul et al., 2003) (Baydaş,2005) (Ertuğrul et al., 2006) (Söğüt et al., 2009) (Akman,2016a) (Akman,2016b)	0.8931±0.0171 0.8859±0.0178	-0.101 -0.025 -0.162 -0.516 1.313 -0.125 0.081	0.066
Z=58, Ce	0.877±0.032 0.869±0.03 0.876±0.07 0.874±0.053 0.879±0.079 0.875±0.055 0.886±0.040	(Ertuğrul,2003) (Ertuğrul et al., 2003) (Baydaş,2005) (Ertuğrul et al., 2005) (Söğüt et al., 2009) (Akman,2016a) (Akman,2016b)	0.8757±0.0163	0.036 -0.196 0.004 -0.031 0.041 -0.012 0.238	0.012
Z=59, Pr	0.876±0.032 0.866±0.04 0.871±0.06 0.877±0.026 0.901±0.058	(Ertuğrul,2003) (Ertuğrul et al., 2003) (Baydaş,2005) (Ertuğrul et al., 2005) (Akman, 2016a)	0.8763±0.0165	-0.008 -0.238 -0.085 0.023 0.410	0.020
Z=60, Nd	0.877±0.032 0.861±0.05 0.872±0.035 0.867±0.072	(Ertuğrul, 2003) (Ertuğrul et al., 2003) (Ertuğrul et al., 2005) (Akman, 2016a)	0.8718±0.0205	0.137 -0.200 0.005 -0.064	-0.031
Z=61, Pm					
Z=62, Sm	0.877±0.032 0.864±0.04 0.859±0.05 0.862±0.026 0.849±0.057 0.854±0.065	(Ertuğrul, 2002a) (Ertuğrul et al., 2003) (Baydaş, 2005) (Ertuğrul et al., 2005) (Hnn et al., 2007) (Akman,2016a)	0.8642±0.0158	0.359 -0.005 -0.099 -0.072 -0.257 -0.152	-0.038
Z=63, Eu	0.855±0.07 0.853±0.034 0.851±0.057 0.847±0.065	(Baydaş,2005) (Ertuğrul et al., 2005) (Hnn et al., 2007) (Akman,2016a)	0.8520±0.0249	0.040 0.024 -0.016 -0.072	-0.006
Z=64, Gd	0.851±0.05 0.846±0.042 0.843±0.057 0.852±0.072	(Baydaş,2005) (Ertuğrul et al., 2005) (Hnn et al., 2007) (Akman,2016a)	0.8475±0.0261	0.062 -0.030 -0.072 0.059	0.005
Z=65, Tb	0.875±0.032 0.847±0.06 0.851±0.025 0.838±0.068	(Ertuğrul,2002a) (Baydaş,2005) (Ertuğrul et al., 2005) (Akman,2016a)	0.8574±0.0180	0.479 -0.166 -0.208 -0.276	-0.043
Z=66, Dy	0.843±0.06 0.852±0.025 0.835±0.058 0.869±0.078	(Baydaş,2005) (Ertuğrul et al., 2005) (Hnn et al., 2007) (Akman,2016a)	0.8500±0.0207	-0.110 0.062 -0.244 0.235	-0.014
Z=67, Ho	0.869±0.032 0.838±0.06 0.841±0.034 0.831±0.059	(Ertuğrul,2002c) (Baydaş,2005) (Ertuğrul et al., 2005) (Hnn et al., 2007)	0.8508±0.0204	0.480 -0.202 -0.247 -0.317	-0.072
Z=68, Er	0.795±0.032 0.833±0.05 0.843±0.051 0.827±0.060 0.826±0.072	(Ertuğrul,2002c) (Baydaş,2005) (Ertuğrul et al., 2005) (Hnn et al., 2007) (Akman,2016a)	0.8167±0.0212	-0.565 0.300 0.476 0.162 0.124	0.099
Z=69, Tm	0.836±0.033	(Ertuğrul et al., 2005)	0.836±0.033	0	0
Z=70, Yb	0.831±0.025	(Ertuğrul et al., 2005)	0.831±0.025	0	0
Z=71, Lu	0.836±0.042	(Ertuğrul et al., 2005)	0.836±0.042	0	0

Z=72, Hf	0.827±0.050 0.836±0.005	(Ertuğrul et al., 2005) (Bennal et al., 2010)	0.8359±0.0050	-0.177 0.014	-0.081
Z=73, Ta	0.829±0.002 0.822±0.049 0.831±0.007	(Ertuğrul et al., 1997) (Ertuğrul et al., 2005) (Bennal et al., 2010)	0.8291±0.0019	-0.036 -0.145 0.262	0.027
Z=74, W	0.855±0.004 0.823±0.041	(Ertuğrul et al., 1997) (Ertuğrul et al., 2005)	0.8547±0.0040	0.053 -0.770	-0.358
Z=75, Re	0.904±0.005 0.824±0.058	(Ertuğrul et al., 1997) (Ertuğrul et al., 2005)	0.9034±0.0050 0.904±0.005	0.085 -1.364	-0.640
Z=76, Os					
Z=77, Ir	0.819±0.025	(Ertuğrul et al., 2005)	0.819±0.025	0	0
Z=78, Pt	0.826±0.009 0.820±0.009 0.823±0.009	(Anand et al., 2014) (Anand et al., 2014) (Anand et al., 2014)	0.8230±0.0052	0.289 -0.289 0.000	0.000
Z=79, Au	0.815±0.008 0.820±0.024 0.821±0.004	(Ertuğrul et al., 1997) (Ertuğrul et al., 2005) (Bennal et al., 2010)	0.8198±0.0035	-0.550 0.008 0.226	-0.105
Z=80, Hg	0.815±0.008 0.811±0.032	(Ertuğrul et al., 1997) (Ertuğrul et al., 2005)	0.8148±0.0078	0.018 -0.115	-0.049
Z=81, Tl	0.795±0.009 0.816±0.024 0.809±0.006 0.803±0.007	(Ertuğrul et al., 1997) (Ertuğrul et al., 2005) (Streevidya et al., 2014) (Streevidya et al., 2014)	0.8045±0.0040	-0.965 0.473 0.624 -0.186	0.044
Z=82, Pb	0.805±0.012 0.809±0.040 0.814±0.006	(Ertuğrul et al., 1997) (Ertuğrul et al., 2005) (Bennal et al., 2010)	0.8121±0.0053	-0.541 -0.077 0.237	-0.127
Z=83, Bi	0.637±0.013 0.803±0.032	(Ertuğrul et al., 1997) (Ertuğrul et al., 2005)	0.6605±0.0120	-1.328 4.170	1.421
Z=84, Po					
Z=85, At					
Z=86, Rn					
Z=87, Fr					
Z=88, Ra					
Z=89, Ac					
Z=90, Th	0.636±0.013 0.774±0.056	(Ertuğrul et al., 1997) (Ertuğrul et al., 2005)	0.6431±0.0127 0.636±0.013	-0.391 2.280	0.944
Z=91, Pa					
Z=92, U	0.682±0.021 0.770±0.055	(Ertuğrul et al., 1997) (Ertuğrul et al., 2005)	0.6932±0.0196	1.351 2.172	1.761

La figure II.1 : qui est présente toutes les valeurs de z_i et \bar{z} en fonction du numéro atomique Z des éléments de ${}_{19}\text{K}$ à ${}_{92}\text{U}$. Il ressort de cette courbe la distribution de les valeurs de l'écart type (z_i) et Le z-score moyen (\bar{z}) pour la plupart des atomes de ${}_{19}\text{K}$ à ${}_{92}\text{U}$ (Sauf les valeurs de ces éléments ${}_{36}\text{Kr}$, ${}_{43}\text{Tc}$, ${}_{54}\text{Xe}$, ${}_{61}\text{Pm}$, ${}_{76}\text{So}$, ${}_{84}\text{Po}$, ${}_{85}\text{At}$, ${}_{86}\text{Rn}$, ${}_{87}\text{Fr}$, ${}_{88}\text{Ra}$, ${}_{89}\text{Ac}$, ${}_{91}\text{Pa}$ car il n'y a pas de valeurs expérimentales), où les valeurs de l'écart type (z_i) varie entre -0.90 et 0.80 et les valeurs de z-score moyen (\bar{z}) varie entre -0.70 et 0.94. Et le reste des valeurs de quelques éléments sont indiqué dans le tableau II.14 en gras (les valeurs inférieures ${}_{24}\text{Cr}$ (Han and Demir, 2010), ${}_{27}\text{Co}$ (Han and Demir, 2010), ${}_{46}\text{Pd}$ (Turşucu et al., 2012), ${}_{56}\text{Ba}$ (Söğüt et al., 2009), ${}_{75}\text{Re}$ (Ertuğrul et al., 2005), ${}_{83}\text{Bi}$ (Ertuğrul et al., 1997) ou des valeurs supérieures ${}_{24}\text{Cr}$ (Mirji et al., 2015), ${}_{38}\text{Sr}$

(Söğüt et al., 2009), $_{57}\text{La}$ (Söğüt et al., 2009), $_{83}\text{Bi}$ (Ertuğrul et al., 2005), $_{91}\text{Th}$ (Ertuğrul et al., 2005), $_{92}\text{U}$ (Ertuğrul et al., 1997), $_{92}\text{U}$ (Ertuğrul et al., 2005).

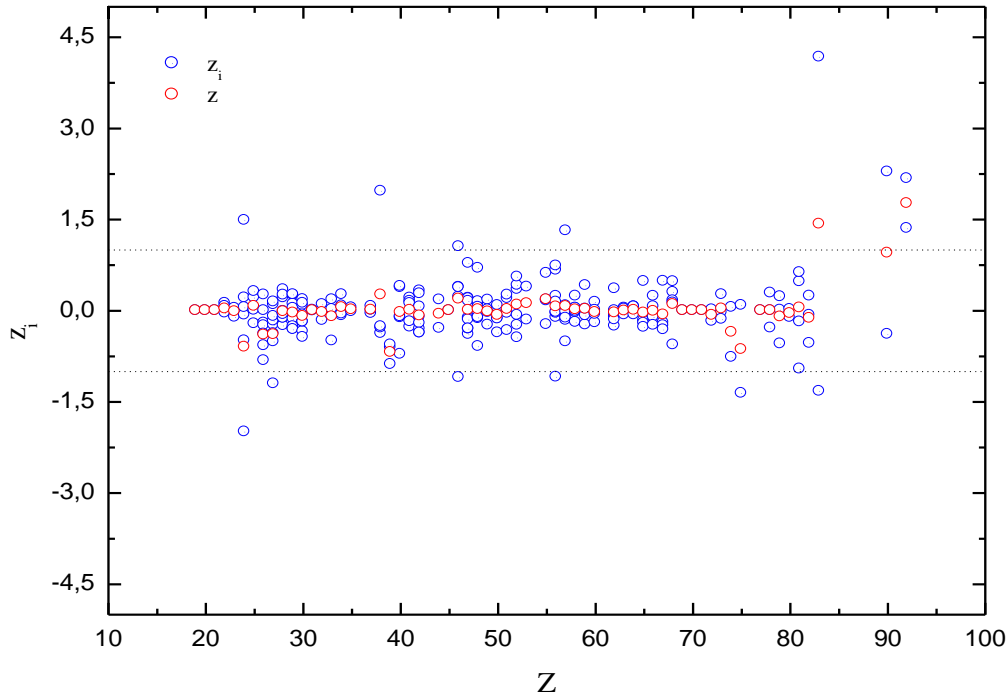


Figure II.1 : Les valeurs de l'écart type (z_i) et Le z-score moyen (\bar{z}) en fonction du numéro atomique Z des éléments de numéro atomique de $_{19}\text{K}$ à $_{92}\text{U}$.

II.4. Méthode du calcul

Pour calculer les valeurs semi-empirique, nous avons utilisé une méthode mathématique qui compte sur les valeurs pondérées recommandées et le rapport R où on a interpolé les figures **II.2/II.3** par une fonction analytique est basé sur la fit.

II.4.1. Méthode moindre carrée

C'est une méthode mathématique de calculer est utilisé pour déterminer la meilleure ligne droite qui passe par le centre du nuage de points pour minimiser les carrés des écarts des pointes.

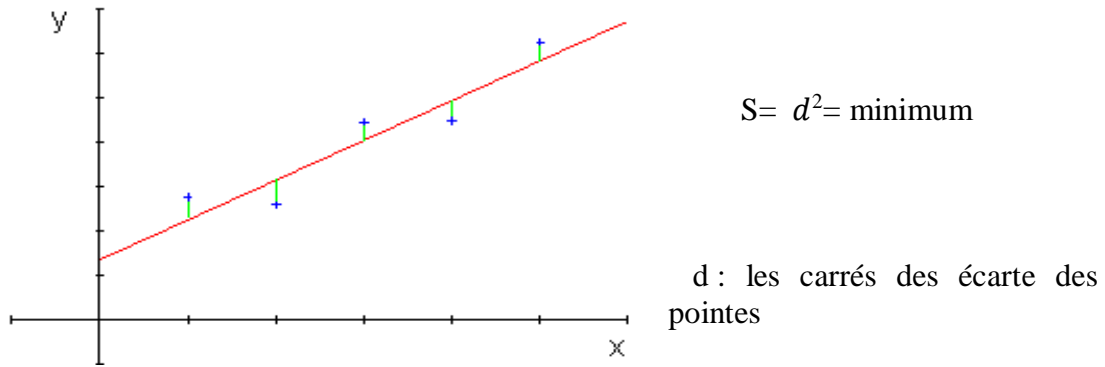


Figure II.2 : Droite de régression de Y en fonction de X.

La méthode des moindres carrés repose sur des approximations parce qu'elle est liée à la forme de la ligne (ligne droite, polynôme...) et à son équation (degrés 1...n). Dans ce travail, nous nous sommes appuyés sur l'approximation polynomiale des degrés 3.

II.4.1.1. Approximation polynomiale de degré 03

Soit un nuage de n points (x_i, y_i), on cherche une courbe polynomiale de degré 3

$$y = f(x) = a x^3 + b x^2 + c x + d \dots \dots \dots \text{équation degée03} \tag{II.5}$$

Qui passe au plus près des points au sens des moindres carrés, c'est-à-dire que la somme des carrés des distances des points du nuage à ceux des points de la parabole de même abscisse :

$$S = \sum_{i=1}^n [y_i - f(x)]^2 = \sum_{i=1}^n [y_i - ax^2 - bx - cx - d]^2 \tag{II.6}$$

Il y a des conditions nécessaires pour que cette somme soit minimum :

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial a} = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial b} = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial c} = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial d} = 0 \end{cases} \tag{II.7}$$

$$= \begin{cases} \frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^n [x_i^3] [y_i - (ax_i^3 + bx_i^2 + cx_i + d)] \\ \frac{\partial S}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^n [x_i^2] [y_i - (ax_i^3 + bx_i^2 + cx_i + d)] \\ \frac{\partial S}{\partial c} = -2 \sum_{i=1}^n [x_i] [y_i - (ax_i^3 + bx_i^2 + cx_i + d)] \\ \frac{\partial S}{\partial d} = -2 \sum_{i=1}^n [y_i - (ax_i^3 + bx_i^2 + cx_i + d)] \end{cases} \tag{II.8}$$

On tire après un calcul simple :

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n x_i^3 y_i - a \sum_{i=1}^n x_i^6 + b \sum_{i=1}^n x_i^5 + c \sum_{i=1}^n x_i^4 + d \sum_{i=1}^n x_i^3 = 0 \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i - a \sum_{i=1}^n x_i^5 + b \sum_{i=1}^n x_i^4 + c \sum_{i=1}^n x_i^3 + d \sum_{i=1}^n x_i^2 = 0 \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i - a \sum_{i=1}^n x_i^4 + b \sum_{i=1}^n x_i^3 + c \sum_{i=1}^n x_i^2 + \sum_{i=1}^n x_i = 0 \\ \sum_{i=1}^n y_i - a \sum_{i=1}^n x_i^3 + b \sum_{i=1}^n x_i^2 + c \sum_{i=1}^n x_i + nd = 0 \end{cases} \tag{II.9}$$

Donc on a simplifié :

$$\begin{cases} a \sum_{i=1}^n x_i^6 + b \sum_{i=1}^n x_i^5 + c \sum_{i=1}^n x_i^4 + d \sum_{i=1}^n x_i^3 = \sum_{i=1}^n x_i^3 y_i \\ a \sum_{i=1}^n x_i^5 + b \sum_{i=1}^n x_i^4 + c \sum_{i=1}^n x_i^3 + d \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i \\ a \sum_{i=1}^n x_i^4 + b \sum_{i=1}^n x_i^3 + c \sum_{i=1}^n x_i^2 + d \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n x_i y_i \\ a \sum_{i=1}^n x_i^3 + b \sum_{i=1}^n x_i^2 + c \sum_{i=1}^n x_i + nd = \sum_{i=1}^n y_i \end{cases} \quad (II.10)$$

On a écrit system la forme matricielle : $A.X = B$

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^6 & \sum_{i=1}^n x_i^5 & \sum_{i=1}^n x_i^4 & \sum_{i=1}^n x_i^3 \\ \sum_{i=1}^n x_i^5 & \sum_{i=1}^n x_i^4 & \sum_{i=1}^n x_i^3 & \sum_{i=1}^n x_i^2 \\ \sum_{i=1}^n x_i^4 & \sum_{i=1}^n x_i^3 & \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i^3 & \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i & n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^3 \cdot y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 \cdot y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i \\ \sum_{i=1}^n y_i \end{bmatrix} \quad (II.11)$$

II.4.2. Méthode Semi-empirique

Dans notre base de données de ${}_{19}\text{K}$ à ${}_{92}\text{U}$ (Reboul, 2022), il y a un manque de valeur expérimentale de certains éléments ${}_{36}\text{Kr}$, ${}_{43}\text{Tc}$, ${}_{54}\text{Xe}$, ${}_{61}\text{Pm}$, ${}_{76}\text{Os}$, ${}_{84}\text{Po}$, ${}_{85}\text{At}$, ${}_{86}\text{Rn}$, ${}_{87}\text{Fr}$, ${}_{88}\text{Ra}$, ${}_{89}\text{Ac}$, ${}_{91}\text{Pa}$ (un manque de transitions aux couches L, M et difficiles à manipuler). Donc on a utilisé une méthode simple qui obtenu une fonction analytique (moindre carré), pour déterminer les valeurs semi-empiriques.

1^{er} étape on a tracé la figure **II.3** qui présenter les valeurs moyennes recommander (η_{KL-wr}) en fonction du numéro atomique Z des éléments de ${}_{19}\text{K}$ à ${}_{92}\text{U}$ (Sauf les éléments ${}_{36}\text{Kr}$, ${}_{43}\text{Tc}$, ${}_{54}\text{Xe}$, ${}_{61}\text{Pm}$, ${}_{76}\text{So}$, ${}_{84}\text{Po}$, ${}_{85}\text{At}$, ${}_{86}\text{Rn}$, ${}_{87}\text{Fr}$, ${}_{88}\text{Ra}$, ${}_{89}\text{Ac}$, ${}_{91}\text{Pa}$ car il n'y a pas de valeurs expérimentales). Ensuite, nous proposons un polynôme d'ordre trois pour l'interpolation. Alors la fonction analytique utilisée pour cette dernière est la suivante :

$$\eta_{KL-wr} = f(Z) = \sum_{n=0}^3 a_n Z^n \quad (II.12)$$

$$f(Z) = 2.86342 - 0.07743Z + 9.94375 \times 10^{-4} Z^2 - 4.31273 \times 10^{-6} Z^3 \quad (II.13)$$

Le fit est représenté en trait plein dans les mêmes **figures II.3**

$$\text{Les coefficients de fit : } \begin{cases} a_0 = 2.86342 \\ a_1 = 0.07743 \\ a_2 = 9.94375 \times 10^{-4} \\ a_3 = -4.31273 \times 10^{-6} \end{cases}$$

Comme deuxième étape, calculons le rapport : $\mathbf{R} = \frac{\eta_{KL-\text{exp}}}{\eta_{KL-wr}}$ pour toutes les valeurs expérimentales des éléments de ${}_{19}\text{K}$ à ${}_{92}\text{U}$ (Sauf les éléments ${}_{36}\text{Kr}$, ${}_{43}\text{Tc}$, ${}_{54}\text{Xe}$, ${}_{61}\text{Pm}$, ${}_{76}\text{So}$, ${}_{84}\text{Po}$, ${}_{85}\text{At}$, ${}_{86}\text{Rn}$, ${}_{87}\text{Fr}$, ${}_{88}\text{Ra}$, ${}_{89}\text{Ac}$, ${}_{91}\text{Pa}$ car il n'y a pas de valeurs expérimentales). Le rapport est tracée dans la figure **II.4** en fonction du nombre atomique Z. Selon la distribution des valeurs de rapport nous proposons une fonction polynômiale de degré

trois pour l'interpolation. Alors la fonction analytique utilisée pour l'interpolation est la suivante :

$$R = g(Z) = \sum_{n=0}^3 b_n Z^n \tag{II.14}$$

$$g(Z) = 0.99666 - 3.14802 \times 10^{-4} Z + 1.27731 \times 10^{-5} Z^2 - 1.070202 \times 10^{-7} Z^3 \tag{II.15}$$

Le fit est représenté en trait plein dans les mêmes figures II.4

$$\text{Les coefficients de fit : } \begin{cases} b_0 = 0.99666 \\ b_1 = -3.14802 \times 10^{-4} \\ b_2 = 1.27731 \times 10^{-5} \\ b_3 = -1.070202 \times 10^{-7} \end{cases}$$

Définissant maintenant la probabilité de transfert lacunaire semi-empiriques $\eta_{KL-s-emp}$ par la formule suivante :

$$(\eta_{KL-s-emp}) = f((Z) \times g(Z)) \tag{II.16}$$

La figure II.3 : est présenté les valeurs moyennes pondérées recommandées (η_{KL-Wr}) en fonction du numéro atomique Z des éléments de ^{19}K à ^{92}U .

Il ressort de cette courbe les valeurs moyennes pondérées recommandées (η_{KL-Wr}) pour les atomes de ^{19}K à ^{92}U (sauf les valeurs de ces éléments ^{36}Kr , ^{43}Tc , ^{54}Xe , ^{61}Pm , ^{76}So , ^{84}Po , ^{85}At , ^{86}Rn , ^{87}Fr , ^{88}Ra , ^{89}Ac , ^{91}Pa car il n'y a pas de valeurs expérimentales), en fonction de numéro atomique Z, on remarque que toutes les valeurs décroissent de la valeur de 1,72 à 0,80 , (les éléments ^{83}Bi , ^{90}Th , ^{92}U est annulée Parce que ses valeurs pondérées recommandées sont hors de notre gamme)

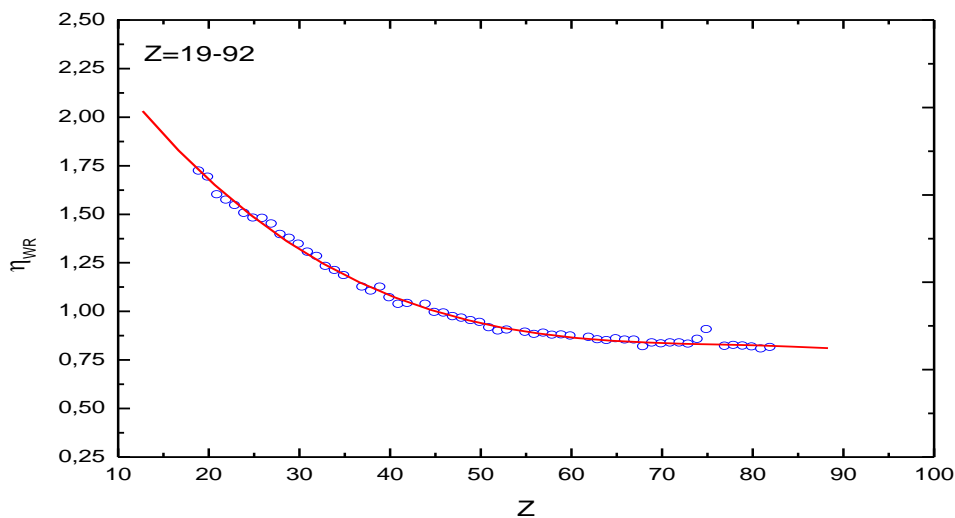


Figure II.3 : Les valeurs moyennes pondérées recommandée (η_{KL-Wr}) en fonction de numéro atomique Z des éléments de ^{19}K à ^{92}U .

La figure II.4 : est présenté les valeurs du rapport R en fonction du numéro atomique Z des éléments de ${}_{19}\text{K}$ à ${}_{92}\text{U}$.

Il ressort de cette courbe la distribution des valeurs de rapport R pour les atomes ${}_{19}\text{K}$ à ${}_{92}\text{U}$ en fonction de numéro atomique Z on nous remarque la plupart des valeurs varient entre 0.94 jusqu'à 1.04 , (sauf les valeurs de ces éléments ${}_{36}\text{Kr}$, ${}_{43}\text{Tc}$, ${}_{54}\text{Xe}$, ${}_{61}\text{Pm}$, ${}_{76}\text{So}$, ${}_{84}\text{Po}$, ${}_{85}\text{At}$, ${}_{86}\text{Rn}$, ${}_{87}\text{Fr}$, ${}_{88}\text{Ra}$, ${}_{89}\text{Ac}$, ${}_{91}\text{Pa}$, car il n'y a pas de valeurs expérimentales), mais il y a deux valeurs qui ne sont pas les mêmes ${}_{27}\text{Co}$ (Aylikci et al., 2015) il est inférieur aux nôtres résultats, ${}_{48}\text{Cd}$ (Söğüt et al., 2009) est supérieur aux nôtres résultats, (les éléments ${}_{83}\text{Bi}$, ${}_{90}\text{Th}$, ${}_{92}\text{U}$ est annulée Parce que ses valeurs pondérées recommandent sont hors de notre gamme).

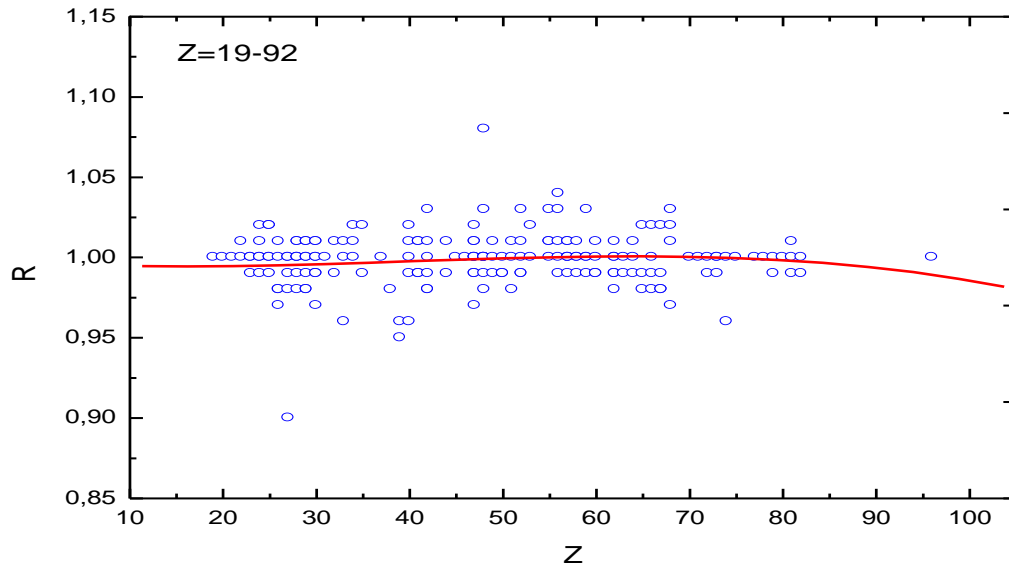


Figure II.4 : Les valeurs du rapport R en fonction de numéro atomique Z des éléments de ${}_{19}\text{K}$ à ${}_{92}\text{U}$.

II.5. Discussion et comparaison des résultats

Dans ce chapitre, nous avons calculé les valeurs semi-empiriques ($\eta_{KL-s-emp}$) pour les atomes de $_{19}\text{K}$ à $_{92}\text{U}$, et sont présentés dans le tableau **II.15** Les valeurs théoriques de Venugopala Rao et al. (1972) et les valeurs empiriques de Puri et al. (1993) et Schönfeld and Janßen (1996) sont aussi ajoutés dans le même tableau.

Pour bien comparer nos résultats de les valeurs semi-empiriques ($\eta_{KL-s-emp}$) avec, ceux théoriques et empiriques, ces derniers sont représentés sur la figure **II.5** en fonction du numéro atomique Z . Où il ressorte cette courbe que les valeurs des probabilités de transfert lacunaire de la couche K (η_{KL}) pour les atomes de $_{19}\text{K}$ à $_{92}\text{U}$ diminuent avec l'augmentation du numéro atomique par rapport à nos valeurs et autres auteurs valeurs également.

Alors, il est possible de voir que nos valeurs semi-empirique des probabilités de transfert lacunaire de la couche K ($\eta_{KL-s-emp}$) sont en très bon accord avec ceux valeurs théoriques et empiriques des autres auteurs pour tous les éléments de $_{19}\text{K}$ à $_{92}\text{U}$.

Concernant les valeurs empiriques, il est facile d'observer que nos valeurs semi-empiriques ($\eta_{KL-s-emp}$) sont bien conformes aux celles de Puri et al. (1993) et Schönfeld and Janßen (1996). De plus, nos données se diffèrent par un très acceptable pourcentage avec les valeurs empiriques de Puri et al. (1993) (l'écart varie entre 0.01% et 2%) pour la majorité des éléments, Schönfeld et Janßen (1996) (0.03%, 3.40%) pour tous les éléments de $_{19}\text{K}$ à $_{92}\text{U}$.

S'agissant les valeurs théoriques, la comparaison nous permet de dire nos valeurs semi-empirique des probabilités de transfert lacunaire ($\eta_{KL-s-emp}$) bon accord avec aux celles mesurées de Venugopala Rao et al. (1972), avec une déviation qui varie (de 0.04% à 4.45%) pour la majorité des éléments.

La différence relative (RD) entre les valeurs semi-empiriques obtenues et les autres calculs utilisant l'équation :

$$RD(\%) = \left| \frac{(\eta_{KL(emp/theo)} - \eta_{KL-s-emp})}{\eta_{KL-s-emp}} \right| \times 100 \quad (\text{II.17})$$

Comme conclusion de ce chapitre : après tous les calculs, nous avons observons que les valeurs des probabilités de transfert lacunaire de la couche K (η_{KL}) diminue à mesure que le numéro atomique augmente parce que les éléments lourds il a beaucoup de couches, de sorte que toutes les transitions sont confinées aux couches supérieures.

Tableau II.15 :présenté nos valeurs semi-empirique du probabilité de transfert lacunaire($\eta_{KL-s-emp}$) et valeurs théorique de Venugopala Rao et al. (1972) et les valeurs empiriques de Puri et al. (1993) et Schönfeld and Janßen (1996).

Z-élément	Ce travail	Autres travaux		
		Theo.	Emp.	
	$\eta_{KL-s-emp}$	Venugopala Rao et al. (1972)	Puri et al. (1993)	Schönfeld et Janßen (1996)
Z=19, K	1.7123	--	--	1.654
Z=20, Ca	1.6690	1.595	1.65	1.621
Z=21, Sc	1.6273	--	--	1.594
Z=22, Ti	1.5870	1.548	--	1.566
Z=23, V	1.5481	--	--	1.539
Z=24, Cr	1.5106	1.495	--	1.508
Z=25, Mn	1.4745	--	1.5	1.478
Z=26, Fe	1.4397	1.439	--	1.447
Z=27, Co	1.4063	--	--	1.418
Z=28, Ni	1.3741	1.375	--	1.388
Z=29, Cu	1.3432	--	--	1.357
Z=30, Zn	1.3135	1.316	1.34	1.326
Z=31, Ga	1.2850	--	--	1.294
Z=32, Ge	1.2577	1.255	--	1.263
Z=33, As	1.2316	--	--	1.232
Z=34, Se	1.2066	1.2	--	1.202
Z=35, Br	1.1826	--	1.19	1.174
Z=36, Kr	1.1598	1.149	1.16	1.149
Z=37, Rb	1.1380	--	--	1.125
Z=38, Sr	1.1172	1.104	--	1.102
Z=39, Y	1.0975	--	--	1.081
Z=40, Zr	1.0787	1.064	1.07	1.062
Z=41, Nb	1.0608	--	--	1.045
Z=42, Mo	1.0439	1.03	1.04	1.029
Z=43, Tc	1.0278	--	--	1.014
Z=44, Ru	1.0126	1	--	1
Z=45, Rh	0.9983	--	0.99	0.987
Z=46, Pd	0.9847	0.963	--	0.975
Z=47, Ag	0.9720	--	0.97	0.964
Z=48, Cd	0.9600	0.952	--	0.953
Z=49, In	0.9488	--	0.95	0.944
Z=50, Sn	0.9383	0.932	0.94	0.934
Z=51, Sb	0.9284	--	--	0.925
Z=52, Te	0.9192	0.914	0.92	0.917
Z=53, I	0.9107	--	--	0.909
Z=54, Xe	0.9027	0.899	0.9	0.902
Z=55, Cs	0.8954	--	--	0.895
Z=56, Ba	0.8885	0.887	0.89	0.888
Z=57, La	0.8823	--	--	0.882
Z=58, Ce	0.8765	0.876	--	0.876
Z=59, Pr	0.8712	--	--	0.871

Z=60, Nd	0.8663	0.865	0.87	0.866
Z=61, Pm	0.8619	--	--	0.861
Z=62, Sm	0.8579	0.857	--	0.857
Z=63, Eu	0.8542	--	0.86	0.853
Z=64, Gd	0.8509	0.85	--	0.85
Z=65, Tb	0.8479	--	--	0.847
Z=66, Dy	0.8452	0.843	--	0.843
Z=67, Ho	0.8428	--	0.84	0.841
Z=68, Er	0.8406	0.836	--	0.838
Z=69, Tm	0.8386	--	--	0.835
Z=70, Yb	0.8369	0.831	0.84	0.833
Z=71, Lu	0.8352	--	--	0.831
Z=72, Hf	0.8337	0.826	--	0.829
Z=73, Ta	0.8324	--	--	0.827
Z=74, W	0.8311	0.821	0.83	0.825
Z=75, Re	0.8298	--	0.82	0.823
Z=76, Os	0.8286	0.816	--	0.821
Z=77, Ir	0.8274	--	0.82	0.819
Z=78, Pt	0.8262	0.813	0.82	0.818
Z=79, Au	0.8249	--	--	0.816
Z=80, Hg	0.8235	0.809	0.81	0.813
Z=81, Tl	0.8221	--	--	0.812
Z=82, Pb	0.8205	0.806	--	0.811
Z=83, Bi	0.8187	--	0.81	0.809
Z=84, Po	0.8168	0.805	--	0.807
Z=85, At	0.8147	--	--	0.805
Z=86, Rn	0.8123	0.802	--	0.804
Z=87, Fr	0.8097	--	--	0.803
Z=88, Ra	0.8068	0.798	0.8	0.801
Z=89, Ac	0.8036	--	--	0.799
Z=90, Th	0.8001	0.795	0.8	0.797
Z=91, Pa	0.7962	--	--	0.795
Z=92, U	0.7919	0.793	0.79	0.794

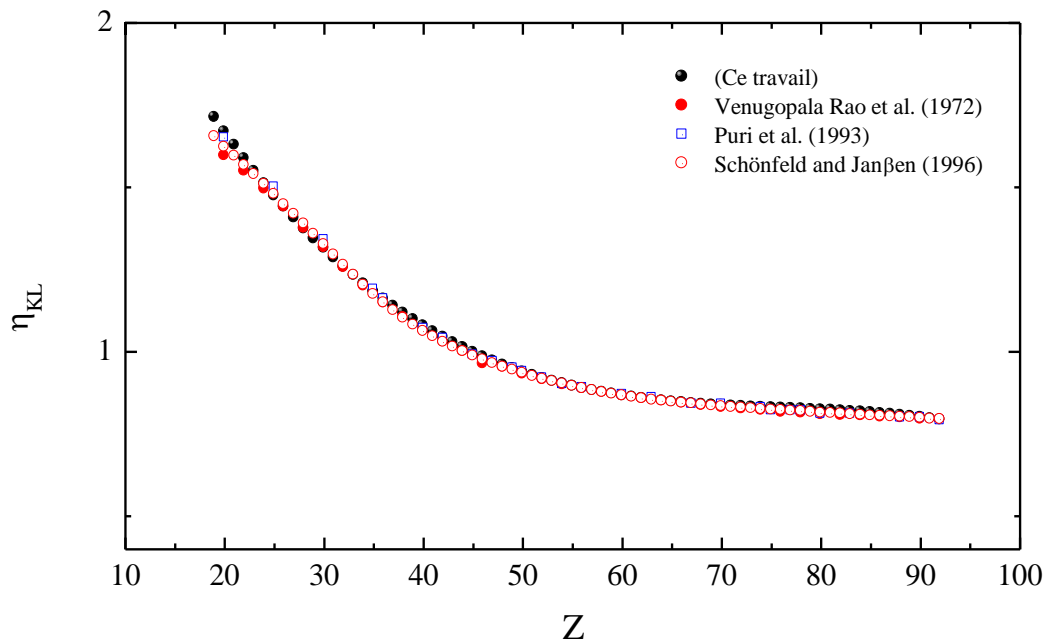


Figure II.5 : Nos valeurs semi-empirique du probabilité de transfert lacunaire ($\eta_{KL\text{-semi-emp}}$) comparer aux valeurs théorique de Venugopala Rao et al. (1972) et les valeurs empiriques de Puri et al. (1993) et Schönfeld et Janßen (1996).

References Bibliographies

Akman F., Experimental values of K to Li sub-shell, K to L, and K to M shell vacancy transfer probabilities for some rare earth elements. *Appl. Radiat. Isot.*, 115 (2016 a) 295–303.

Akman F., K to L shell vacancy transfer probabilities and Auger electron emission ratios for elements in the atomic range $30 \leq Z \leq 58$. *Can. J. Phys.*, 94 (2016 b) 679–686.

Alım B., Uğurlu M., Han I., Demir L. Investigation of alloying effects on XRF parameters of 3d transition metals in Permendur49, Kovar and Ti50 Co50 alloys. *J. Radiat. Res. Appl. Sci.*, 11 (2018) 144–149.

Anand L. F. M., Gudennavar S. B., Bubbly S. G., and Kerur B. R. K-Shell X-Ray Fluorescence Parameters of a Few Low Z Elements. *J. Exp. Theor. Phys.*, 126 (2018) 1–7.

Anand L. F. M., Gudennavar S. B., Bubbly S. G., and Kerur B. R. $K\beta$ to $K\alpha$ X-Ray Intensity Ratios and K to L Shell Vacancy Transfer Probabilities of Co, Ni, Cu, and Zn. *J. Exp. Theor. Phys.*, 121 (2015) 961–965.

Anand L. F. M., Gudennavara S. B., Bubbly S. G. and Kerur B. R. K-Shell X-Ray Intensity Ratios and Vacancy Transfer Probabilities of Pt, Au, and Pb by a Simple Method. *J. Exp. Theor. Phys.*, 119 (2014) 392–397.

Apaydın G, Tıraşoğlu E. Calculation of vacancy transfer probabilities from K to L shell using the X-ray fluorescence parameters. *Radiat. Phys. Chem*, 81 (2012) 1593–1594.

Aylikci V., Kahoul A., Kup Aylikci N., Tıraşoğlu E., And Karahan I. H. Empirical, Semi-Empirical and Experimental Determination of K X-Ray Fluorescence Parameters of Some Elements in the Atomic Range $21 \leq Z \leq 30$. *Spectr. Lett.*, 4, (2015) 331–342.

Baydas E., Determination of Ratios of Emission Probabilities of Auger Electrons and K to L Shell Radiative Vacancy Transfer Probabilities for 16 Elements from Ag to Er at 59.5 keV. *Instrum. Sci. Technol.*, 33 (2005) 461–471.

Bennal A.S., Niranjan K.M., Badiger N.M. Determination of K to L shell total vacancy transfer probabilities using a weak gamma source: An alternative method. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf*, 111 (2010) 1363–1371.

Boukelkoul M., Propriétés magnéto-optiques des couches ultraminces et des slabs à base de métaux de transition. Thèse de doctorat, Université Sétif 1, Algérie, 29/06/2013.

Cengiz E., Aylikci V., Kaya N., Apaydın G., Tıraşoğlu E. Chemical effects on K and L shell production cross sections and transfer probabilities in Nb compounds. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 278 (2008) 89–96.

Cengiz E., Tıraşoğlu E., Aylıkçı V., Apaydın G. The investigations on K and L X-ray fluorescence parameters of gold compounds. *Radiat. Phys. Chem*, 79 (2010) 809–815.

Elif Ö.Z. Determination of ratios of emission probabilities of Auger electrons and K–L-shell radiative vacancy transfers probabilities for 17 elements from Mn to Mo at 59.5 keV. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 97 (2006) 41–50.

Ertugral B., Apaydin G., Baltas H., Çevik U., Kobya A.İ., Ertugrul M. Measurement of vacancy transfer probabilities from K to L shell for high atomic number elements. *Spectrochimica Acta Part B*, 60 (2005) 519–524.

Ertuğral B., Apaydın G., Tekbıyık A., Tıraşoğlu E., Çevik U., Kobya A.İ. and Ertuğrul M. Determination of probabilities of vacancy transfer from K to L shell using K X-ray intensity ratios. *Eur. Phys. J. D*, 37 (2006) 371–375.

Ertugral B., Cevik U., Tirasoglu E., Kopya A.I., Ertugrul M., Dogan O. Measurement of K to L shell vacancy transfer probabilities for the elements $52 \leq Z \leq 68$. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 78 (2003) 163–169.

Ertugrul M. Determination of Probabilities of Vacancy Transfer From The K To The Li Subshell Using L X-Ray Production Cross-Sections. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 36 (2003) 2275–2282.

Ertugrul M. Measurement of total, radiative and radiationless (Auger) vacancy transfer probabilities from K to Li subshell of Sm and Tb. *J. Radioanal. Nucl. Chem.*, 252 (2002 a) 545–550.

Ertugrul M. Measurement of total, radiative and radiationless (Auger) vacancy transfer probabilities from K to Li sub-shells of Cs, Ba and La. *J. Anal. At. Spectrom.*, 17 (2002 b) 64–68.

Ertugrul M. Measurement of total, radiative and radiationless (Auger) vacancy transfer probabilities from K to Li ($i=1, 2, 3$) subshell of Ho and Er. *Spectrochimica Acta Part B*, 57 (2002 c) 63-71.

Ertuğrul M., Doğan O., Şimşek Ö. and Turgut Ü. Measurement of probabilities for vacancy transfer from the K to L shell of the elements $73 \leq Z \leq 92$. *Phys. Rev. A*, 55 (1997) 305-308.

Fatih M, Turhan, Turşucu A, Akman F, Akdemir F, Durak R. Chemical effect on K Shell X-ray fluorescence parameters for some Mn and Ni Compounds. *Radiat. Phys. Chem*, 168 (2020) 108564.

George L, Gudennavar S.B., Joseph D, and Bubbly S.G. K shell X-ray intensity ratios and vacancy transfer probabilities of Fe, Ag, and Te following electron capture decay. *Can. J. Phys.*, 92 (2014) 1301–1304.

Han I., Demir L. Alloying effect on K to L shell vacancy transfer probabilities in 3d transition metals. *Radiat. Phys. Chem*, 79 (2010) 1174–1179.

Han I., Demir L., Ağbaba M. Measurements of L X-ray production cross sections, L subshell fluorescence yields and K to L shell vacancy transfer probabilities. *Radiat. Phys. Chem*, 76 (2007) 1551–1559.

Ibessaten L., Lahbib Ch. Influence de quelques paramètres physico-chimiques sur le rendement de la réaction de synthèse du tribromure de gadolinium. Mémoire de master, Université de Béjaïa, (2016).

Lemmouchi M., Propriétés réactives des trillâtes des lanthanides et des actinides. Mémoire de magister, université de Batna, (2010).

Meddah S., Etude des paramètres atomiques intrinsèques pour l'émission des rayons X : Rapport de l'intensité de la raie L. Mémoire de master, université de Bordj Bou-Arréridj, (2021).

Mirji S, Bennial A.S., Badiger N.M., Tiwari M.K., Lodha G.S. Chemical sensitivity of K-L vacancy transfer probability in compounds of 3d atoms using synchrotron radiation. *Chem. Phys. Lett.*, 634 (2015) 271–276.

Mirji S, Bennial A.S., Krishnananda, Badiger N.M., Tiwari M.K., and Lodha G.S. Determination of K–L vacancy transfer probabilities of some 3d elements using synchrotron radiation. *Can. J. Phys.* 93 (2015) 760–764.

Puri S., Mehta D., Chand B., Singh N and Trehan P.N. Measurements of K to L shell vacancy transfer probability for the elements $37 \leq Z \leq 42$. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, 73 (1993) 443-446.

Puri S., Mehta D., Chand B., Singh N., Hubbell J.H., and Trehan P.N. Production of L_i subshell and M shell vacancies following inner-shell vacancy production. *Nucl. Instrum Methods Phys. Res. B*, 83 (1993) 21-30.

Rebouli H., Les probabilités de transfert lacunaire de la couche K (η_{KL}) : Base de données. Mémoire de master, université de Bordj Bou-Arréridj, (2022).

Santra S., Mandal A.C., Mitra D., Sarkar M., Bhattacharya D. Measurement of the K to L shell vacancy transfer probabilities for Mo, Pd and Cd in photon impact. *Radiat. Phys. Chem.*, 74 (2005) 282–287.

Schönfeld E., Janßen H. Evaluation of atomic shell data. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* 369 (1996) 527-533.

Şimşek Ö., Karagöz D., Ertugrul M. Measurement of K to L shell vacancy transfer probabilities for the elements $46 \leq Z \leq 55$ by photoionization. *Spectrochimica Acta Part B*, 58 (2003) 1859–1865.

Söğüt Ö, Büyükkasap E, Küç Ükönder A and Tarakç Ioğlu T. Measurement of vacancy transfer probability from K to L shell using K-shell fluorescence yields. *Pramana – J. Phys.*, 73 (2009) 711-718.

Söğüt Ö. Measurement of η_{KL} and η_{KM} vacancy transfer in Cr_xNi_{1-x} and Cr_xAl_{1-x} alloys. Phys. Scr. 73 (2006) 466–470.

Sreevidyal P. V., Gudennavar1 S. B., Joseph D and Bubbly S. G. K shell X-ray intensity ratios, K Li, K-L and K-M vacancy transfer probabilities of Ba and Tl following internal conversion process. Can. J. phys., 92 (2014) 1489-1493.

Turhan M.F., Turşucu A., Akman F., Akdemir F., Durak R. Chemical effect on K Shell X-ray fluorescence parameters for some Mn and Ni compounds. Radiat. Phys. Chem., 168 (2020) 108564.

Turşucu A., Önder P., Eroğlu M., Demir D. Determination of K–L total vacancy transfer probabilities using a weak gamma source in 2p geometrical configuration. Appl. Radiat. Isot., 70 (2012) 1509-1511.

Uğurlu M and Demir L., K X-ray fluorescence parameters of some fourth period elements in a magnetic field. Spectr. lett., 53 (2020) 163-171.

Uğurlu M., Akkuş T and Demir L. The magnetic field effect of K X-ray fluorescence parameters of elements in the range $39 \leq Z \leq 48$. Can. J. Phys., 98 (2020) 111-118.

Venugopala Rao P., Hsiung Chen M., and Crasemann B. Atomic Vacancy Distributions Produced by Inner-Shell Ionization. Phys. Rev. A, 5 (1972) 997-1012.

Zidi A., Calcul du rapport d'intensité d'émission des rayons X ($K\beta/K\alpha$) des éléments lourds. Mémoire de master, université de Bordj Bou-Arredj, (2021).

CONCLUSION GENERALE :

Nous avons présenté dans ce travail les résultats des calculs semi-empirique de la probabilité de transfert lacunaire de la couche K (η_{KL}) des éléments de numéro atomique $19 \leq Z \leq 92$.

1^{re} étape : On a utilisé le logiciel de calcul Excel pour calculer les valeurs moyennes pondérées (η_{KL-W}) et l'incertitude $\Delta(\eta_{KL})_W$ des probabilités de transfert lacunaire de la couche K à l'aide de la base de données des valeurs expérimentales. Après ça, nous avons calculé l'écart type (z_i) et le z-score moyen (\bar{z}).

Et pour trouver des bonnes valeurs, nous avons choisi une gamme [-1,1] dépend de (z_i). Ensuite, on a rejeté toutes les valeurs qui n'appartiennent pas à la gamme et nous avons recalculé les valeurs moyennes pondérées recommandées (η_{KL-Wr}) et l'incertitude $\Delta(\eta_{KL})_{Wr}$ et les valeurs de rapport R.

Comme 2^e étape : pour calculer les valeurs semi-empirique ($\eta_{KL-s-emp}$) on a utilisé des simples fonctions analytiques qui compter sur les valeurs pondérées et le rapporte R, et à l'aide du logiciel Origine, nous avons représenté les courbes issues de ces calculs que nous avons effectués. Ces résultats ont été présentés dans un tableau et comparés à des autres travaux théoriques et empiriques.

Après la comparaison, les résultats obtenus sont en très bons accords avec les résultats théoriques et empiriques des autres auteurs.

Après avoir étudié les valeurs des éléments atomiques sur l'intervalle $19 \leq Z \leq 92$, notre observation a été :

- ❖ Presque la plupart des atomes de ${}_{19}\text{K}$ à ${}_{92}\text{U}$ ont été couverts.
- ❖ Nouveaux résultats des calculs semi-empirique de la probabilité de transfert des lacunes de la couche K (η_{KL}) des éléments de numéro atomique $19 \leq Z \leq 92$.
- ❖ Nous avons également observé que les valeurs de (η_{KL}) diminuent à mesure que le numéro atomique de l'atome augmente, en raison de la diminution des transitions entre les deux couches étudiées.

Résumé

Dans ce travail, le calcul semi-empirique de la probabilité de transfert lacunaire de la couche K vers L (η_{KL}) pour les atomes de ${}_{19}K$ à ${}_{92}U$ est basé sur des valeurs expérimentales dans la base de données, où nous avons calculé ces valeurs semi-empiriques ($\eta_{KL-s-emp}$) en s'appuyant sur une méthode mathématique simple, puis nous avons comparé les valeurs obtenues avec les valeurs empiriques et théoriques d'autres auteurs, et les résultats sont en très bons accords avec eux.

Mots-clés : η_{KL} , probabilité de transfert lacunaire de la couche K vers L, valeurs moyennes pondérées, valeurs semi-empirique.

Abstract

In this work, the semi-empirical calculation of the probability of vacancy transfer from the K shell to L (η_{KL}) for atoms from ${}_{19}K$ to ${}_{92}U$ is based on experimental values in the database, where we calculated these semi-empirical values ($\eta_{KL-s-emp}$) based on a simple mathematical method, then we compared the values obtained with the empirical and theoretical values of other authors, and the results are in very good agreements with them.

Keywords: η_{KL} , probability of vacancy transfer from the K layer to L, weighted mean values, semi-empirical values.

المخلص

في هذا العمل، يستند الحساب شبه التجريبي لاحتمال نقل الشغور من طبقة K الى الطبقة L (η_{KL}) للذرات من ${}_{19}K$ إلى ${}_{92}U$ على القيم التجريبية في قاعدة البيانات، حيث قمنا بحساب هذه القيم شبه التجريبية $\eta_{KL-s-emp}$ ، بالاعتماد على طريقة رياضية بسيطة، بعد ذلك قمنا بمقارنة القيم المتحصل عليها مع قيم تجريبية ونظرية لمؤلفين آخرين، وكانت النتائج متوافقة للغاية معهم.

الكلمات المفتاحية: η_{KL} ، احتمالية نقل الشغور، القيم المتوسطة الموزونة، القيم شبه التجريبية.