



Mémoire de fin d'études

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

Filière : Physique
Option : Physique des Matériaux

THÈME :

Détermination du facteur de saut d'absorption de la couche K (J_K)
dans le cas des lanthanides ($57 \leq Z \leq 71$).

Préparé par : BOUARISSA MAROUA

Soutenu le : 28/05/2024

Devant le jury :

Président :	DAOUDI Salim	Pr	Université de BBA
Rapporteur :	KAHOUL Abdelhalim	Pr	Université de BBA
Examineur :	KHALFALLAH Farid	MCA	Université de BBA

Année Universitaire 2023-2024

DÉDICACE



Je dédie ce travail en signe de respect et de reconnaissance à mes très chers parents qui ont œuvré à la réussite de mes études. Je leur exprime ma profonde gratitude et mes sincères remerciements pour leur courage. Je vous dois ce que je suis aujourd'hui grâce à votre amour, à votre patience et à vos innombrables sacrifices.

Je le dédie aussi à mes frères Sami et Mohamed, et mes sœurs Asma, Bouthaina, Nada, Houda et Kifaya, qui m'avez toujours soutenu et encouragé durant ces années d'études. Je n'oublie pas mes amis.



Marcua Bouarissa



REMERCIEMENTS

Avant tout, je remercie ALLAH le tout-puissant de m'avoir donné le courage, la volonté, la santé et la patience de mener à terme ce présent travail.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à mon Directeur de mémoire Pr. Abdelhalim Kahoul de m'avoir encadré, orienté, aidé à avancer dans ce travail. Je le remercie aussi pour sa conseil, sa patience, et 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 faire l'honneur de présider le jury de ce mémoire.

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

J'adresse mes sincères remerciements à tous les enseignants sans exception pour leurs efforts fournis durant ces cinq années.

Je remercie mes très chers parents, qui ont toujours été là pour moi, « Vous avez tout sacrifié pour vos enfants n'épargnant ni santé ni efforts. Vous m'avez donné un magnifique modèle de labeur et de persévérance. Je suis redevable d'une éducation dont je suis fier ».

Je remercie mes frères, et mes sœurs, pour leur encouragement et leur soutien moral.

Je ne saurais oublier de remercier tous mes collègues et tous mes Amies pour leur sincère amitié et confiance, et à qui je dois ma reconnaissance et mon attachement.

Je tiens à remercier toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin à la réussite de ce travail.

Table des matières

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

Chapitre I

Atomes et lumière : interaction matière-rayonnement

I.1. Introduction	3
I.2. Rappels théoriques	3
I.2.1. L'atome	3
I.2.2. L'atome et de mécanique quantique	5
I.2.3. Couches électroniques	7
I.2.4. Niveaux d'énergie des électrons atomiques	7
I.2.5. Loi de Moseley	9
I.3 Les Transitions électroniques	9
I.3.1. Règles de sélections	9
I.3.2. Transitions électroniques entre niveaux	10
I.3.3. Notation de Siegbahn	12
I.4. Rayonnement	14
I.5. Classification des rayonnements	14
I.5.1. Classification selon la nature du rayonnement	14
a. Rayonnements électromagnétiques	15
b. Rayonnements particuliers	17
I.5.2. Classification selon leur effet sur la matière	19
a. Rayonnements ionisants	19
b. Rayonnement non ionisant	20
I.6. Interaction	21
I.6.1. Interaction des particules chargées	21
I.6.2. Interaction des électrons	23
I.6.3. Interaction des rayons γ dans la matière	23
I.6.4. Les modes d'interaction des photons	24
a. Effet photoélectrique	24
b. La diffusion incohérente ou effet Compton	25
c. La diffusion Rayleigh	25
d. Production (création) de paires	26
e. Compétition entre les trois effets	27
I.6.5. Interaction matière-rayons X	28
I.7. La loi d'atténuation du rayonnement dans la matière	28
I.8. La couche demi-atténuation	30
I.9. Ionisation en couche électronique interne	31
I.10. Excitation et désexcitation des couches internes des atomes	32
a. Excitation des couches internes des atomes	32
b. Désexcitation des couches internes des atomes	32
I.11. Transition radiative et non radiative	33

Table des matières

I.12. Fluorescence X	34
a. La fluorescence	34
b. Principe de fluorescence X	34
c. Rendement de fluorescence	35
I.13. L'effet Auger	36
I.14. Les transitions Koster-Kronig	37
I.15. La section efficace	40
I.16. la relation entre η_{KL} et $\omega_K, \frac{K_\beta}{K_\alpha}$	41
Références Bibliographique	42

Chapitre II

Calcul empirique et semi-empirique du rapport de saut J_k

II.1. Introduction	46
II.2. Mesure du facteur de saut d'absorption (J_K)	46
II.3. Les lanthanides	50
II.3.1. Définition	50
II.3.2. La configuration électronique	51
II.3.3. Classification des Terres Rares	52
II.3.4. Les Propriétés des terres rares	53
II.4. La méthode de moindre carré	53
II.5. Méthode de calcul	58
II.5.1. Base de données	58
II.5.2. Calcul empirique	60
II.5.3. Calcul semi-empirique	62
II.6. Discussion et comparaison des résultats	64
Références Bibliographies	67
Conclusion générale	70

CHAPITRE I

Figure I.1 : le modèle atomique (Kaaloul, 2023)	5
Figure I.2 : Les couches électroniques (Hamouda, 2015)	7
Figure I.3 : transition entre les niveaux (Bouhebel, 2023)	11
Figure I.4 : Transitions permises entre les couches électroniques (Zschornack, 2007)	11
Figure I.5 : Niveaux d'énergie et quelques transitions électroniques permises (Bendjedi, 2018)	14
Figure I.6 : Les rayonnements électromagnétiques (Kaaloul, 2023)	15
Figure I.7 : constitution des rayonnements (ionisant, non ionisant) (Pouthier, 2006)	21
Figure I.8 : Interaction des particules chargées avec la matière (bouhebel, 2023)...	22
Figure I.9 : Modes d'interaction des photons avec la matière (Messaoudene, 2007).	23
Figure I.10 : Effet photoélectrique (Stan, 2010).....	24
Figure I.11 : Diffusion Compton (Stan, 2010)	25
Figure I.12 : La diffusion Rayleigh (diffusion élastique) (Stan, 2010).....	26
Figure I.13 : La production de paires (Stan, 2010).....	27
Figure I.14 : Probabilités de réalisation des effets photoélectrique, Compton et de création des paires en fonction de l'énergie	27
Figure I.15 : 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 (bouhebel, 2023)	30
Figure I.16 : l'atténuation d'un faisceau de photons dans la matière (Dahi and Meherchi, 2011)	30
Figure I.17 : L'ionisation en couche électronique interne (Ben Abdelouahed, 2004)	31
Figure I.18 : Excitation et désexcitation d'atome.....	33
Figure I.19 : désexcitation par émission fluorescente. (Picard, 2015)	35
Figure I.20 : Le rendement de fluorescence ω en fonction du numéro atomique pour la couche (Bendjedi, 2018).	36
Figure I.21 : Émissions X et émission Auger (noir : l'état électronique est occupé; blanc : l'état électronique est vide). (Naidji, 2021).....	37
Figure I.22 : Le diagramme schématique montrant (a) $L1 - L3M4$, (b) $L1 - L3M5$, (c) $L2 - L3N4$, (d) $L2 - L3N5$ and (e) $L1 - L2N4$, CKCK processus de transition (SinghKainth, 2018).....	39

CHAPITRE II

Figure II.1 : Classification périodique des éléments.....	50
Figure II.2 : Droite de régression des moindres carrés (Zidi, 2021).	54
Figure II.3 : les valeurs expérimentales du rapport de saut pour les lanthanides en fonction du numéro atomique, le trait plein, est représentée.	61
Figure II.4 : la variation des valeurs moyennes pondérée recommandées pour les Lanthanides en fonction du nombre atomique.....	62
Figure II.5 : la distribution des résultats de le rapport $R = \frac{J_{K-exp}}{J_{K-w}}$ en fonction de numéro atomique Z pour les lanthanides ($57 \leq Z \leq 71$).....	63
Figure II.6 : Présent résultats des valeurs semi-empiriques $J_{K-s-emp}$ et empiriques J_{K-emp} du rapport de saut et ceux théoriques et empiriques des autres auteurs en fonction du numéro atomique Z	65

CHAPITRE I

Tableau I.1 : la masse et charge des particules.....	5
Tableau I.2 : Nombres Quantiques (Myers, 2003).....	6
Tableau I.3 : La configuration électronique et le moment angulaire total. (Benoit, 1987).	8
Tableau I.4 : Les niveaux de transition en utilisant les notations empiriques et quantiques.	12
Tableau I.5 : Corrélation entre la configuration électronique nlj (EC), les notations Siegbahn et IUPAC pour les transitions radiatives.....	13
Tableau I.6 : Classification des rayonnements ionisants (Bekrar, 2022).	20

CHAPITRE II

Tableau II.1 : Configurations électroniques des lanthanides (Weibel, 2005).....	51
Tableau II.2 : Valeurs expérimentales du rapport saut (JK) éléments de numéro atomique $57 \leq Z \leq 71$ (lanthanides) (Benattia, 2023).	59
Tableau II.3 : Coefficients de l'interpolation.	61
Tableau II.4 : les Coefficients de l'interpolation dès les deux formules $g(Z)$ et $h(Z)$	64
Tableau II.5 : Présent calcul des valeurs empiriques et semi-empiriques pour les cibles de ^{57}La à ^{71}Lu comparé aux valeurs théoriques de (Berger et al., 2005) Et empiriques de (Broll., 1986) et (Budak et al., 2003).	64
Tableau II.6 : Les calculs de différence relative pour les valeurs empiriques J_{K-emp} et semi-empiriques $J_{K-s-emp}$ du rapport de saut des autres auteurs.....	66

Introduction générale

INTRODUCTION GENERALE

Introduction Générale

La physique, dont l'objectif initial était d'établir les lois de la nature, a contribué à des avancées technologiques de premier plan en permettant la réalisation, par exemple, des lasers et des horloges atomiques. Elle a aussi ouvert un champ considérable de recherches fondamentales, allant de l'optique quantique à la physico-chimie des molécules.

Depuis l'Antiquité, les philosophes grecs ont émis une hypothèse sur la nature de la matière, selon laquelle la matière est constituée de petits éléments indivisibles appelés atomes. À la fin du 19^{ème} siècle, les études sur les atomes et les molécules ont commencé, puis se sont développées avec l'élaboration de la théorie quantique au 20^{ème} siècle, où de nombreuses expériences ont été menées dans le domaine de la physique atomique, une branche de la physique qui s'intéresse à l'étude des propriétés et du comportement des atomes au niveau atomique et subatomique. Parmi ces expériences, on peut citer l'expérience de Rutherford, qui visait à déterminer la structure de l'atome. Cette expérience a montré que l'atome est constitué d'une charge centrale, nouvellement appelée noyau de l'atome (qui contient la majeure partie de la masse de l'atome), entourée d'un nuage d'électrons qui tourne autour d'elle sur des orbites indiquées par les lettres de l'alphabet ($K, L, M \dots$), de sorte que chaque couche contient un nombre spécifique d'électrons.

Les rapports sur les processus d'ionisation de la couche interne dans les collisions ion-atome constituent une part importante de la littérature moderne en physique atomique, Ces activités se produisent dans l'atome lorsqu'il y a un changement dans l'équilibre entre les protons et les neutrons, ce qui conduit à l'ionisation ou à l'excitation de l'atome qui devient alors instable. L'atome revient à son état stable en libérant l'énergie appropriée avec la différence d'énergie de sorte que cette énergie est libérée sous forme de rayonnement comme les rayons X (X -rays) et parfois l'atome tend à l'ionisation non radiative dit d'Auger ou de Coster-Kronig.

Le rapport de saut J_K est un paramètre clé dans l'étude des transitions électroniques entre deux niveaux d'énergie, il mesure la probabilité qu'un électron fasse un saut quantique d'un niveau d'énergie initial k à un niveau d'énergie final j , il est déterminé par les règles de sélection quantiques. En effet, Plus ce facteur est élevé, plus la capacité du matériau à absorber l'énergie du photon est grande. Les propriétés optiques et électroniques des matériaux sont souvent décrites à l'aide de ce facteur, comme les semi-conducteurs et les cellules photovoltaïques.

INTRODUCTION GENERALE

En résumé, le facteur de saut d'absorption J_K est une mesure de l'efficacité de l'absorption des photons par un matériau, ce facteur est le rapport entre la probabilité que l'échantillon absorbe un photon et la probabilité que l'électron excitée saute à un état vacant, et nous avons appliqué ce facteur dans nos travaux aux éléments lanthanides, qui ont suscité un grand intérêt de la part des chercheurs en raison de leurs propriétés physiques et chimiques.

Ce mémoire est divisé en deux chapitres :

Dans le premier chapitre, nous avons fait un rappel des théories de base de l'interaction entre le rayonnement et la matière, dans le même chapitre nous avons expliqué la notion de transitions radiatives et non radiatives et la méthode théorique de calcul des différents paramètres atomiques de la fluorescence X .

Le deuxième chapitre est consacré à la détermination et calcule empirique et semi-empirique du rapport de saut J_k dans le cas des lanthanides. Le calcul est basé sur les valeurs moyennes pondérées de données expérimentales de la base de données (Benatia, 2023). Nous avons pu trouver des valeurs empiriques du rapport de saut J_k Pour chaque élément, dans une deuxième étape Nous avons pu trouver des nouvelles valeurs semi-empiriques du rapport de saut J_k des éléments de numéro atomique $57 \leq Z \leq 71$.

En fin une conclusion générale achève ce travail.

References Bibliographies

Benatia, A., 2023. Contribution à l'étude des paramètres d'absorption de la couche K des éléments atomiques : Le rapport de saut JK, Mémoire de Master, Université Mohamed El Bachir Elibrahimi, Bordj Bou Arreridj.

Chapitre I

*Atomes et lumière : interaction matière-
rayonnement*

1.1. Introduction :

Nous apprenons sans cesse chaque jour une nouvelle dans le monde microscopique, une propriété différente de l'atome ou bien une autre composante de l'atome, plutôt des sub particules de l'atome. Aujourd'hui l'idée de l'atome est remplacée par une entité concrète à la place d'une entité abstraite. Jusqu'à la découverte de l'électron l'atome était une idée, une théorie et une entité abstraite, invisible et indivisible pour les humains alors que de nos jours, dans certains discours scientifiques, il s'agit de la possibilité de voir ou de toucher l'atome. D'où la construction en cours de nanotechnologie qui parle de la manipulation d'atome.

On sait depuis longtemps que la désexcitation des atomes peut se produire non seulement par l'émission de rayonnements électromagnétiques, mais aussi par d'autres processus concurrents. Dans des expériences d'absorption de rayons X , Beatty (1911) et Barkla et Philpot (1913) ont prouvé que les atomes présentant des lacunes dans la couche E émettent un rayonnement qui provoque une ionisation spécifique plus élevée que celle attendue des rayons X caractéristiques de la fluorescence. Dans un article de synthèse intitulé « X -Rays and the Theory of Radiation», Barkla (1918) a introduit le concept de rendement de fluorescence, le définissant comme le rapport entre l'énergie transportée par le rayonnement de fluorescence et l'énergie transportée par le rayonnement absorbé dans un échantillon.

Une vacance atomique de la couche interne peut, en général, se désintégrer par le biais de transitions radiatives et non radiatives, entraînant l'émission de rayons X et d'électrons liés caractéristiques, respectivement. La classe spéciale de transition non radiative qui transfère la vacance de la sous-couche initiale à une sous-couche supérieure dans la même couche est appelée transition Coster-Kronig (CK). Les autres transitions non radiatives sont des transitions Auger. Pour la couche L , les probabilités de ces processus sont le rendement de fluorescence w_i , le rendement de Coster-Kronig f_{ij} et le rendement Auger a_i .

1.2. Rappels théoriques :

1.2.1. L'atome :

On a nommé les atomes selon le mot grec atomes, qui signifie qu'ils sont «incassables», c'est-à-dire qu'on ne peut les décomposer en matériel plus petit. Or, on sait aujourd'hui que cette appellation est erronée. En effet, l'atome est constitué d'un nuage électronique plus un noyau atomique. La forme ellipsoïde et sphérique permet de donner des idées sur la composition des noyaux. Le noyau lui-même est constitué de deux types de particules appelées nucléons,

Z protons (de charge positive) $A-Z$ neutrons (neutres) et entouré des électrons (de charge électrique négative). Les modèles théoriques à ce jour sont basés sur des particules élémentaires composées de neutrons et de protons. La distribution de charge dans le noyau est symétrique, ce qui permet de la définir comme la géométrie d'analyse de masse de chaque noyau (Kaaloul, 2023 ; Bernard, 2017).

La structure de l'atome s'est progressivement développée avec la découverte de la radioactivité et la pléthore d'expériences de physique nucléaire qui ont marqué la première moitié du 19^{ème} siècle. La première image à peu près pertinente est celle de l'atome de Bohr et Rutherford (1913): il y apparaît comme un minuscule «système solaire» formé d'un noyau autour duquel gravitent des électrons comme les planètes autour du soleil. Ce modèle est intéressant car il introduit deux idées qui s'avéreront fondamentales en neutronique : le noyau est extrêmement petit par rapport à l'ensemble de l'atome : son diamètre est de l'ordre de 10^{-13} à 10^{-12} cm contre 10^{-8} cm pour l'atome (Slimani, 2016).

Représentation conventionnelle du noyau : A_ZX où X est le symbole de l'élément, Z le numéro atomique (nombre de protons) et A le nombre de masse (nombre total de nucléons). Dans l'atome, électriquement neutre, il y a toujours autant d'électrons (-) que de protons (+). Les électrons se répartissent en couches : de la plus proche à la plus éloignée du noyau,

- la couche K ($n = 1$) peut accueillir 2 électrons
- la couche L ($n = 2$) peut accueillir 8 électrons
- la couche M ($n = 3$) peut accueillir 18 électrons.....etc.

La dernière couche remplie est appelée couche externe : elle est d'importance capitale en chimie, puisqu'elle délimite l'atome et conditionne la façon dont il va interagir avec l'extérieur (c'est-à-dire avec les autres atomes). Les atomes réagissent de façon à satisfaire la règle du duet ou de l'octet, c'est-à-dire de façon à obtenir une structure électronique externe identique à celle des gaz nobles (inertes). Pour cela, ils peuvent, Les atomes peuvent gagner ou perdre des électrons de différentes manières. Par exemple, certains atomes ont une Convergence électronique élevée, ce qui signifie qu'ils ont tendance à gagner des électrons pour atteindre une structure électronique stable. D'autres atomes ont une faible énergie d'ionisation, ce qui facilite la perte d'électrons. Un ion est donc un atome qui a gagné ou perdu des électrons (il est donc chargé), De plus, les atomes peuvent également réagir avec d'autres atomes pour échanger des électrons (Kahoul, 2015).

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

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

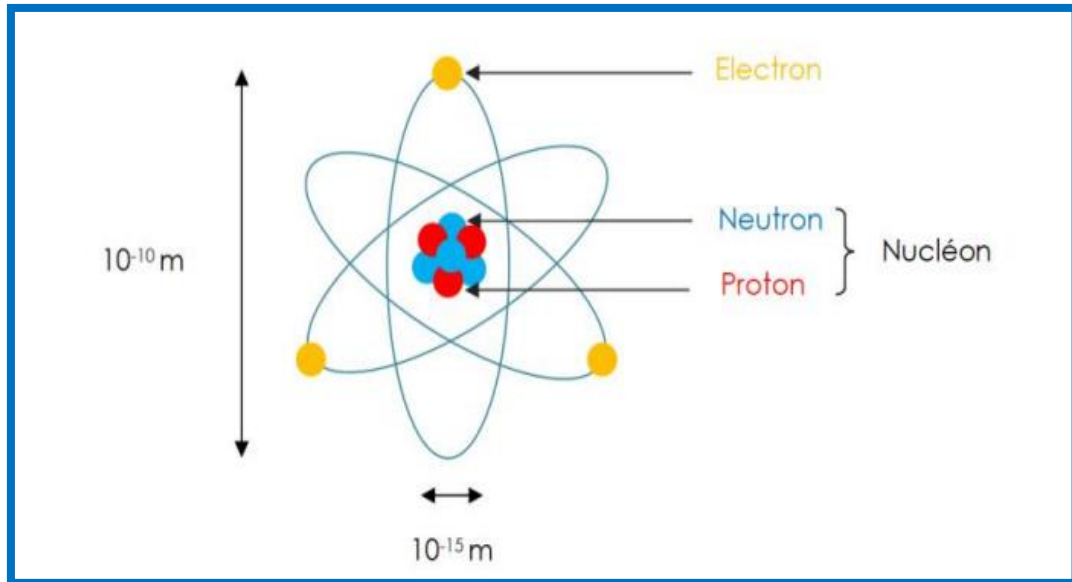


Figure I.1 : Le modèle atomique (Kaaloul, 2023).

I.2.2. L'atome et de mécanique quantique :

Des configurations électroniques pour les éléments peuvent être écrites à l'aide de nombres quantiques. Nous devons nous rappeler que lorsque nous écrivons des configurations électroniques, les électrons adoptent la configuration la plus stable en occupant les niveaux d'énergie les plus bas (Myers, 2003).

L'état quantique d'un électron dans un atome est défini par quatre nombres quantiques : n, l, m et 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, \dots pour les valeurs entières positives respectives $n=1, 2, 3, 4, \dots$

Le nombre quantique azimutal (l) : Il est également appelé nombre quantique secondaire. Correspond aux valeurs possibles du moment angulaire orbital l de l'électron par rapport au

noyau. Il détermine la forme de l'orbitale et définit les sous couches qui sont notées $s, p, d, f \dots$, pour des valeurs respectives $l= 0, 1, 2, 3 \dots$ avec $l \leq n - 1$.

Le nombre quantique magnétique (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 S ou spin de l'électron. Il ne peut prendre que les deux valeurs opposées $s = \mp \frac{1}{2}$. une orbitale comprend deux états, correspondant respectivement à $s = +1/2$ (spin vers le haut) et $s = -1/2$ (spin vers le bas).

Dans un atome, les électrons n'occupent pas de façon quel que les divers états possibles. On introduit un nombre quantique j correspondant au moment angulaire total J dû à l'interaction spin-orbite :

$$J = L + S \dots \dots \dots \tag{I.1}$$

Avec $j = l + s = \left| l \mp \frac{1}{2} \right| (> 0)$

Pour $l = 0, j = \frac{1}{2}$, Pour toute autre valeur de l , il existe deux valeurs de j (Bensaci and Benchaib, 2014).

Tableau I.2 : Nombres Quantiques (Myers, 2003).

Couche	n	Possible l	Possible m	S	Maximum électrons
K	1	0	0	$\mp \frac{1}{2}$	2
L	2	0,1	-1, 0, 1	$\mp \frac{1}{2}$	8
M	3	0, 1, 2	-2,-1, 0, 1, 2	$\mp \frac{1}{2}$	18
N	4	0, 1, 2, 3	-3,-2,-1, 0, 1, 2, 3	$\mp \frac{1}{2}$	32
O	5	0, 1,2, 3, 4	-4,-3,-2,-1, 0, 1, 2, 3, 4	$\mp \frac{1}{2}$	50

I.2.3. Couches électroniques :

Dans un atome, les électrons ne sont pas tous équivalents entre eux. Ils sont répartis dans différents niveaux d'énergie, ou «couches électroniques». La façon dont les électrons d'un atome est réparti dans les différentes couches de l'atome, est appelée configuration électronique. Chaque couche électronique peut contenir un nombre maximum $N_{Max} = 2n^2$ (D'après le principe d'exclusion de Pauli). La figure (I.2) représente les couches électroniques et leurs capacités en électrons.

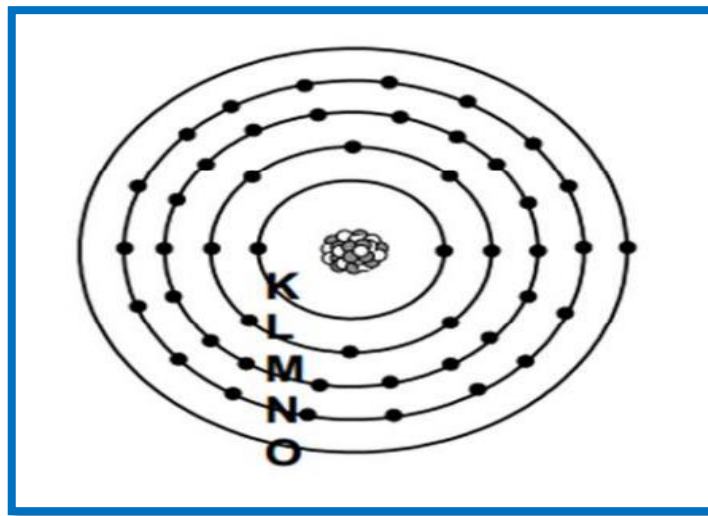


Figure I.2 : Les couches électroniques (Hamouda, 2015).

La couche *K*, pour laquelle $n = 1$, est la plus proche du noyau, contient deux électrons au maximum, subdivisée à une seule sous-couche *K* et les couches *L, M, N, O, P et Q*, correspondant à $n = 2, 3, 4, 5, 6$ et 7 , s'agencent par distance croissante au noyau ; La couche *L*, contient huit électrons au maximum, La couche *M*, contient dix-huit électrons au maximum, ...etc (Benoit, 1987).

I.2.4. Niveaux d'énergie des électrons atomiques :

Les atomes libres ont des électrons qui se trouvent sur des niveaux d'énergie précis correspondant aux différentes couches électroniques et sous-couches électroniques (*K, L, M, etc*) :

La couche *K* est la plus énergétique en valeur absolue et contient deux électrons au maximum. Il y en a au maximum huit sur la couche *L*, qui est divisée en sous-

couches L_1, L_2, L_3 . Au total, dix-huit électrons remplissent la couche M , qui est divisée en sous-couches telles que M_1, M_2, M_3, M_4, M_5 .

Trente-deux électrons remplissent la couche N , qui est divisée en sous-couches telles que $N_1, N_2, N_3, N_4, N_5, N_6, N_7$ etc.

En général, ces niveaux ne sont pas considérables, à l'exception des sous-couches les plus externes «c'est-à-dire les moins énergétiques en valeur absolue» qui participent à la liaison chimique. La liaison chimique affecte très peu les énergies des niveaux internes (Sahoo, 2015).

Tableau .I.3: La configuration électronique et le moment angulaire total. (Benoit, 1987).

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

1.2.5. Loi de Moseley :

L'excitation des atomes étant localisée à des niveaux profonds. Moseley a montré que les liaisons chimiques entre les atomes ont très peu d'effet sur les raies d'émission des rayons X. Grâce à son étude, il a découvert que la fréquence d'une raie particulière (par exemple $K\alpha_1$) est proportionnelle au carré du numéro atomique, selon la relation suivante :

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

Où K_1 et K_2 sont des constantes ayant des valeurs définies pour chaque raie (constantes d'écran) (Benoit, 1987).

Cela signifie que nous pouvons utiliser cette relation pour identifier un élément chimique.

1.3. Les Transitions électroniques :

1.3.1. Règles de sélections :

Les règles de sélection sont des restrictions qui déterminent quelles transitions électroniques sont permises. Pour faire passer un électron de son état fondamental à un autre état excité, il faut lui fournir une énergie égale, au minimum, à la différence entre les deux niveaux d'énergie impliqués dans cette transition. Cependant toutes les transitions ne sont pas possibles.

Ils doivent satisfaire aux règles de sélections basées sur les variations des nombres quantiques qui limitent en conséquence le nombre d'émission X d'énergie différente d'un élément donné. Ces règles sont (Naidji, 2021) :

$$\Delta l = \pm 1 \quad (\text{I.3})$$

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

$$\Delta s = 0 \quad (\text{I.5})$$

Pour une molécule diatomique, les règles de sélection sont :

$$\Delta n = \pm 1 \quad (\text{I.6})$$

$$\Delta j = \pm 1 \quad (\text{I.7})$$

$$\Delta m = 0 \text{ ou } \pm 1 \quad (\text{I.8})$$

Les autres transitions sont "interdites". Certaines peuvent cependant être observées malgré ces règles mais l'intensité relative des rayons X correspondants est alors extrêmement faible (Meddough, 2018).

1.3.2. Transitions électroniques entre niveaux :

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

$$\nu = \frac{|E_x - E_y|}{h} = \frac{E_y - E_x}{h} \quad (I.9)$$

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

ν : étant donc bien défini, cette émission donne lieu à une «raie», chaque couche correspond une «série» de raie (Boufas, 2004 ; Bouhebel, 2023).

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

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

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

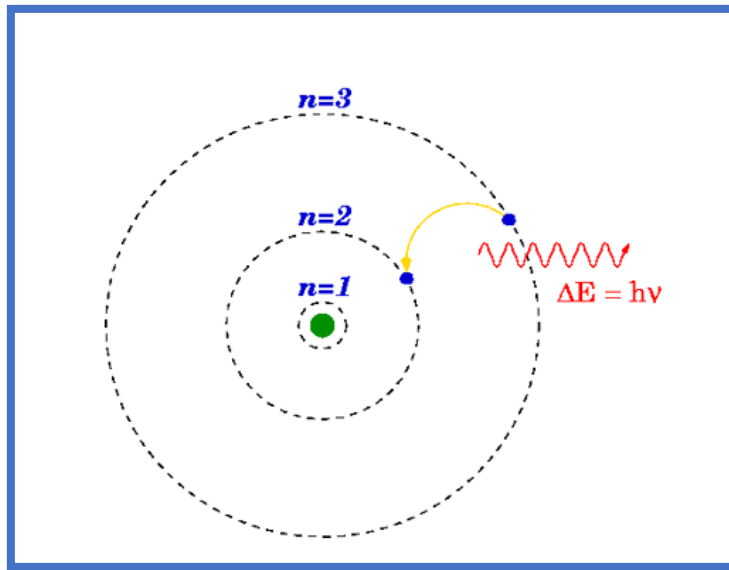


Figure I.3 : Transition entre les niveaux (Bouhebel, 2023).

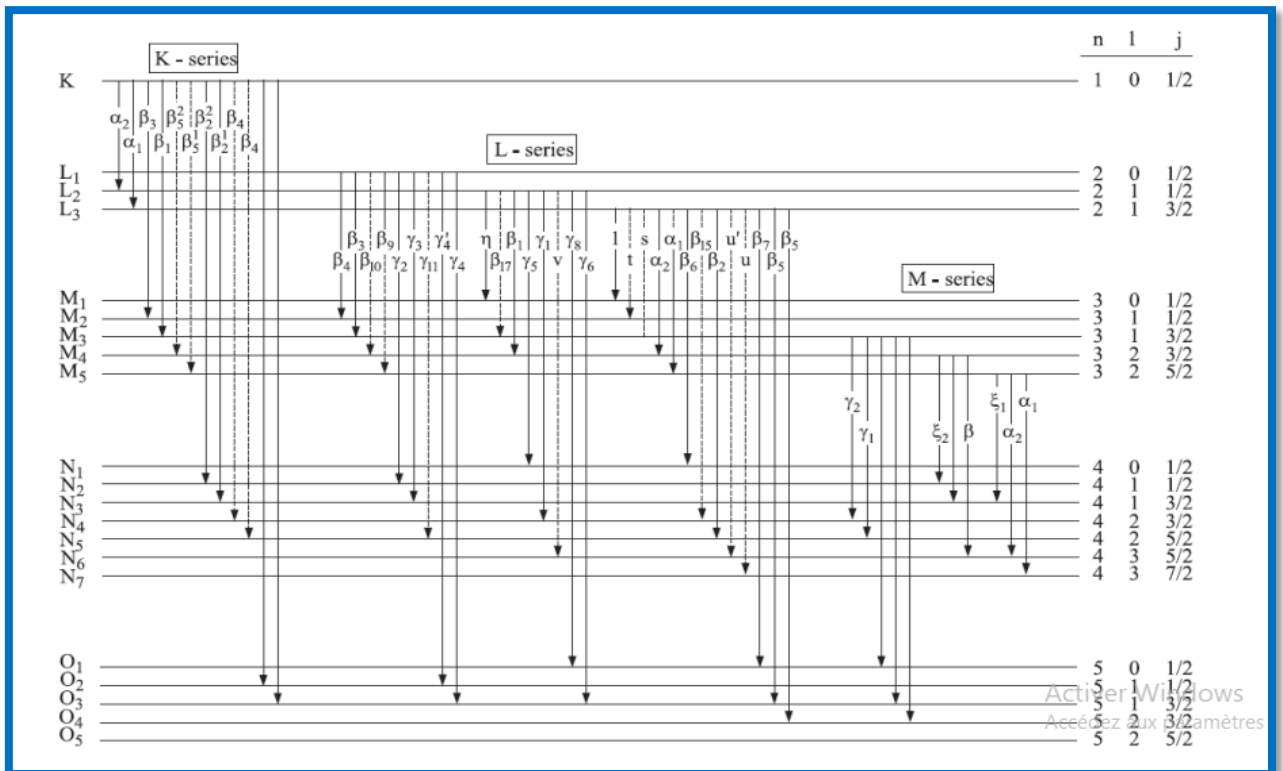


Figure I.4 : Transitions permises entre les couches électroniques (Zschornack, 2007).

Les niveaux de transition sont donnés dans le tableau I.4 en utilisant les notations empiriques et quantiques :

Tableau.I.4 : Les niveaux de transition en utilisant les notations empiriques et quantiques.

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

L'atome retrouve sa stabilité par «réorganisation interne» ; des électrons des couches plus externes que celles des électrons éjectés «ou primaires», vont venir combler les états vacants en libérant la différence d'énergie entre les couches de départ et d'arrivée de l'électron sous forme de rayonnement électromagnétique de haute énergie (photon X) (Bambynek *et al.*, 1972).

I.3.3. Notation de Siegbahn :

Manne Siegbahn a proposé, en 1924, une notation pour désigner les sauts électroniques qui provoquent l'émission de photons X. Une raie est due à une transition d'un niveau de départ vers un niveau d'arrivée (Benslimane, 2004).

Pour identifier les différentes raies A qui correspondent à différentes transitions électroniques vers une même couche, deux notations sont généralement utilisées : la notation de Siegbahn et la notation IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry).

Cette notation empirique est très utilisée en spectrométrie des rayons X . Dans une série donnée en nomenclature, l'émission X correspondant à la transition d'un électron d'une couche quelconque vers une autre couche telle que $A = K, L, M, N \dots$, constitue la raie A (Benoit *et al.*, 1987).

Tableau I.5 : Corrélation entre la configuration électronique nlj (EC), les notations Siegbahn et IUPAC pour les transitions radiatives.

EC	Siegbahn			IUPAC
$1s_{1/2} - 2p_{3/2}$	K_α		$K_{\alpha 1}$	$K - L_3$
$1s_{1/2} - 2p_{1/2}$			$K_{\alpha 2}$	$K - L_2$
$1s_{1/2} - 2s_{1/2}$			$K_{\alpha 3}$	$K - L_1$
$1s_{1/2} - 3p_{3/2}$	K_β	$K_{\beta 1'}$	$K_{\beta 1}$	$K - M_3$
$1s_{1/2} - 3p_{1/2}$			$K_{\beta 3}$	$K - M_2$
$1s_{1/2} - 3d_{3/2}, 3d_{5/2}$			$K_{\beta 5}$	$K - M_{4,5}$
$1s_{1/2} - 4p_{1/2}, 4p_{3/2}$		$K_{\beta 2'}$	$K_{\beta 2}$	$K - N_{2,3}$
$1s_{1/2} - 4d_{3/2}, 4d_{5/2}$			$K_{\beta 4}$	$K - N_{4,5}$

La notation de Siegbahn consiste à utiliser la lettre correspondante à la raie A concernée. Si l'électron qui comble la lacune de la couche K vient de la couche L_3 par exemple, la raie émise est notée K suivie d'un caractère et un numéro en indice $K_{\alpha 1}$. Tandis que dans la notation IUPAC on désigne la raie A par ses deux couches (ou sous couches) mises en jeu. Ainsi, cette même raie, notée $K_{\alpha 1}$ en notation de Siegbahn, s'écrit $K - L_3$ en notation IUPAC (Krause, 1979).

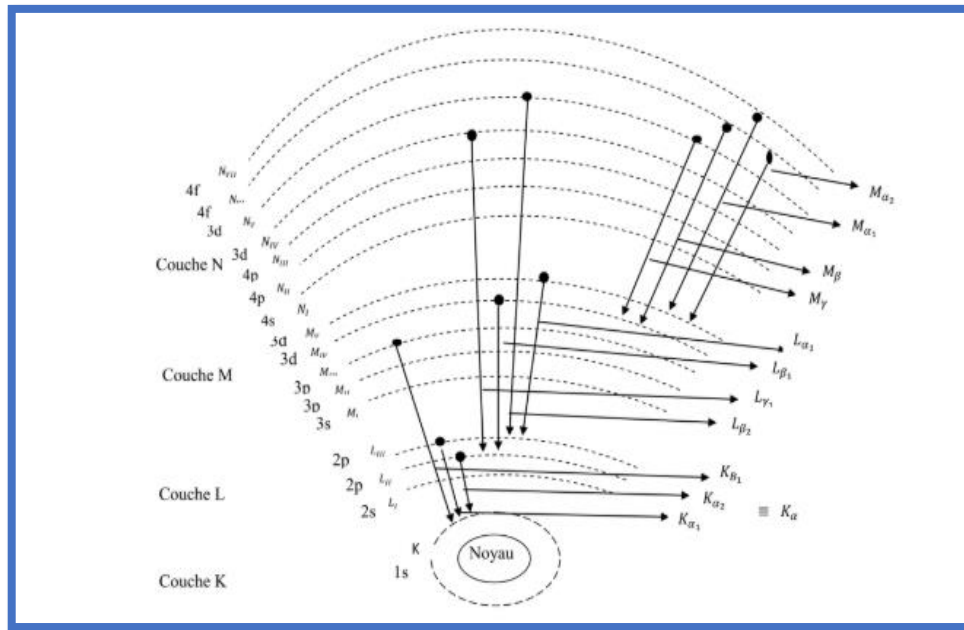


Figure I.5 : Niveaux d'énergie et quelques transitions électroniques permises (Bendjedi, 2018).

I.4. Rayonnement :

C'est un type de propagation d'énergie à travers l'espace, vide ou matériel sous forme d'ondes électromagnétiques (photon) ou de particules (rayonnement corpusculaire) (Souques, 2011).

Les rayonnements peuvent être détectés et caractérisés grâce à leurs interactions avec la matière dans laquelle ils se propagent. Ils peuvent céder à tout ou partie de l'énergie du milieu qu'ils traversent au cours de ces interactions. Où Le milieu absorbant, subit des changes dus au passage des rayonnements (Mehenna, 2010).

I.5. Classification des rayonnements :

I.5.1. Classification selon la nature du rayonnement

On peut classer les rayonnements suivant leur nature propre, indépendamment de la matière dans laquelle ils se propagent et cèdent de l'énergie. Cette classification est basée sur la charge électrique des particules constituent le rayonnement.

- On distingue deux types de rayonnement :(Khaled, 2010).

a. Rayonnement électromagnétique :

Qui sont constitués par un flux de photon et donc n'ont pas de masse (masse nulle). Chaque photon transporte une énergie $E = h\nu$ où h est la constante de Planck comme rayonnement gamma, rayonnement X, visibles ou invisibles, les ondes radioélectriques et les ondes lumineuses.

Il existe plusieurs catégories de rayonnements électromagnétiques, caractérisée par ses différentes longueurs d'onde et ses fréquences qui définissent le spectre électromagnétiques (voir la figure suivante) (Mehenna, 2010 ; Gravereau, 2011).

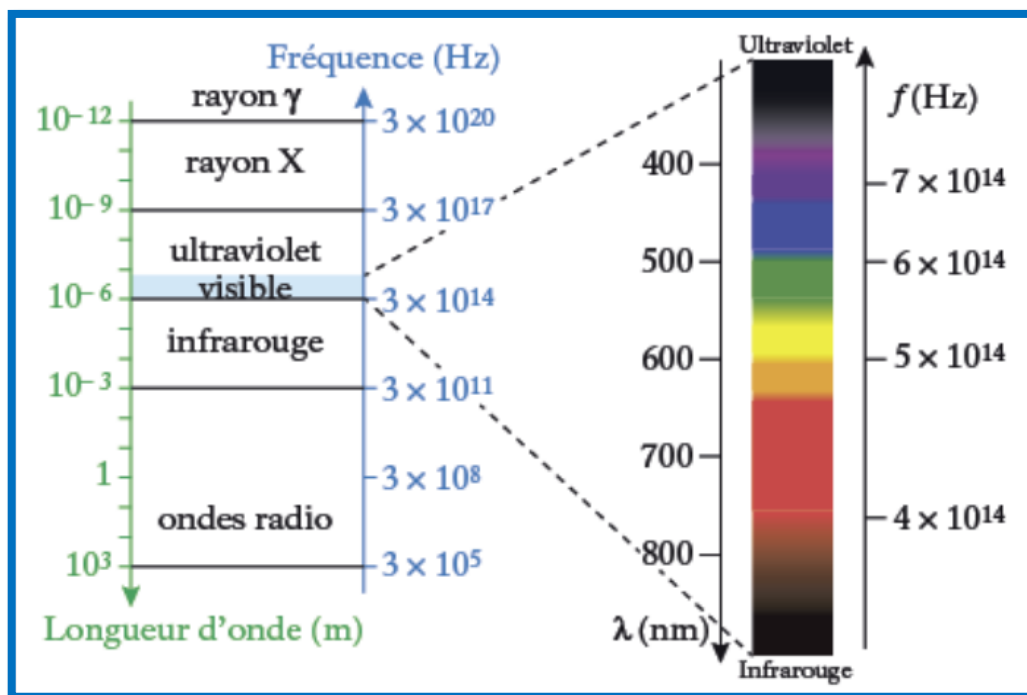


Figure I.6 : Les rayonnements électromagnétiques (Kaaloul, 2023).

Ils sont divisés en 4 catégories

a.1. Rayonnements X :

Découverts par le physicien allemand Wilhelm Roentgen en novembre 1895, Il baptisa sa découverte par la lettre X, c'est-à-dire : "Rayons X" où le "X" est la lettre utilisée pour désigner une inconnue en Mathématiques, cette découverte scientifique a eu un impact important au niveau de la population. Le pouvoir des rayons X, de pénétrer et de déformer les matériaux, et de révéler l'intérieur du corps humain a suscité l'intérêt de nombreux chercheurs et scientifiques, car ses premières applications ont été l'étude et l'analyse de la structure des

cristaux pour mettre en lumière la composition atomique des molécules et confirmer ainsi la justesse du nombre d'Avogadro (Benslimane, 2004).

Donc Les rayons X sont des rayonnements électromagnétiques, sont émis par le bombardement de la surface d'un solide par des rayons cathodiques, et sont utilisés en radiographie... etc.

Le domaine de ces rayons se situe entre l'ultraviolet et les rayons gamma, avec une longueur d'onde de l'ordre de 10^{-8} à 10^{-12} m, des fréquences comprises entre 10^{16} et 10^{19} Hz, et avec une énergie comprise entre 40 et 4.10^5 eV. Comme nous le savons, l'énergie est transportée sous forme de quanta appelés photons (Bensaci and Benchaib, 2014).

L'énergie portée (transportée) par ces photons est données par :

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} \quad (\text{I.10})$$

- $h = 6.6254.10^{-34}$ joules .seconde, constante de Planck.
- λ , longueur d'onde (m).
- $c = 3.10^8$ m/s, vitesse de la lumière dans le vide.

a.2. Rayonnement γ :

Les rayons gamma ont une origine nucléaire puisqu'ils sont émis par un noyau qui passe d'un état excité à un état stable, dès excitation des atomes qui présentent de déséquilibre s'accompagne d'une désintégration alpha α ou bêta β , avec l'émission de rayonnements résultant de la libération d'un excès d'énergie du noyau radioactif, sous le forme rayons gamma γ .

Ce type de rayonnement été mis en évidence par Paul Villard en 1900. Il est dû à une réorganisation des nucléons et de la charge électrique à l'intérieur du noyau. On peut dire que ce sont des photons, leur longueur d'onde ($10^{-12} - 10^{-15}$), et sont utilisés dans des applications nucléaires....etc. (Mehenna, 2010).

La notation symbolique d'une telle désexcitation est la suivante (Seghiri, 2018) :



D'autre part Si les rayons X sont des rayonnements électromagnétiques de même nature que les photons gamma, ils en diffèrent par leur origine. Ce dernier résulte sont issus du noyau

de l'atome, avec une énergie plus élevée depuis les rayons X , alors que les rayons X prennent naissance soit du freinage des particules β dans la matière soit du changement de niveau d'énergie des électrons dans les atomes (Mehenna, 2010 ; Christine and Henri, 2007).

a.3. Rayonnement d'annihilation :

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

a.4. Rayonnement de freinage :

Emis par des interactions énergétiques électrons-noyau. (Mehenna, 2010)

b. Rayonnement particulaires :

Un type de rayonnement composé de petites particules qui peuvent être chargées (électrons et ions) et non chargées (photons et neutrons). Ces dernières ont une masse et une énergie cinétique E donnée par la formule : (Zidi, 2021 ; Seghiri, 2018).

$$E = \frac{1}{2}mv^2 \quad (\text{I.12})$$

Où v est la vitesse de la particule.

Il existe une relation entre la longueur d'une particule et sa quantité de mouvement qui a été développée par Louis de Broglie en 1924 et selon cette relation, la longueur d'onde d'une particule est égale à la constante de Planck h divisée par la quantité de mouvement p de la particule. Cette relation est connue sous le nom de relation de de Broglie et il écrire comme suit : (Seghiri, 2018 ; Davide, *et al.*, 2011).

$$\lambda = h/p = h/mv \quad (\text{I.13})$$

On peut distinguer les rayonnements corpusculaires (ou particulaires) par le type de particule auquel ils sont associés. Il peut par exemple s'agir de neutrons, de protons, d'électrons (ou de positrons) ou de particules alpha.

b.1. Le rayonnement alpha (α) :

Il est émis par les atomes très lourds plupart sont de nombre atomique supérieur à 82, il correspond à l'émission d'un noyau d'atome d'hélium ${}^4_2\text{He}$, composé de deux protons et de deux neutrons avec un édifice stable.

Telle est la particule α caractéristique de ce mode de désintégration radioactive. La transformation s'écrit selon la réaction suivante (Laurence, 2007) :



Le symbole * indique que le noyau est instable, et noté le élément X quelconque, Z le nombre atomique, A le nombre de masse. Cette transition est suivie par une émission γ . (Seghiri, 2018 ; Davide, *et al.*, 2011).

b.2. Le rayonnement bêta (β) :

Il correspond à deux types de transformations pouvant se trouver dans un radionucléide (noyaux instables) classe en β^- et β^+ , sont respectivement des électrons et des positrons (Davide, *et al.*, 2011).

- *Rayonnement β^- :*

Les noyaux de ces atomes présentent un excès de neutron par rapport au nombre de protons, Ce type de noyau tendra à se stabiliser par la transformation de l'un de ces neutrons en un proton, tandis que l'électron négatif qui a été créé est éjecté hors du noyau, et appelé particule (β^-) qui est accompagné de l'émission d'un antineutrino (particule de charge électrique nulle).

Cette transformation écrit comme suivant (Slimani, 2016) :

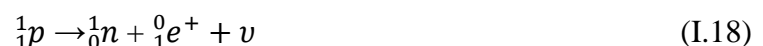


Où $\bar{\nu}$; Antineutrino.

- *Rayonnement β^+ :*

Les noyaux de ces atomes présentent un excès de protons par rapport au nombre de neutrons, dans cette noyaux le proton est transformé en neutron, avec émission d'un positron chargé positivement (l'antiparticule de l'électron) ou (β^+) et accompagné de l'émission d'un neutrino.

Elle s'écrit en notation symbolique de la manière suivante (Klotz, *et al.*, 2018):



Où ν ; neutrino.

La dualité onde-particule enseigne que décrire un objet quantique nécessite de le considérer à la fois comme une particule et une onde. Ainsi, un rayonnement électromagnétique, peut être considéré comme un flux de photons ou comme la propagation d'une onde électromagnétique (Claude and Christian, 2010).

1.5.2. Classification selon leur effet sur la matière :

Une autre classification possible du rayonnement prend en compte son effet sur le milieu. Et on en distingue deux types :

a. Rayonnements ionisants :

On distingue les rayonnements ionisants des autres rayonnements par leur capacité à «Arracher» un électron à un atome, lorsqu'elles traversent la matière. C'est-à-dire à transformer ce dernier sous forme d'ion.

Pendant cette interaction, l'absorption complète de l'énergie du photon incident se produit par l'atome, qui devient un ion positif après avoir perdu un électron. L'ionisation n'est possible que si l'énergie du photon est égale ou supérieure à l'énergie nécessaire pour ioniser l'atome cible (Le rayonnement ionisant porte assez d'énergie pour ioniser un atome (>4 eV)) (Odile, 2008).

Les rayonnements ionisants sont dangereux pour la santé humaine, surtout lorsqu'ils sont reçus à fortes doses. Ces derniers sont appelés sous le nom de rayonnements électromagnétiques ou de particules et peuvent être classés en fonction de la charge portée par les particules qui les composent dans deux types :

(Nikjoo, *et al.*, 2012 ; Sghiri, 2018).

a.1. Les rayonnements directement ionisants :

Ils comprennent les particules chargées, à la fois légères, telles que les électrons et les positrons, et lourdes, telles que les protons et les particules α . Il s'agit de particules à charge rapide qui s'appuient sur les nombreuses petites interactions de Coulomb qui se produisent le long de leur trajectoire pour transférer leur énergie cinétique directement dans la matière. (Bouhila, 2018.).

a.2. Les rayonnements indirectement ionisants :

Ils comprennent les particules non chargées, telles que les neutrons, les rayons gamma et les rayons X. Ils sont électriquement neutres, donc ils ne sont pas influencés par les forces électriques. Ils ne peuvent pas ioniser directement les atomes ou les molécules dans une première étape, mais elles peuvent engendrer des particules chargées secondaires lors de leurs interactions avec la matière, cette dernière à leur tour, ionisent les atomes et les molécules. (Nikjoo, *et al.*, 2012.).

Tableau I.6 : Classification des rayonnements ionisants (Bekrar, 2022).

Type de rayonnement ionisant	Spectres de raies	Spectres continus
Rayonnements indirectement ionisants	γ , X de fluorescence	X de freinage, neutrons
Rayonnements directement ionisants	α , électrons Auge	β^- , β^+

b. Rayonnements non ionisants :

C'est tout type de rayonnement électromagnétique dont l'énergie est insuffisante pour ioniser un atome. (P.ex. entre ~ 4 et 25 eV sont nécessaires pour éjecter les électrons d'un atome neutre) est ils sont moins dangereux que le rayonnement ionisant. Voici des exemples de rayonnement non ionisant : la lumière visible, le proche ultraviolet, infrarouge et les ondes radio. (Khaled. 2010 ; Seghiri, 2018).

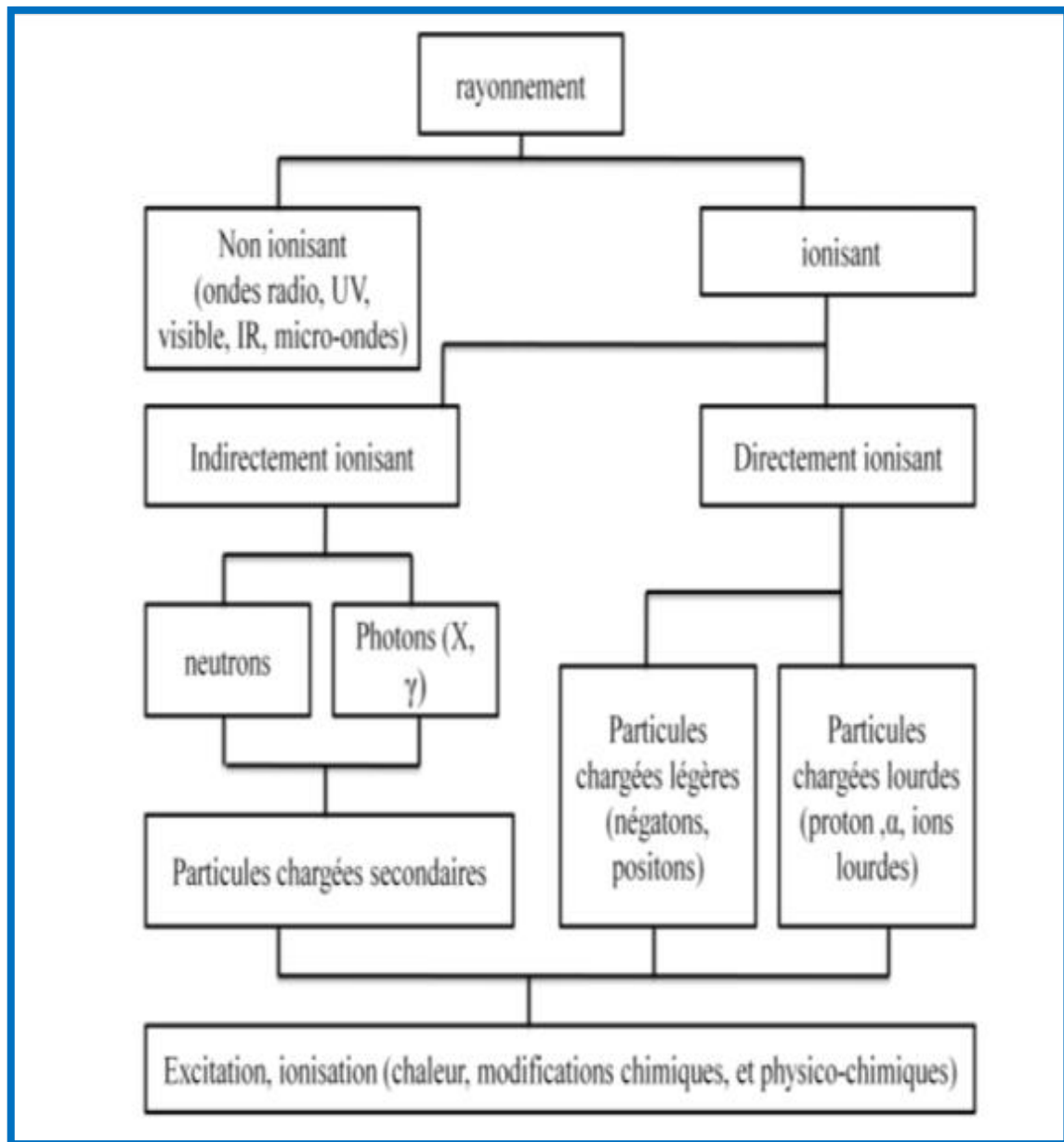


Figure I.7 : Constitution des rayonnements (ionisant, non ionisant) (Pouthier, 2006).

I.6. Interaction :

I.6.1. Interaction des particules chargées :

En traversant la matière, les particules chargées interagissent principalement avec les électrons de la matière et rarement avec le noyau, lorsqu'une particule entre en collision avec des électrons atomiques, son énergie est convertie soit en excitant les électrons à des niveaux d'énergie plus élevés, soit en libérant des photons (quand les atomes retournent à leurs états fondamentaux). En cas d'interaction avec le noyau, la perte d'énergie est très faible si elle est due à la force coulombienne et importante si elle est due à la force nucléaire. Mais celle-ci

caractérisée 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. (Alaine Selmi, 2011).

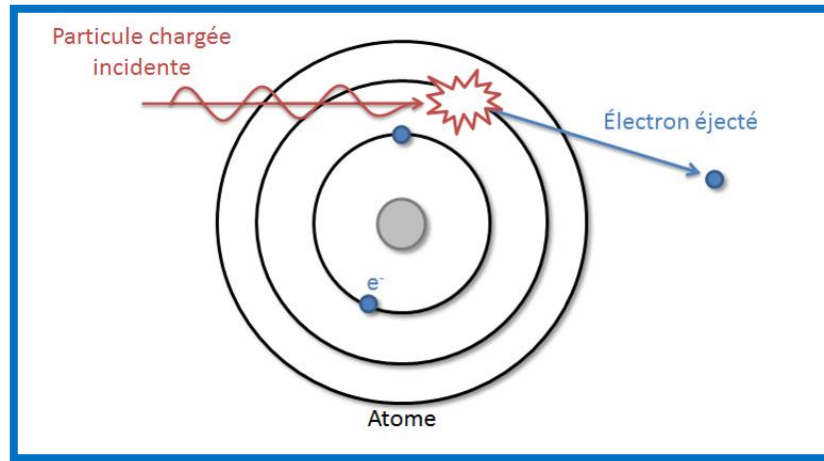


Figure 1.8 : Interaction des particules chargées avec la matière (bouhebel, 2023)

Quand une particule chargée pénètre un objet matériel, il se voit entouré d'autres entités chargées, les noyaux positifs et les électrons négatifs. Étant donné que les forces électriques s'exercent à distance, les interactions sont immédiates, que ce soit en attraction ou en répulsion. Ces interactions peuvent être divisées en deux catégories : les interactions élastiques et les interactions inélastiques.

Les interactions élastiques : Interaction qui se produit entre une particule chargée et un électron dans la matière, au cours de laquelle une partie de l'énergie cinétique de la particule (une interaction au cours de laquelle la quantité d'énergie cinétique totale du système est conservée) est perdue sans changer sa trajectoire. Dans ce cas, la particule chargée est simplement déviée de sa trajectoire initiale.

Les interactions inélastiques : à lieu avec un ou plusieurs électrons de l'atome. Elle modifie la structure interne, donc l'énergie interne de l'atome (c'est à dire avec transfert une quantité significative d'énergie), ces transferts d'énergie conduisent à une perte progressive de l'énergie de l'électron primaire (et donc à son ralentissement), entraînant des changements dans la trajectoire.

Ces interactions peuvent entraîner des processus tels que la diffusion, l'excitation d'atomes ou l'ionisation (Messaoudene, 2007).

Les interactions entre les particules chargées dépendent de plusieurs facteurs tels que la charge de la particule, sa masse, son énergie et les propriétés du matériau avec lequel elle

interagit. Dans le domaine de la physique des particules, ces interactions sont étudiées en détail et sont d'une grande importance dans des domaines tels que la radiothérapie, la détection des particules et la physique des hautes énergies.

1.6.2. Interaction des électrons :

Les électrons sont des particules légères porteuses d'une charge électrique élémentaire, négative pour les «électrons» et positive pour les «positons». L'électron traversant un milieu matériel va perdre leur énergie cinétique au cours d'interactions avec les atomes du milieu traversé.

Dans le cas d'une interaction «électron-électron», on parlera de collision. Il existe deux types: l'ionisation et l'excitation ; dans le cas d'une interaction «électron-noyau», on parlera de freinage. Ce dernier point est caractéristique de la faible masse de l'électron (Christine and Henri, 2007).

1.6.3. Interaction des rayons γ dans la matière :

L'interaction des rayons gamma dans la matière peut entraîner plusieurs phénomènes, tels que l'effet photoélectrique, la diffusion Compton et la création de paires. Ces interactions peuvent entraîner la perte partielle ou totale de l'énergie du photon incident. Les électrons libres ou liés peuvent être excités ou ionisés lors de ces interactions. Cela peut conduire à des réactions chimiques ou à d'autres effets physiques. La gamme d'énergie qui intéresse la physique nucléaire expérimentale est comprise entre environ 100 keV et quelques MeV (Denden, 2009).

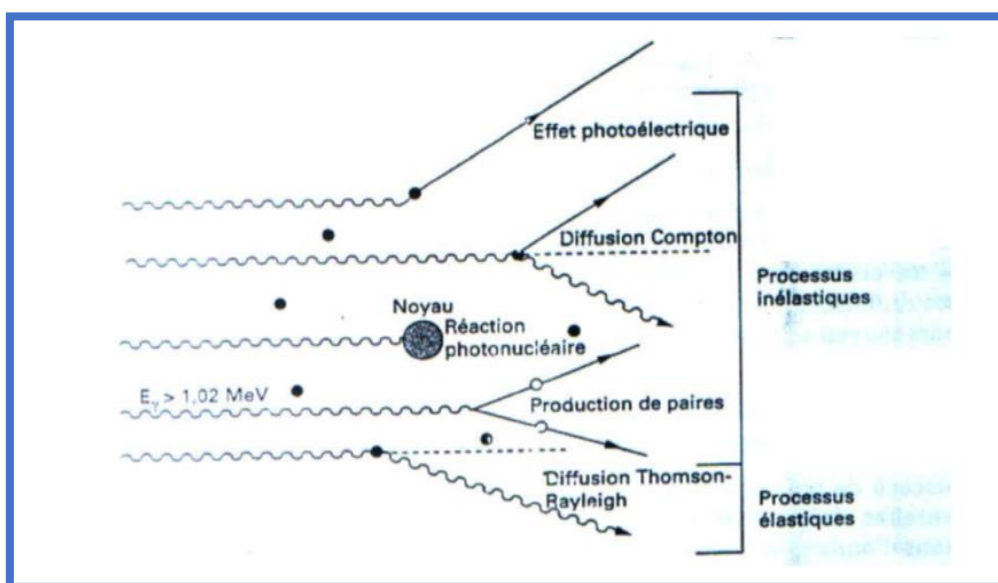


Figure I.9 : Modes d'interaction des photons avec la matière (Messaoudene, 2007).

I.6.4. Les modes d'interaction des photons :

a. Effet photoélectrique :

L'effet photoélectrique est l'interaction entre un photon et un électron orbital étroitement lié d'un atome absorbant. L'effet photoélectrique apparaît quand, au cours de l'interaction, le photon est complètement absorbé lors de l'interaction par un électron atomique, lequel acquiert une énergie cinétique E_c suffisante pour être éjecté de son atome (Schörner, 2012 ; Rey, 2007).

Le photoélectron est produit avec une énergie cinétique :

$$E_c = T = h\nu - E_l \quad (\text{I.19})$$

Où E_l est l'énergie de liaison de l'électron dans l'atome.

Elle est comprise entre 0.01 et 100 keV selon l'atome cible et la couche occupée par l'électron atomique. En effet, le photon doit avoir une énergie supérieure à l'énergie de liaison de l'électron pour que ce phénomène ait lieu (Bailey, and Humm, 2014).

La figure montre l'interaction photoélectrique entre un photon d'énergie $h\nu$ et un électron atomique.

L'effet photoélectrique est plus probable avec des matériaux à numéros atomiques Z élevés.

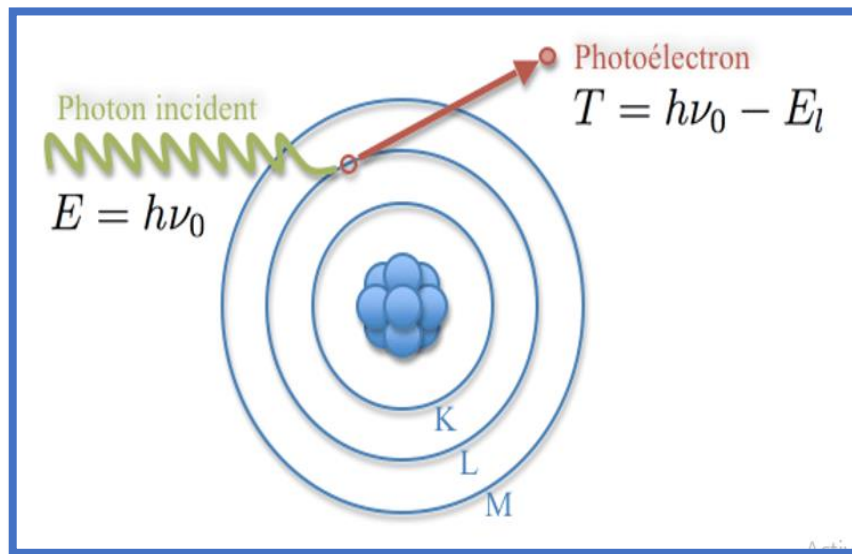


Figure I.10 : Effet photoélectrique (Stan, 2010).

b. La diffusion incohérente ou effet Compton :

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

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{h(1-\cos\theta)}{m_e c} \quad (\text{I.20})$$

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

m_e : est la masse de l'électron.

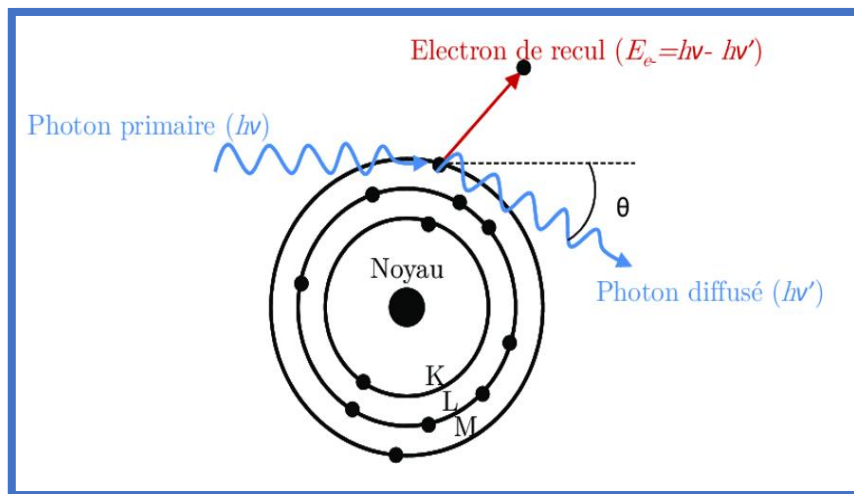


Figure I.11 : Diffusion Compton (Stan, 2010).

c. La diffusion Rayleigh :

En 1900, le physicien John W. Rayleigh a développé une théorie classique de la diffusion du rayonnement électromagnétique par les atomes, connue sous le nom de diffusion Rayleigh.

Pour la diffusion Rayleigh, le photon initial interagit avec les électrons fortement liés à l'atome sans déposer d'énergie. Ce qui entraîne l'émission d'un photon diffusé dans une direction différente, mais avec la même énergie que le photon incident. L'effet se produit principalement à de faibles énergies de photons $h\nu$ et les éléments lourds, la diffusion est dite

élastique ou encore cohérente. Cette diffusion cohérente est principalement observée dans les gaz ou les liquides clairs, où les atomes sont bien espacés (Podgorsak, and Podgoršak, 2014).

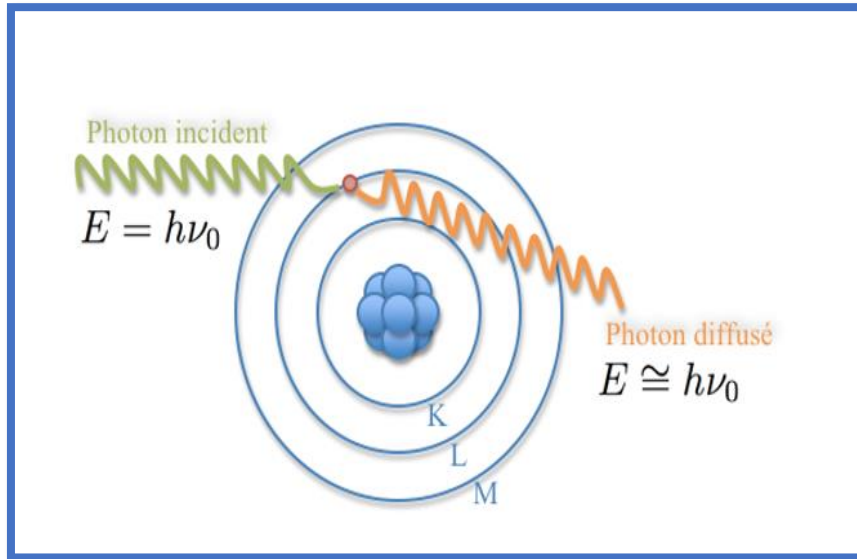


Figure I.12 : La diffusion Rayleigh (diffusion élastique) (Stan, 2010).

d. Production (création) de paires :

Quand le photon ayant une d'énergie $h\nu$ supérieure à deux fois la masse de l'électron (1,022MeV) passe au voisinage d'un noyau, 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^-). Les deux particules se partagent l'énergie du photon où être L'énergie cinétique de l'électron crée est la même que celle du positron, elle est égale à :

$$E_{e^-} = E_{e^+} = \frac{1}{2} \cdot (h\nu - 2m_{e^-} \cdot C^2) \quad (I.21)$$

Le processus de matérialisation ne peut pas se produire dans le vide. Il faut qu'il y ait de la matière présente (selon les lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement). Le positron crée possède une courte durée de vie, un positron a une durée de vie très courte, dès qu'il est créé, il interagit avec le premier électron qu'il rencontre et s'annihile. En générant deux photons de 511 keV qui sont émis dans des directions opposées (Slimani, 2016).

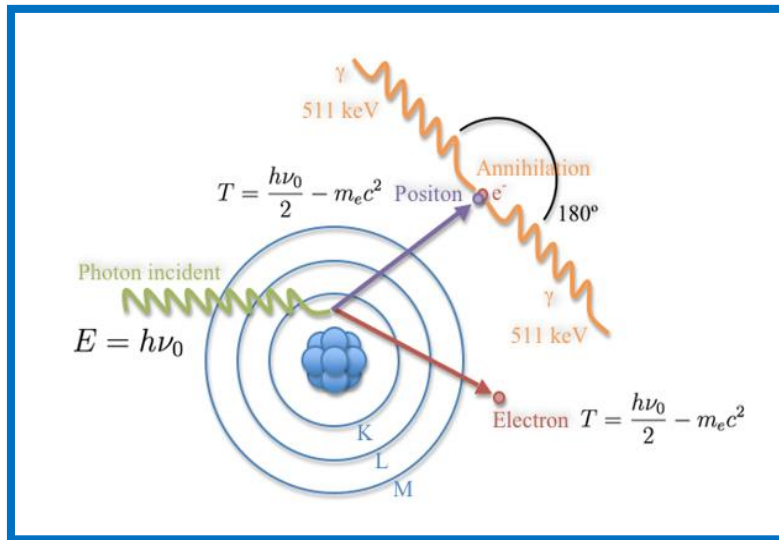


Figure 1.13 : La production de paires (Stan, 2010).

e. Compétition entre les trois effets :

Sur la figure I.14, on peut voir une comparaison entre ces trois effets pour différentes plages d'énergie.

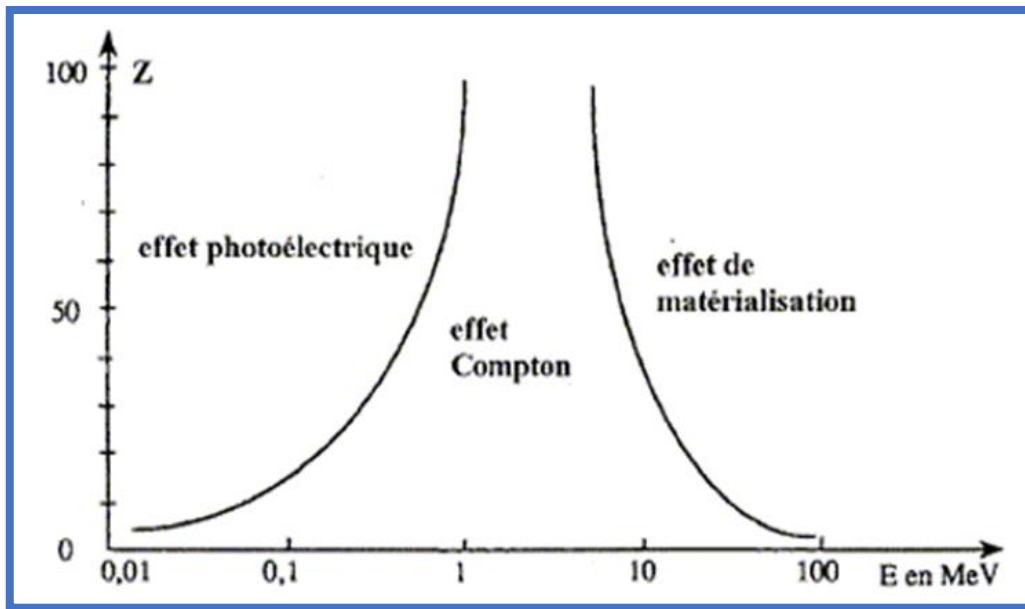


Figure I.14 : Probabilités de réalisation des effets photoélectrique, Compton et de création des paires en fonction de l'énergie.

- Premièrement : l'effet photoélectrique prédomine aux basses énergies, surtout avec un numéro atomique élevé. La probabilité d'occurrence est une fonction décroissante de l'énergie du rayonnement incident.
- Deuxièmement : l'effet Compton est l'effet prédominant aux énergies intermédiaires et la valeur du facteur μ varie relativement un petit peu en fonction de l'énergie.
- Troisièmement : la probabilité d'occurrence de l'effet de production de paires, lorsque l'énergie du photon est élevée, au-dessus de son seuil d'apparition de $1,022MeV$, est une fonction croissante de l'énergie. Pour les énergies des rayonnements γ émis par les radionucléides (0.1 a quelques MeV), on Peut constater que l'effet Compton est le mode d'interaction privilégié (Christine, and Henri, 2007).

1.6.5. Interaction matière-rayons X :

L'interaction des photons avec la matière est un phénomène complexe qui fait intervenir de nombreux processus, cette dernière la plupart du temps dépend de l'énergie du photon. Et ils peuvent avoir des difficultés à interagir complètement avec la matière, en raison de son existence sur une gamme très étendue de longueur d'onde.

Lorsqu'un faisceau de rayons X traverse la matière, il se désintègre après avoir été excité par le processus d'ionisation ou d'excitation du rayonnement électromagnétique, l'énergie E du rayonnement incident, quelle que soit sa nature, peut servir à faire passer des atomes de la matière de leur état fondamental à un état excité, par éjection d'un électron. L'état de l'atome cible après interaction se trouve instable à une durée de vie très courte (pour les atomes isolés, environ 10^{-16} secondes) l'atome retourne à son état fondamental par une cascade de transitions électroniques, où chaque transition correspond à l'émission d'une raie caractéristique (Benoit *et al.*, 1987).

1.7. La loi d'atténuation du rayonnement dans la matière :

Chaque interaction de photon avec la matière mène à une atténuation de l'intensité de flux initial. Cette atténuation suit une loi exceptionnelle décroissante entre le nombre de photons incidents I_0 et le nombre de photons transmis I à travers un milieu d'épaisseur x comme indiqué dans l'équation (I.22) (Mehenna, 2010) :

$$I(x) = I_0 e^{(-\mu x)} \quad (\text{I.22})$$

μ : Le coefficient d'atténuation linéique qui dépend de l'énergie de photon et de la nature de milieu. Aussi le coefficient d'atténuation massique μ_m est défini par le rapport du coefficient d'atténuation linéaire sur la densité du milieu, comme indiqué dans la formule :

$$\mu_m (cm^2 \cdot g^{-1}) = \frac{\mu}{\rho} = \frac{\sigma_{tot} N}{M} \quad (I.23)$$

Où N est le nombre d'Avogadro.

M est la masse molaire.

σ_{tot} est la section efficace totale.

Les coefficients d'atténuation de masse varient en fonction de la nature du milieu et de l'énergie des photons incidents et ont permis de définir les trois processus réactionnels suivants:

σ/ρ Pour l'effet photo-électrique.

K/ρ Pour l'effet Compton.

τ/ρ Pour la création des paires.

L'atténuation massique totale des trois processus s'écrit : (Turner, 1995).

$$\mu_m = \frac{\sigma}{\rho} + \frac{K}{\rho} + \frac{\tau}{\rho} \quad (I.24)$$

Cette atténuation 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. (Zidi, 2021).

En se basant sur la composition et la densité du matériau et en utilisant la loi d'atténuation, nous pouvons mesurer l'effet des photons sur le matériau et prédire comment le flux de photons sera atténué, cela nous aide à comprendre comment les rayonnements interagissent avec les matériaux et à déterminer les niveaux d'absorption, de diffusion et de transmission des rayonnements. Cela est crucial dans de nombreuses applications, telles que utilisé dans l'industrie des rayons X pour le diagnostic médical, il est également utilisé dans la recherche scientifique pour mesurer les rayonnements, déterminer les niveaux de sécurité (El Hajjar, 2014).

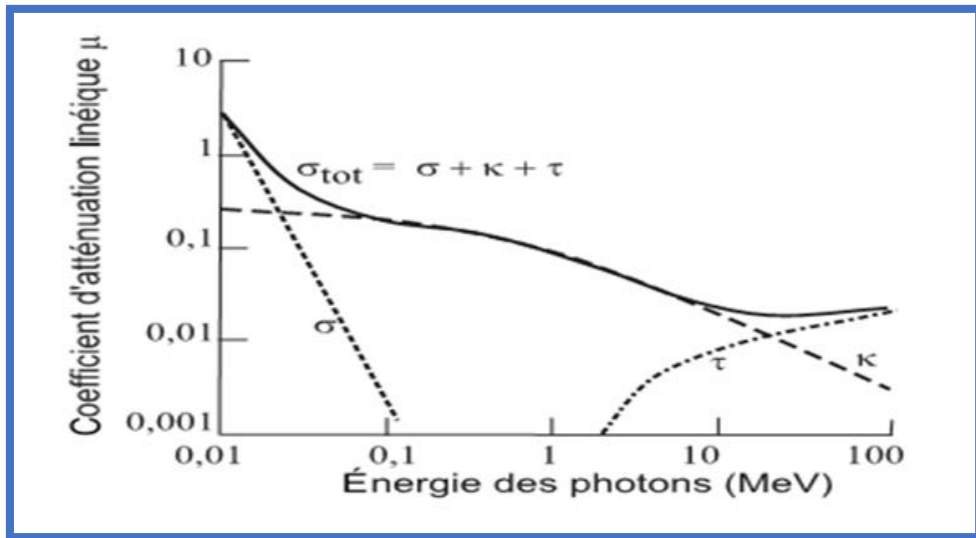


Figure I.15 : Contributions respectives au coefficient d’absorption linéique des trois modes d’absorption de l’énergie des photons par la matière en fonction de l’énergie des photons (Bouhebel, 2023).

I.8. La couche demi-atténuation :

Le coefficient linéique d’atténuation est inversement proportionnel à une grandeur appelée couche de demi-atténuation, c’est l’épaisseur de matière traversée qui atténue de moitié l’intensité du rayonnement (photons incidents). En effet, en écrivant $\frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\mu CDA}$, il vient immédiatement (Dahi, and Meherchi, 2011) :

$$CDA = \frac{\ln 2}{\mu} \tag{I.25}$$

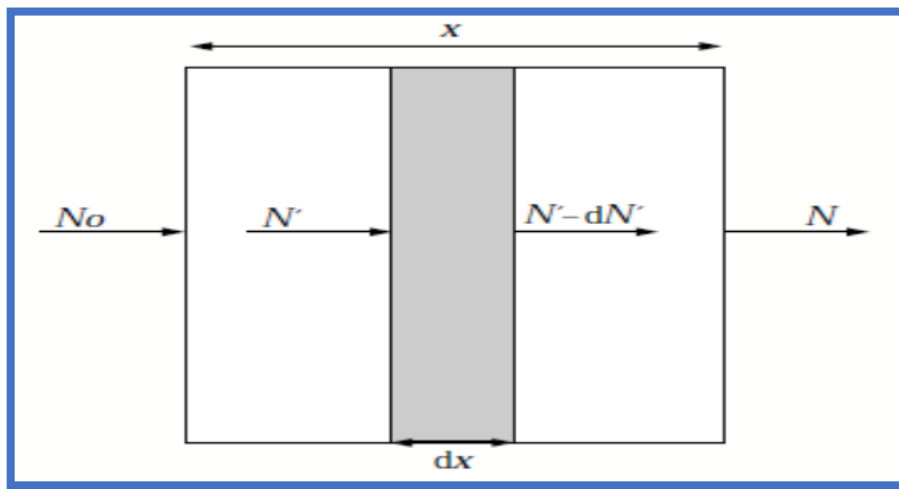


Figure I.16 : l’atténuation d’un faisceau de photons dans la matière (Dahi and Meherchi, 2011).

1.9. Ionisation en couche électronique interne :

Il est vrai que l'ionisation désigne la dissociation d'une molécule en ions positifs et négatifs ou la dissociation d'un atome en un ion positif et des électrons. Elle peut également être utilisée pour décrire la perte d'un ou plusieurs électrons d'un atome neutre. Les rayons X et les rayons gamma γ sont des rayonnements ionisants car ils peuvent ioniser la matière (Kahoul, 2015).

Ionisation par photons :

L'ionisation de la matière par des photons «effet photoélectrique» a été découvert par Heinrich Hertz en 1887.

Dans un atome, les électrons sont organisés en couches. Plus la couche est proche du noyau, plus l'énergie de liaison entre le noyau et l'électron est forte. Cela signifie que les électrons des couches internes sont plus étroitement liés au noyau que ceux des couches externes.

Les photons X , en raison de leur énergie élevée, peuvent arracher des électrons près du noyau des atomes, provoquant ainsi l'ionisation. Cela signifie qu'un électron du niveau S ($S = K, L, M, \text{etc.}$) est éjecté de l'atome vers l'extérieur (Hamouda, 2015).

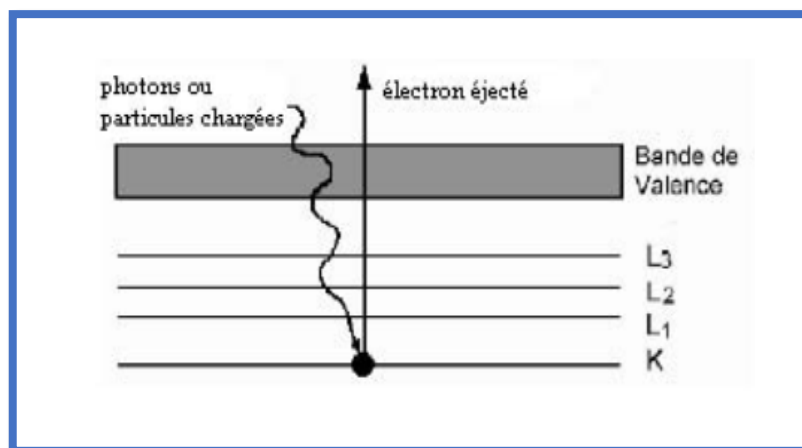


Figure I.17 : L'ionisation en couche électronique interne (Ben Abdelouahed, 2004).

1.10. Excitation et désexcitation des couches internes des atomes :

a. Excitation des couches internes des atomes :

Les rayons X et les électrons sont deux types de rayonnements de moyenne énergie, capables d'affecter les couches électroniques profondes de la matière. Une partie de leur énergie incidente peut être utilisée pour augmenter l'énergie potentielle des atomes en les faisant passer d'un état fondamental à un état excité par expulsion d'un électron. Pour expulser un électron du niveau X d'un atome et ioniser l'atome au niveau X (avec $X = K, L_1, L_2, \dots$), il faut fournir l'énergie W_x approprié à ce niveau dans l'atome en question. Cette énergie est d'autant plus grande que l'atome est lourd et que l'électron est proche du noyau. La seule condition est d'avoir une énergie de chute E_0 supérieure à W_x . Lorsqu'un atome est ionisé, un électron orbital est libéré en échange d'énergie cinétique E_c . Qui est la différence entre l'énergie perdue par le rayonnement incident et l'énergie potentielle W_x .

Lorsque le rayonnement incident est électromagnétique, comme les rayons X , l'électron éjecté est appelé photoélectron.

La section efficace d'ionisation est maximale lorsque la fréquence du rayonnement incident ν_0 est légèrement supérieure à la fréquence d'ionisation (ou la longueur d'onde incidente λ_0 est légèrement inférieure à la longueur d'onde d'ionisation). Si le rayonnement incident est électronique, l'électron éjecté est appelé électron secondaire (Gravereau. 2011).

b. Désexcitation des couches internes des atomes :

C'est un état excité est instable et a une durée de vie très réduite, de l'ordre de 10^{-16} secondes. Les processus de désexcitation peuvent se produire spontanément. Quand l'électron d'un atome excité revient sur son orbite fondamentale par des transitions électroniques de type $Y - X$, où un électron sautant d'un niveau Y , qui est un niveau externe, à un autre niveau X ; et l'énergie est libérée $\Delta W = W_x - W_y$. L'ionisation se produit dans les couches profondes dans le domaine d'énergie moyenne, étudié ici.

L'énergie libérée ΔW est émise sous forme de rayonnement caractéristique, et il existe deux modes possibles (Bertin, 1970) :

- Énergie de rayonnement électromagnétique : rayonnement X caractéristique.
- Énergie cinétique : électron Auger.

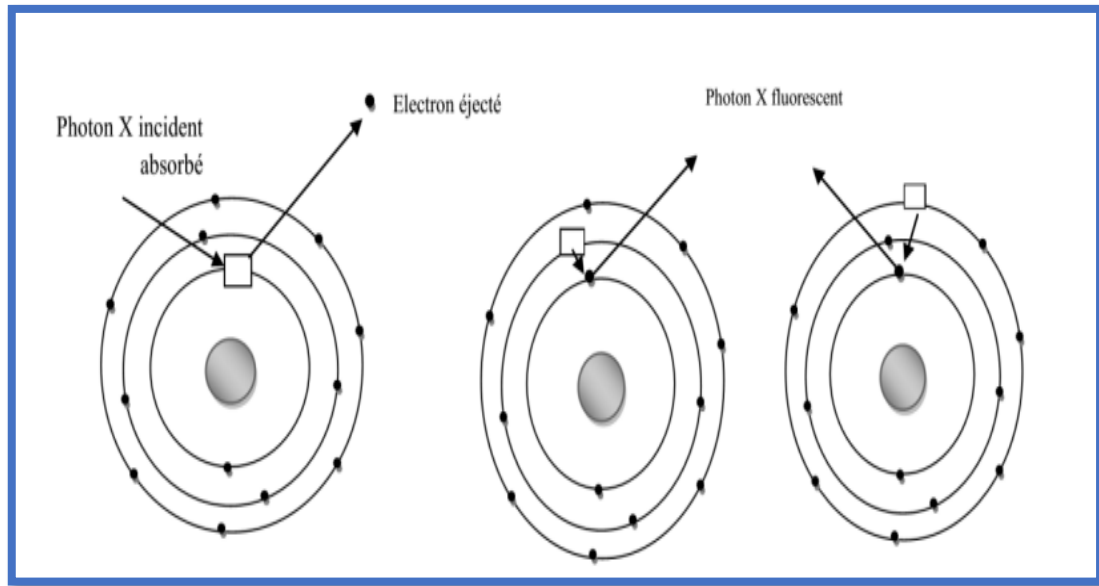


Figure I.18 : Excitation et désexcitation d'atome.

1.11. Transition radiative et non radiative :

Nous avons vu précédemment que lorsque les électrons cheminent dans un milieu matériel, ils interagissent avec lui en subissant des collisions aussi bien élastiques qu'inélastiques. Ces dernières peuvent donner naissance à des lacunes dans les couches internes des atomes qui se trouvent ainsi dans un état excité. Le retour à un état d'équilibre (désexcitation) s'effectue soit par émission radiative (émission X). Les processus radiatifs regroupent l'ensemble des mécanismes d'absorption ou d'émission de photons. Lorsqu'une particule absorbe un photon, un électron de son nuage électronique peut passer sur une couche supérieure, ces photons ont des énergies caractéristiques correspondant aux différences d'énergie entre les niveaux électroniques impliqués dans la transition. Soit par émission non radiative (émission Auger) le phénomène de relaxation non radiative ne fait pas intervenir de photons. Il a lieu par répartition, sur les molécules voisines, de l'énergie sous forme de chaleur durant les collisions entre les molécules, cela peut entraîner l'éjection d'un électron de la couche externe, créant ainsi un trou électronique.

Ces mécanismes de désexcitation des couches internes des atomes permettent de libérer l'énergie emmagasinée lors de l'ionisation et de rétablir l'atome à son état fondamental (Azli, 2010 ; Dilmi, 2014 ; Gravereau, 2011).

*I.12. Fluorescence X :**a. La fluorescence :*

La fluorescence des rayons X (ou fluorescence X) est une technique d'essais non destructifs permettant de détecter et de mesurer la concentration d'éléments dans les objets, dans lequel substance, appelée fluorophore, lorsqu'un fluorophore est exposé à une lumière d'une certaine longueur d'onde, il absorbe l'énergie lumineuse et la réémet à une longueur d'onde différente. Ce phénomène est généralement observé lorsque le fluorophore est excité par une source d'énergie externe telle que la lumière UV ou un laser (Rar, 2006 ; Hamouda, 2015).

b. Principe de fluorescence X :

Le principe de la fluorescence X est basé sur l'émission de rayonnement X par un matériau après avoir été excité par un rayonnement X de plus haute énergie. Donc, lorsque l'échantillon est bombardé par des rayons X , cela entraîne l'émission d'électrons, de rayons X et de raies caractéristiques. Certains rayons γ interagissent avec les électrons des couches internes y de l'échantillon, ce qui les éjecte. Les trous ainsi créés dans les couches internes y sont immédiatement comblés par les électrons provenant des couches externes x , qui sont à un niveau plus externe que x . C'est une technique utilisée en spectroscopie pour analyser la composition élémentaire des échantillons. Et vous savez est (FRX). (Lynch, 2001.)

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

$$\Delta E = E_x - E_y \quad (I.26)$$

à transition de l'électron de sa couche initiale, par exemple, la couche L_2 vers une couche plus profonde K entraîne une modification de son énergie de liaison ΔE . La conservation de l'énergie initiale et finale s'exprime par l'égalité $\Delta E = E_K - E_{L_2}$. (I.27)

Cette variation de l'énergie se traduit par l'apparition d'un photon X et la transition de l'électron est dite radiative (Ben Abdelouahed, 2004).

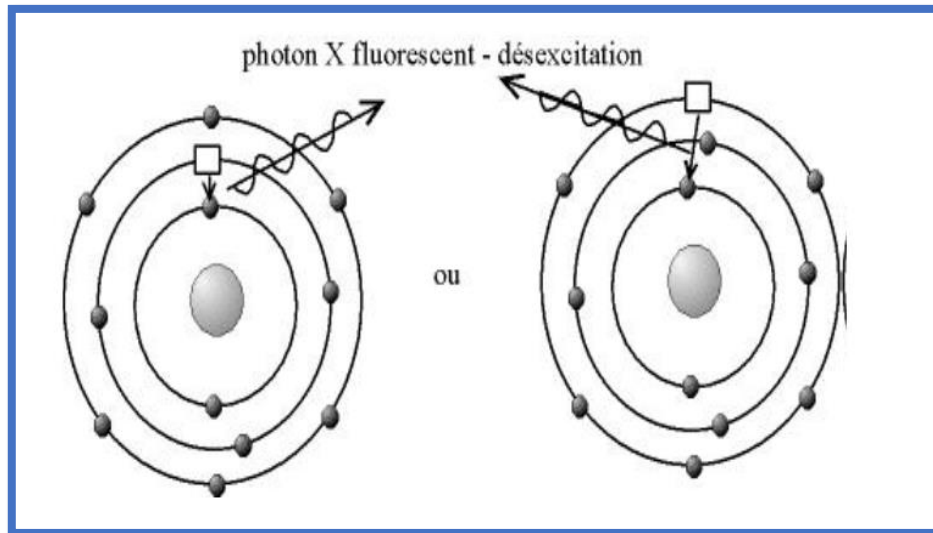


Figure I.19 : Désexcitation par émission fluorescente. (Picard, 2015).

c. Rendement de fluorescence :

Les valeurs disponibles précises des rendements de fluorescence sont importantes pour différentes investigations dans les secteurs tels que la physique atomique, physique nucléaires et science des matériaux, aussi bien que pour la physique appliquée (Zschornack, 2007).

Soit un atome ionisé en couche X ($X = K, L_1, L_2, \dots$ etc). L'ionisation a libéré un électron atomique, à la photo-ionisation en particulier correspond une photo électron. Mais, le cortège électronique de l'atome se réorganise avec l'émission de rayonnements (fluorescence X dans le cas de la photo-ionisation) et aussi avec émission d'électrons dits « électrons Auger », par référence aux travaux de Pierre Auger (effet Auger) (Cauchois, and Despujols, 1990).

Le rendement de fluorescence W_K d'une couche X ou d'une sous-couche atomique est défini comme étant la probabilité pour qu'une lacune dans cette couche X ou sous-couche soit comblée par un électron par une transition radiative, il est donné par :

$$\omega_K = \frac{N_X}{N} = \frac{N_X}{N_X + N_A} \quad (\text{I.28})$$

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 (Beladel, 2015).

On peut écrire le rendement de fluorescence par d'autre relation qui est relié avec la section efficace sous la forme (El Hajjar, 2014.) :

$$\omega_K = \frac{\sigma_K^x}{\sigma_K^I} \quad (\text{I.29})$$

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

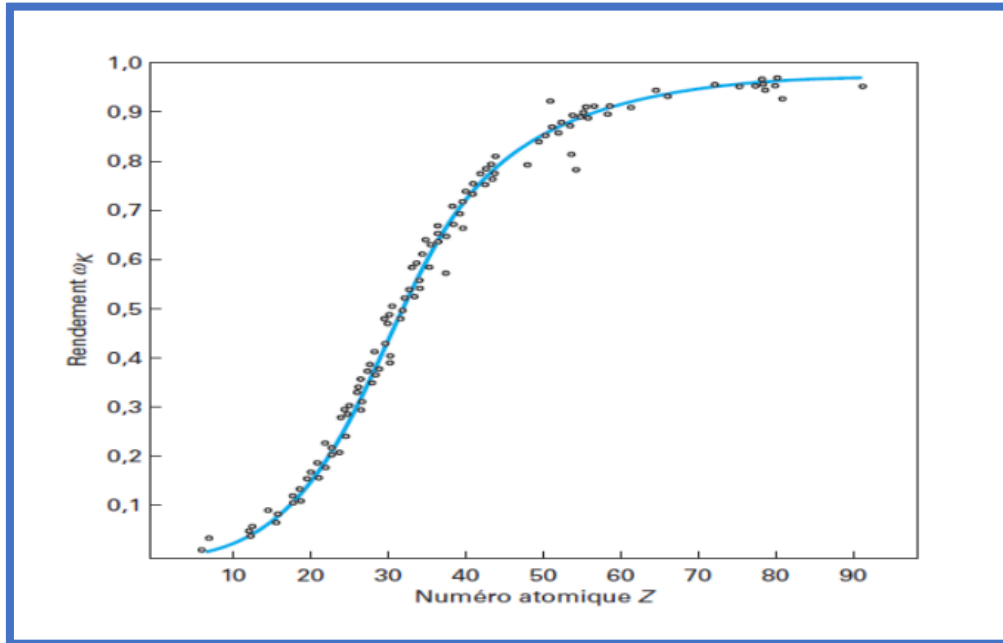


Figure I.20 : Le rendement de fluorescence ω en fonction du numéro atomique Z pour la couche K (Bendjedi, 2018).

I.13. L'effet Auger :

L'effet Auger est un phénomène de relaxation atomique qui se produit lorsqu'un électron est éjecté d'une couche profonde de l'atome. Ce processus se fait par les étapes suivant :

1. Éjection de l'électron initial : Une excitation extérieure éjecte un électron de la couche profonde de l'atome, généralement par un effet photoélectrique sous l'influence de rayons X incidents.
2. Transition électronique : Dans ce cas, un électron de la couche périphérique comble la lacune créée par l'électron éjecté, cette transition s'accompagne d'une libération d'énergie. Cette transition électronique peut conduire à deux possibilités. soit émission d'un photon X , soit un autre électron est émis de l'atome, ce qui est appelé un électron Auger.
3. Cascade Auger : Lorsqu'un électron Auger est émis, cela crée une nouvelle lacune dans l'atome. Cette lacune peut être comblée par un autre électron, cela conduit à une réaction

en chaîne appelée cascade Auger. C’est comme une réaction en cascade d’électrons qui se remplacent mutuellement. L’énergie de l’électron Auger correspond à la différence d’énergie entre les états énergétiques. C’est une mesure de l’énergie libérée lorsqu’un électron se déplace d’un état à un autre. Cette énergie est donnée sous la forme : (Rey, and Montarou, 2006 ; Meddah, 2021) :

$$E_{cin}(LMN) = E_L(L) - E_L(M) - E_L(N) \tag{I.30}$$

$E_L(L)$ 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 .

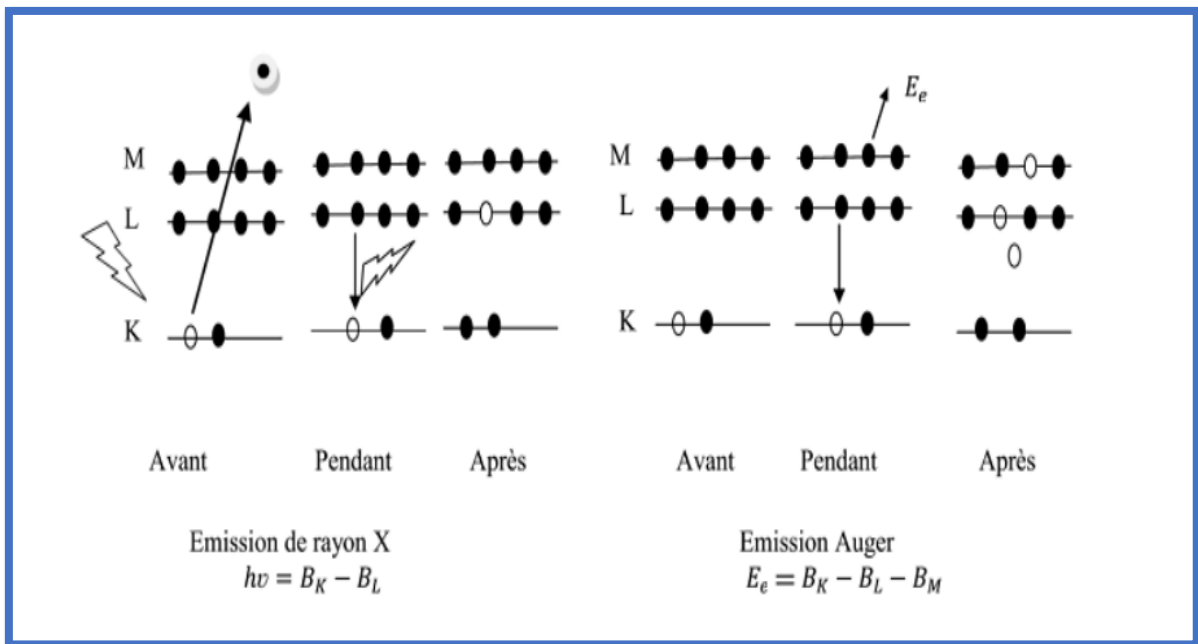


Figure.I.21 : Émissions X et émission Auger (noir : l’état électronique est occupé ; blanc : l’état électronique est vide). (Naidji, 2021).

I.14. Les transitions Coster-Kronig :

Les transitions Coster-Kronig correspondent au transfert d’électrons entre deux niveaux d’une même couche électronique. Ces transitions se produisent lorsqu’une lacune électronique se déplace d’un plan interne à un plan externe dans la même couche, avant qu’une transition radiative ou Auger ne se produise, et elles sont très rapides. Par exemple, dans la couche L_1 , un

électron peut passer de L_2 à L_3 . Ces transitions sont plus rapides que les transitions entre les couches de rayonnement.

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 combler l'espace et ceux émis par l'excitation) appartiennent au même niveau d'énergie (Bambyenk, *et al.*, 1972).

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

$$w_i^X = \sum_{i=1}^K N_i^X \omega_i^X \tag{I.31}$$

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

$$N_i^X = n_i^X / \sum n_i^X \text{ et } \sum_{i=1}^K N_i^X = 1 \tag{I.32}$$

En étudiant les transitions de Coster-Kronig, deux approches peuvent être prises en compte. D'abord, le rendement moyen de fluorescence $\overline{\omega_X}$ peut être considéré comme une combinaison linéaire des rendements de fluorescence ω_i^X des sous-couches k définies par leurs distributions V_i^X des lacunes incluant le changement créé par les transitions de Coster-Kronig :

$$\overline{\omega_X} = \sum_{i=1}^k V_i^X \omega_i^X \tag{I.33}$$

La probabilité de transition de Coster-Kronig pour le passage une lacune d'une sous-couche X_i à une sous-couche supérieure X_j est notée par f_{ij}^X et par conséquent les quantités V_i^X peuvent être écrites en termes de nombres relatifs N_i^X des lacunes primaires comme suit (Bambynek, *et al.*, 1972) :

$$V_1^X = N_1^X$$

$$V_2^X = N_2^X + f_{12}^X N_1^X$$

$$V_3^X = N_3^X + f_{23}^X N_2^X + (f_{13}^X + f_{12}^X f_{23}^X) N_1^X$$

.....

$$V_k^X = N_k^X + f_{k-1, k}^X N_{k-1}^X + (f_{k-2, k-1}^X f_{k-1, k}^X) N_{k-2}^X + \dots + (f_{1k}^X + f_{12}^X f_{2k}^X + f_{12}^X f_{23}^X f_{3k}^X + \dots) N_1^X$$

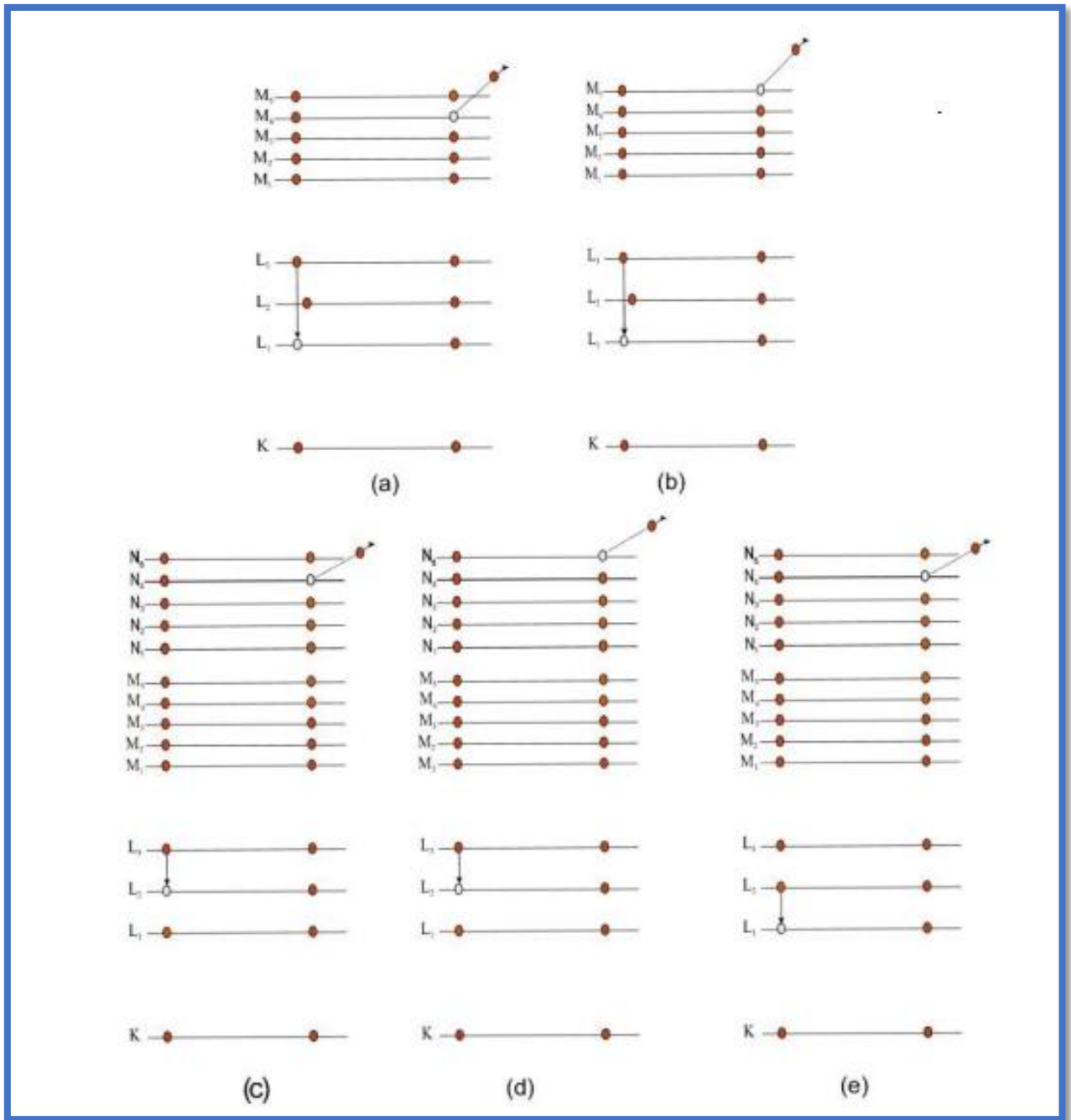


Figure I.22 : Le diagramme schématique montrant (a) $L_1 - L_3M_4$, (b) $L_1 - L_3M_5$, (c) $L_2 - L_3N_4$, (d) $L_2 - L_3N_5$ and (e) $L_1 - L_2N_4$, CK processus de transition (Singh Kainth, 2018).

I.15. La section efficace :

En physique nucléaire ou en physique des particules, la section efficace est une grandeur physique reliée à la probabilité d'interaction d'une particule pour une réaction donnée. L'unité de section efficace est le barn (b) : $1 \text{ b} = 10^{-24} \text{ cm}^2 = 10^{-28} \text{ m}^2$. La section efficace est une mesure de la probabilité qu'une particule interagisse lors d'une collision ou d'une réaction, la section efficace ne dépend pas vraiment de la taille réelle de la particule, mais plutôt de la nature spécifique de la collision ou de la réaction, ainsi que des interactions existantes entre les particules impliquées. C'est pour cela qu'on utilise le terme "section efficace" au lieu de simplement "section" (Basbas, *et al.*, 1973 ; Dechoucha, 2013).

La section efficace de production des rayons X est donnée par le produit de la section efficace d'ionisation σ_I de la couche considérée et du rendement de fluorescence ω de la manière suivante (Dupuis, 2012.) :

$$\sigma_X = \sigma_I \omega \quad (\text{I.34})$$

Il existe une relation simple de rendement de fluorescence entre la section efficace de production de rayons X de la couche K et la section efficace d'ionisation de la même couche (ω_K), et les taux d'émission de rayons X pour les différentes transitions vers la couche K , est donnée par une expression spécifique. Cette expression permet de calculer la section de production des raies K :

$$\sigma_{K\alpha}^X = \frac{1}{1 + \left(\frac{k\beta}{k\alpha}\right)} \omega_K \sigma_K^I \quad (\text{I.35})$$

$$\sigma_{K\beta}^X = \frac{1}{1 + \left(\frac{k\beta}{k\alpha}\right)^{-1}} \omega_K \sigma_K^I \quad (\text{I.36})$$

Où σ_K^I sont les sections efficaces de photo-ionisation de la couche K .

Les deux relations (I.35) et (I.36) peuvent réécrire sous la forme :

$$\sigma_{K\alpha}^X = F_{K\alpha} \omega_K \sigma_K^I \quad (\text{I.37})$$

$$\sigma_{K\beta}^X = F_{K\beta} \omega_K \sigma_K^I \quad (\text{I.38})$$

Avec : $F_{K\alpha} = \frac{1}{1 + \frac{k\beta}{k\alpha}}$ et $F_{K\beta} = \frac{1}{1 + \frac{k\alpha}{k\beta}}$

I.16. la relation 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 (Rebouli, 2022 ; Naidji, 2021) :

$$\eta_{KL} = \frac{2-\omega_K}{1+\frac{K_\beta}{K_\alpha}} \quad (\text{I.39})$$

Références Bibliographiques

Azli, T., 2010. Calcul de l'énergie déposée des particules chargées dans la matière, Thèse de magister de l'université Farhat Abbas, Sétif.

Bailey, D. L., and Humm, J. L., 2014. Nuclear medicine physics: a handbook for teachers and students.

Bambynek, W., Crasemann, B., Fink, R., Freund, H., Mark, H., Swift, C., Price, R., and Rao, P., 1972. X-ray fluorescence Yields, Auger and Coster-kronig Transition Probabilities, Rev. Mod. Phys. 44, 716.

Basbas, G., Brandt, W., Ritchie, R.H., 1973. Perturbed-stationary-state theory of atomic inner-shell ionization by heavy charged particles, phys.Rev. A 7, 1971.

Bekrar, S., 2022. Contraintes naturelles de radionucléides dans un échantillon d'eau potable (eaux de sources) de la région de Bordj-Bou-Arreidj- Algérie, mémoire de master, Université Mohamed El Bachir Elibrahimi, Bordj Bou Arreidj.

Beladel, B., 2015. "Etude du taux de sélénium dans la ration alimentaire Algérienne au moyen des techniques nucléaire de micro-analyse", Thèse de Doctorat, Ouargla.

Ben Abdelouahed, H., 2004. Etude de la fluorescence X : Développement dans Geant4 de nouveaux modèles de sections efficaces pour la simulation PIXE. Applications biologiques et archéologiques, Thèse de doctorat, l'Université de Tunis El Manar en Tunisie.

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

Benoit, D., Grillon, F., Maurice, F., Ruste, J., and Tixier, R., 1987. Microanalyse par sonde électronique : Spectrométrie de Rayons X, Hoggar Edition, Paris.

Bensaci, F., and Benchaib, H., 2014, Etude théorique de la spectroscopie de fluorescence des rayons X (XRF) pour l'étude des matériaux, Mémoire de Master, Université Mohamed El Bachir Elibrahimi Bordj Bou Arreidj.

Benslimane, M., 2004. Etude structurale des composés à base d'étain et de complexes organométalliques au cobalt et au manganèse, Thèse de doctorat, Université Mentouri de Constantine.

Bernard, L., 2017, Le boson de Higgs et sa place dans le modèle standard, Linguistique, Université Sorbonne Nouvelle – Paris 3.

Bertin, E., 1970. Principles practice of X-ray spectrometric analysis, New York.

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

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

Bouhila, G., 2018. Étude de la répartition de radionucléides présents dans les lacs de barrages artificiels. Applications : 'Barrage de Beni Haroun', Thèse de Doctorat de l'université Constantine 1.

- Cauchois, Y., and Despujols, J., 1990. Techniques de l'ingénieur.
- Christine, Jimonet et Henri, Metivier., 2007. "Personne compétente en Radioprotection", (Livre), Principes de radioprotection-réglementation, EDP Sciences.
- Claude le Sech et Christian Ngo., 2010. Physique nucléaire des quarks aux applications, Dunod, paris, page 61,63.
- Dahi, E., Meherchi, L., 2011. Système de double calcul dosimétrique, Mémoire de master d'université de Tlemcen.
- Davide Bertolloto et Pavel Frajtag et Gaëtan Girardin., septembre 2011. école polytechnique fédérale de lausanne, flux neutronique – théorie et mesures, version 3.2, page 03.
- Dechoucha, S., 2013. Sections efficaces semi-empiriques de production des couches M des éléments de numéros atomiques $60 \leq Z \leq 90$ par des protons en vue des applications analytiques, thème de master, Université Mohamed Boudiaf, M'sila.
- Denden, O., 2009. La radioactivité des eaux Thermales de la willaya de Sétif, Thème de Magister, Université Ferhat Abbas– Sétif.
- Dilmi, S., 2014. Etude de quelques processus atomiques affectant la cinétique atomique : Application à l'ionisation de l'hélium neutre et quelques ions héliumoïdes, Université Badji Mokhtar Annaba.
- Dupuis, T., 2012. "Développement d'un dispositif d'analyses par faisceaux d'ions de haute énergie et applications en archéométrie", Thèse de Doctorat université de Liege.
- El Hajjar, D., 2014. Développement de la méthode PIXE à haute énergie auprès du cyclotron ARRONAX, Thèse de doctorat, L'Université Nantes Angers Le Mans en France.
- Gravereau, P., 2011. Introduction à la pratique de la diffraction des rayons X par les poudres, 3rd cycle, Université Bordeaux 1, France. pp.209.
- Hamouda, L., 2015. Nouvelle base de données des rendements de fluorescence de la sous-couche L_3 , Mémoire de master, Université Mohamed El Bachir El Ibrahim, Bordj Bou Arreridj.
- Kaaloul, K., 2023. Absorption d'un photon par un noyau atomique, Mémoire de Master, Université Mohamed El Bachir Elibrahimi, Bordj Bou Arreridj.
- Kahoul, R., 2015. Construction d'une nouvelle base de données des rendements de fluorescence de la sous-couche L_1 , Mémoire de Master, Université Mohamed El Bachir Elibrahimi, Bordj Bou Arreridj.
- Khaled, F., 2010. Etude spectroscopiques des verres irradiés: application en dosimétrie nucléaire, Thèse de Doctorat, Université de Monastir.
- Klotz, F., Le Clech, L., and Bergdolt, J., version-2018. La radioactivité (des radioéléments aux applications scientifique), cea.
- Krause, M.O., 1979. Atomic Radiative and Radiationless Yields for K and L Shells, J. Phys. Chem. Ref. Data 8.
- Laurence, B., 2007. Etude de la radioactivité des eaux potables de Bretagne et perspective d'évaluation du risque sanitaire éventuel lié au radon, Mémoire d'ingénieur, Ecole Nationale de la santé publique DRASS de Bretagne.

- Lynch, J., 2001. Analyse Physico-Chimique des Catalyseurs Industriels, Editions TECHNIP, Paris.
- Meddah, M., 2021. 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.
- Meddouch, K., 2018. Mémoire de master, Université Mohamed El Bachir El Ibrahim, Bordj Bou-Argeridj.
- Mehenna, A., 2010. Métrologie des rayonnements à l'aide d'une chambre a extrapolation, université des sciences et de la technologie Houari Boumediene.
- Messaoudene, F., 2007. Analyse et mesure de la radioactivité par les détecteurs solides de traces nucléaires (dstn), Thème de de Magister, Université Ferhat Abbas– Sétif.
- Myers, R. L., 2003. The basics of chemistry. Greenwood Publishing Group.
- Naidji, H., 2021. Calcul semi empirique des rendements de fluorescence de la sous couche L_2 des éléments $40 \leq Z \leq 96$, Mémoire de master, Université Mohamed El Bachir El Ibrahim, Bordj Bou Argeridj.
- Nikjoo, H., Uehara, S., and Emfietzoglou, D., 2012. Interaction of radiation with matter. CRC press.
- Odile, C., 2008. Thèse de Doctorat de l'université Paris 12-Val-De-Marne.
- Picard, J., 2015. Développement de la LIBS pour l'analyse en ligne de produits uranifères ou plutonifères solides, Thèse de docteur de l'Université de Bourgogne en France.
- Podgorsak, E. B., and Podgoršak, E. B., 2014. Compendium to Radiation Physics for Medical Physicists: 300 Problems and Solutions, 387–514.
- Pouthier, T., 2006. Mise en évidence de cassures double brin de l'ADN induites par irradiation de kératinocytes humains en microfaisceau alpha, Doctoral dissertation, Université Sciences et Technologies-Bordeaux I .
- Rar, H., 2006. Système de détection et de mesure de la fluorescence, Mémoire de master, Université du Québec À Montreal au Canada.
- Rebouli, H., 2022. Les probabilités de transfert lacunaire de la couche K (η_{KL}) : Base de données, Mmoire de Master, Université Mohamed El Bachir Elibrahimi –Bordj Bou Argeridj.
- Rey, M., 2007. Étude du tomographe de haute résolution pour petits animaux Clear PET par la méthode de Monte Carlo, Thèse de doctorat, EPFL.
- Rey, O., Montarou, G., 2006. Évaluation de l'effet Auger dans le mécanisme radio sensibilisant des nanoparticules d'or à l'aide du logiciel de calcul Monte-Carlo LQD (Travail de Master 2), Pôle santé du laboratoire de physique corpusculaire de Clermont-Ferrand, France.
- Sahoo, N., 2015. Introduction to radiation therapy physics. Princ. Pract. Radiat. Ther, 270.
- Schörner, K., 2012. Ph.D, Dissertation, München, Technische Universität München, Diss.
- Seghiri, S., 2018. Effets sur l'organisme des rayonnements ionisants (Effet Déterministe- Effet Stochastique), Mémoire de master, Université Mohamed El Bachir El Ibrahim, Bordj Bou Argeridj.

Selmi, A., 2011. L'influence des impuretés sur les coefficients des transports, université Tunis El Manar.

Singh Kainth, H., Singh, R., Singh, G., Mehta. D., 2018. Chemical shift in $L\alpha$, $L\beta_1$, $L\beta_{3,4}$, $L\beta_{2,15}$, $L\gamma_1$ and $L\gamma_{2,3}$ emission lines of ^{47}Ag , ^{48}Cd and ^{50}Sn compounds, Nuclear Inst, and Methods in Physics B 414, 84-98.

Slimani, A., 2016. Interaction des rayonnements avec la matière, Mémoire de master, Université d'Adrar.

Souques, M., 2011. Champs électromagnétiques, environnement et santé, Springer Science & Business Media Edition.

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

Turner, J. E., 1995. Atoms, radiation, and radiation protection, John Wiley & Sons.

Zidi, A., 2021. Calcul du rapport d'intensité d'émission des rayons X ($K\beta/K\alpha$) des éléments lourds, Mémoire de master, Université Mohamed El Bachir El Ibrahimi, Bordj Bou Arreridj.

Zschornack, G., 2007. Handbook of X-Ray Data, Springer Edition, New York.

Chapitre II

*Calcul empirique et semi-empirique du
facteur de saut d'absorption J_K*

II.1. Introduction :

La physique atomiques est une branche passionnante de la physique moderne qui étudie les échelles plus petites que l'atome, notamment les particules élémentaires et leurs interactions, dans ce contexte, le facteur de saut J_K est un paramètre quantitatif qui caractérise la probabilité de transition d'un état à un autre pour une particule atomique, et constitue un facteur important en plus du saut d'absorption dans l'émission et l'absorption des rayons X fluorescents.

Des valeurs précises de ces paramètres sont nécessaires en raison de leurs nombreuses applications dans divers domaines et sont fréquemment trouvées dans ces derniers pour résoudre des problèmes physiques, comme la physique des rayonnements, les dosimètres de rayonnements, le blindage contre les rayonnements, la physique atomique et l'astrophysique.

Dans cet article, il a été présenté et étudié les valeurs du facteur de saut J_k dès les éléments dans l'intervalle $57 \leq Z \leq 71$ pour toutes les valeurs expérimentales, au prises du mémoire Benattia. A (Benattia, 2023). En raison de leur importance dans ce travail, nous les étudierons plus en détail au ce chapitre.

II.2. Mesure du facteur de saut d'absorption (J_K) :

Il est bien connu que le facteur de saut d'absorption de la couche K pour une lacune dans la couche K peut être créé en utilisant des radiations gamma, des électrons de haute énergie, des ions légers et des ions lourds.

La vacance dans la couche K peut être transférée vers les couches L_1 , L_2 ou L_3 par des processus radiatifs et non radiatifs. Le processus radiatif, également connu sous le nom de fluorescence des rayons X , est important dans les éléments à Z élevé. En revanche, la transition non radiative, connue sous le nom de transition Auger, est importante dans les éléments à faible Z . La probabilité totale de transfert de vacance KL est la somme de la probabilité de transfert de vacance radiative $KL(R)$ et de la probabilité de transfert de vacance non radiative $KL(A)$. La probabilité totale de transfert de vacance pour la couche $K - L$, est le nombre de vacances de la couche L produites par désintégration d'une vacance de la couche K . Les valeurs précises de KL sont nécessaires dans les processus tels que la capture d'électrons nucléaires, la conversion interne des rayons gamma, l'effet photoélectrique et les transitions Auger (Mirji, *et al.*, 2015).

Une revue de la littérature montre que quatre méthodes sont adoptées pour mesurer le taux de saut de la couche K et les facteurs de saut : la méthode d'atténuation des rayons X ou

gamma, l'atténuation des photons diffusés par Compton, la méthode de fluorescence X à dispersion d'énergie et la méthode de transmission du bremsstrahlung. Plusieurs chercheurs ont utilisé les méthodes susmentionnées pour déterminer le taux de saut d'absorption et le facteur de saut. Nous les souvenons brièvement comme suit :

La première méthode est celle de l'atténuation des rayons gamma ou des rayons X . Dans la méthode d'atténuation des rayons gamma ou des rayons X , l'atténuation des photons gamma de différentes énergies autour du bord d'absorption K est mesurée et les facteurs de saut d'absorption de la couche K et les facteurs de saut sont dérivés des mesures du coefficient d'atténuation de masse (Kacal, *et al.*, 2015).

La deuxième méthode est l'atténuation Compton : les photons gamma diffusés par Compton sont atténués à travers une cible élémentaire dont le taux de saut d'absorption de la couche K doit être mesuré. Il est bien connu que l'énergie du photon diffusé par Compton est fonction de l'angle de diffusion. En ajustant l'angle de diffusion, on fait varier l'énergie du photon diffusé par Compton. Le coefficient d'atténuation de masse est mesuré en fonction de l'énergie du photon diffusé par Compton autour de l'énergie de liaison de la couche K de l'atome cible. Plusieurs chercheurs ont adopté cette méthode pour mesurer le taux de saut d'absorption de la couche atomique (Bennal, and Badiger, 2007).

La seule différence entre les deux méthodes est un moyen d'obtenir une source secondaire.

Une autre méthode est la méthode de fluorescence X à dispersion d'énergie, certains paramètres de fluorescence de la couche K tels que les sections efficaces de production de K , les rendements de fluorescence X de la couche K et les facteurs d'intensité des rayons $X K\beta$ à $K\alpha$ sont mesurés en créant des lacunes de la couche K avec une source radioactive ou un tube à rayons X et les facteurs et facteurs de saut sont dérivés en utilisant ces paramètres.

La dernière méthode est la méthode de transmission bremsstrahlung, qui consiste à faire passer un rayonnement bremsstrahlung continu émis par une source bêta faible à travers une cible mince. Le spectre de bremsstrahlung transmis présente une chute rapide d'intensité à l'énergie de liaison de la couche K de l'atome cible, à partir de cette chute rapide, le facteur de saut d'absorption de la couche K est évalué.

Le facteur de saut J_k de la couche K , d'un élément est dérivé a été calculé à l'aide de la relation suivante :

$$J_K = \frac{\sigma_{K\alpha}}{(\sigma_t - \sigma_{ts})\omega_K F_{K\alpha}} \quad (\text{II.1})$$

Où $\sigma_{K\alpha}$, σ_t et σ_{ts} sont respectivement la section efficace de production de rayons X de la raie $K\alpha$, la section efficace d'interaction atomique totale et la section efficace de diffusion totale aux photons d'énergie incidents, ω_K est le rendement de fluorescence de la couche K et $F_{K\alpha}$ est la fraction des taux d'émission de rayons X de la raie $K\alpha$ (Kacal, *et al.*, 2015).

Le facteur de saut d'absorption de la couche K est la probabilité qu'un électron de la couche K soit éjecté de l'élément cible plutôt que de toute autre couche et est défini comme la fraction de l'absorption totale qui est associée à une couche donnée plutôt qu'à toute autre couche.

$$J_K = \frac{\tau_K}{\tau_K + (\tau_{L_I} + \tau_{L_{II}} + \tau_{L_{III}}) + (\tau_{M_I} + \tau_{M_{II}} + \tau_{M_{III}} + \dots) + \dots} = \frac{\text{absorption au niveau } K}{\text{absorption à tous les niveaux}} \quad (\text{II.2})$$

Le facteur de saut d'absorption J_K de la couche K est lié au rapport de saut d'absorption r_K de la couche K par la relation suivante (Kacal, *et al.*, 2014) :

$$J_K = 1 - r_K^{-1} \quad (\text{II.3})$$

Il est important de noter qu'en mesurant les paramètres de fluorescence de la couche K , tels que le rendement de fluorescence ω_K , la section efficace de fluorescence ($\sigma_{K\alpha}$), le facteur d'intensité des raies K_β et K_α ($\frac{I_{K\beta}}{I_{K\alpha}}$) et la section efficace d'atténuation atomique totale (σ_t), les coefficients $K\alpha$ d'atténuation et de masse (μ/ρ) (Bennal, and Badiger, 2007).

Ont été déterminés les facteurs de saut J_K de couche K .

Les sections efficaces expérimentales de fluorescence des rayons X de la raie Ki sont calculées à l'aide de la relation suivante :

$$\sigma_{Ki} = \frac{N_{Ki}}{I_0 G \varepsilon_{Ki} \beta t}; \quad i = \alpha, \beta, \quad (\text{II.4})$$

où le produit $I_0 G$ est l'intensité du rayonnement d'excitation tombant sur la zone des échantillons cibles visible par le détecteur, N_{Ki} est le nombre net de coups sous le photo pic correspondant, t est l'épaisseur de masse de l'échantillon en g/cm^2 , ε_{Ki} est l'efficacité du détecteur pour les rayons X de la raie Ki et β est le facteur de correction de l'auto-absorption pour les photons incidents et les photons de rayons X de la couche K émis.

Le β est calculé à l'aide de la relation suivante :

$$\beta = \frac{1 - \exp[-(\mu_i/\cos\theta_1 + \mu_e/\cos\theta_2)t]}{(\mu_i/\cos\theta_1 + \mu_e/\cos\theta_2)t} \quad (\text{II.5})$$

Où, θ_1 et θ_2 sont les angles des photons incidents et des rayons X émis et t est l'épaisseur de l'échantillon en g/cm^2 . μ_i et μ_e sont les coefficients d'atténuation de masse (cm^2/g) des photons incidents et des rayons X caractéristiques émis, respectivement.

Comme déduire de l'équation II.4, la valeur du facteur de flux $I_0 G \varepsilon_{Ki}$ effectif de photons incidents s'écrit dans la forme suivante :

$$I_0 G \varepsilon_{Ki} = \frac{N_{Ki}}{\sigma_{Ki} \beta_{Ki} t} \quad (\text{II.6})$$

Où les différents termes ont la même signification que ceux expliqués dans l'équation (II.4), sauf que σ_{Ki} est la section efficace de production de rayons X de la raie K_i de la cible. Les sections efficaces théoriques de production de rayons X , σ_{Ki} sont calculées à l'aide de l'équation du paramètre fondamental :

$$\sigma_{Ki} = \sigma_K(E) \omega_K F_{Ki}, \quad (\text{II.7})$$

Où $\sigma_K(E)$ est la section efficace de photo ionisation de la couche K pour les éléments donnés à l'énergie d'excitation, ω_K est le rendement de fluorescence de la raie de la couche K et F_{Ki} est le facteur fractionnaire des rayons K_i .

La fraction des taux radiatifs de rayons X de la raie K_i ($i = \alpha, \beta$), F_{ki} , pour les éléments étudiés est définie à l'aide des relations suivantes (Kacal, *et al.*, 2015) :

$$F_{K\alpha} = \left(1 + \frac{I_{K\beta}}{I_{K\alpha}}\right)^{-1} \text{ et } F_{K\beta} = \left(1 + \frac{I_{K\alpha}}{I_{K\beta}}\right)^{-1} \quad (\text{II.8})$$

Le rendement de fluorescence d'une couche ou d'une sous-couche atomique est défini comme la probabilité qu'une vacance dans cette couche ou sous-couche soit remplie par une transition radiative. Ainsi, pour un échantillon contenant de nombreux atomes, le rendement de fluorescence d'une couche est égal au nombre de photons émis lorsque les lacunes de la couche sont comblées, divisé par le nombre de lacunes primaires de la couche. Les rendements de fluorescence de la couche K pour les éléments étudiés sont dérivés des sections efficaces de fluorescence des rayons X , σ_{Ki} mesurées à l'aide de la relation suivante (kacal, *et al.*, 2014) :

$$\omega_K = \frac{\sigma_{Ki}}{\sigma_K(E)} \quad (\text{II.9})$$

II.3. Les lanthanides :

II.3.1. Définition :

Les lanthanides, qui signifient littéralement "de la famille du lanthane", sont des éléments du tableau périodique (Figure II.1) dont le numéro atomique (Z) varie de 57 (*lanthane* : *La*) à 71 (*lutécium* : *Lu*) (Maindron, 2012).

Avec les actinides, ils font partie du groupe des éléments du bloc *f* (Starck, 2010).

Ils ont des propriétés physicochimiques similaires, qui changent périodiquement avec le numéro atomique. L'yttrium (*Y*) et le scandium (*Sc*) sont souvent regroupés avec les lanthanides (*Ln* : *La* – *Lu* ; 57– 71) pour constituer les Terres Rares (en anglais, Rare Earth Elements ou R.E.E) (Pourtier, 2006).

Le tableau périodique des éléments est présenté avec les lanthanides et actinides insérés en dessous. Les lanthanides sont représentés par une rangée de 14 éléments (Ce à Lu) et les actinides par une rangée de 14 éléments (Th à Lr). Les éléments sont colorés par groupes : les métaux alcalins et alcalino-terreux sont en bleu, les métaux de transition sont en cyan, les métaux de transition du bloc d sont en vert, les halogènes sont en gris, et les gaz nobles sont en blanc.

H																	He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub							
		Lanthanides	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
		Actinides	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

Figure II.1 : Classification périodique des éléments.

Bien que les lanthanides soient qualifiés d'éléments de terres rares, ils ne sont pas rares dans la nature car leurs niveaux dans la croûte terrestre sous forme d'oxydes sont souvent égaux ou supérieurs à ceux de certains éléments physiologiquement significatifs. Comme l'iode, le cobalt et le sélénium. Le cérium (68 p.p.m.) et le lanthane (32 p.p.m.) sont les plus courants.

Le lutécium et le thulium sont les plus rares (environ 0,5 p. p. m.), tandis que les concentrations des autres éléments varient de 1 à 9 p. p. m. Le prométhium est un élément radioactif artificiel sans isotopes stables.

Ce sont des métaux d'argent chimiquement actifs dont la structure électronique est principalement trivalente (Palasz, and Czekaj, 2000).

II.3.2. La configuration électronique :

La configuration électronique de l'atome de lanthanide varie de $[Xe] 4f^0 5d^1 6s^2$, correspondant au lanthane $_{57}La$, à $[Xe] 4f^{14} 5d^1 6s^2$ (voir tableau 1), correspondant à la configuration électronique du lutécium $_{71}Lu$ par remplissage successif des sous-couches 4f (Starck, 2010).

Cette famille est subdivisée en deux catégories :

- Le groupe cérique, du lanthane $_{57}La$ au samarium $_{62}Sm$;
- Le groupe yttrique, du l'europium $_{63}Eu$ au lutécium $_{71}Lu$ (Weibel, 2005).

Tableau II.1 : Configurations électroniques des lanthanides (Weibel, 2005).

Numéro atomique Z	Lanthanide	Configuration électronique Ln
57	<i>La</i> : Lanthane	$[Xe] 5d^1 6s^2$
58	<i>Ce</i> : Cérium	$[Xe] 4f^1 5d^1 6s^2$
59	<i>Pr</i> : Praséodyme	$[Xe] 4f^3 6s^2$
60	<i>Nd</i> : Néodyme	$[Xe] 4f^4 6s^2$
61	<i>Pm</i> : Prométhéum	$[Xe] 4f^5 6s^2$
62	<i>Sm</i> : Samarium	$[Xe] 4f^6 6s^2$
63	<i>Eu</i> : Europium	$[Xe] 4f^7 6s^2$
64	<i>Gd</i> : Gadolinium	$[Xe] 4f^7 5d^1 6s^2$
65	<i>Tb</i> : Terbium	$[Xe] 4f^9 6s^2$
66	<i>Dy</i> : Dysprosium	$[Xe] 4f^{10} 6s^2$
67	<i>Ho</i> : Holmium	$[Xe] 4f^{11} 6s^2$
68	<i>Er</i> : Erbium	$[Xe] 4f^{12} 6s^2$
69	<i>Tm</i> : Thulium	$[Xe] 4f^{13} 6s^2$
70	<i>Yb</i> : Ytterbium	$[Xe] 4f^{14} 6s^2$
71	<i>Lu</i> : Lutécium	$[Xe] 4f^{14} 5d^1 6s^2$

Les éléments lanthanides ($Ln : La - Lu ; 57 - 71$) appartiennent à la série des terres rares (Sc, Y et Ln). Ils présentent des propriétés chimiques, optiques et magnétiques spécifiques

qui sont la conséquence de leur structure électronique particulière. Bien qu'utilisés en petites quantités (environ 120 000 tonnes d'oxydes de terres rares équivalents par an dans le monde), ils sont devenus essentiels à presque tous les aspects de la vie moderne, étant les noyaux actifs des catalyseurs pour le craquage du pétrole, des dispositifs d'éclairage, des aimants à haute coercivité utilisés dans les applications de motorisation (voitures électriques, éoliennes, disques durs) ou audio, des lasers et des télécommunications, des analyses et de l'imagerie biomédicales, ainsi que de l'agriculture. Ils sont classés comme matériaux stratégiques par l'armée et plusieurs gouvernements (Claude, and Bunzli, 2013).

Les ions lanthanides trivalents, en particulier La^{3+} (lanthanum ions) et Gd^{3+} (gadolinium) bloquent différents canaux calciques dans les cellules humaines et animales. Les lanthanides peuvent également affecter de nombreuses enzymes. Il est probable qu'ils affectent de manière significative et unique les voies biochimiques, modifiant Ainsi les processus physiologiques dans les tissus des humains et des animaux.

De nombreuses sources industrielles permettent aux lanthanides de pénétrer dans le corps humain et des études toxicologiques détaillées de ces métaux sont donc nécessaires (Palasz, and Czekaj, 2000).

II.3.3. Classification des Terres Rares :

- I. Les lanthanides sont divisés en deux sous-groupes, classés en fonction de leurs propriétés physiques et chimiques :

Le sous-groupe du cérium, qui rassemble le lanthane, le cérium, le praséodyme, le néodyme, le prométhéum et le samarium (éléments de numéro atomique $Z = 57$ à 63). Les Terres cérique ont un rayon ionique relativement large.

Le sous-groupe de l'yttrium, qui comprend l'euporium, le gadolinium, le terbium, le dysprosium, l'holmium, l'erbium, le thulium, l'ytterbium et le lutétium (éléments de numéro atomique allant de $Z = 64$ à 71). Les Terres yttriques possèdent un plus petit rayon ionique.

- II. D'autre part, Ils sont classés en fonction de leur masse et divisés en trois groupes :
 - 1) les Terres Rares Légères ou L.R.E.E. allant du lanthane au néodyme (LREE pour Light Rare Earth Elements).
 - 2) les Terres Rares Moyennes ou M.R.E.E. allant du samarium au gadolinium (MREE pour Moyennes Rare Earth Elements).

- 3) les Terres Rares Lourdes ou H.R.E.E. allant du dysprosium au lutétium (HREE pour Heavy Rare Earth Elements).

Cette classification est largement utilisée en géochimie (Pourtier, 2006).

II.3.4. Les Propriétés des terres rares :

Les éléments terrestres sont caractérisés par des propriétés physiques et chimiques constituent un groupe fascinant d'éléments dont les propriétés optiques découlent des électrons f internes qui commencent par un dans le cérium et se terminent par treize dans l'ytterbium. Les probabilités de transition au sein de l'orbitale f sont interdites par la règle de Laporte et deviennent partiellement autorisées soit par le mélange de l'orbitale f avec l'orbitale $5d$, soit par un transfert de charge des ligands voisins (Reisfeld, 2015).

Ils ont un aspect métallique neutre et leurs rayons atomiques sont assez similaires, sauf l'euporium et l'ytterbium que leur rayon atomique est plus grand en raison de leur faible densité. Ils ont des points de fusion modérés, c'est-à-dire qu'ils ont tendance à fondre à des températures comprises entre 799°C (Ce) et $1\ 663^{\circ}\text{C}$ (Lu).

Une autre propriété physique très importante de certaines terres rares telles que le néodyme et le samarium est leur force magnétique élevée, qui est utilisée dans la fabrication d'aimants permanents.

Du point de vue chimique :

Les terres rares sont chimiquement stables, ce qui signifie qu'elles ne réagissent pas facilement avec d'autres substances.

Sa résistance à la corrosion le rend utile dans les applications industrielles et technologiques exposées à des conditions difficiles (Charles, and Tuduri, 2021).

II.4. La méthode de moindre carré :

La méthode des moindres carrés, indépendamment élaborée par Gauss et Legendre, (1752–1833) en 1805 permet de comparer des données expérimentales, généralement entachées d'erreurs de mesure à un modèle mathématique censé décrire ces données (Nollet, 2006 ; George, 2016).

La méthode des moindres carrés ordinaires (MCO) consiste à minimiser la somme des carrés des écarts, écarts pondérés dans le cas multidimensionnel, entre chaque point du nuage de régression et son projeté, parallèlement à l'axe des ordonnées, sur la droite de régression. Il s'agit d'ajuster un nuage de points $\{Y_i, X_i\} i = 1, \dots, n$ selon une relation linéaire, prenant la forme de la relation matricielle $Y = X\beta + \epsilon$, où ϵ est un terme d'erreur (Sabaye, and Barre, 2021).

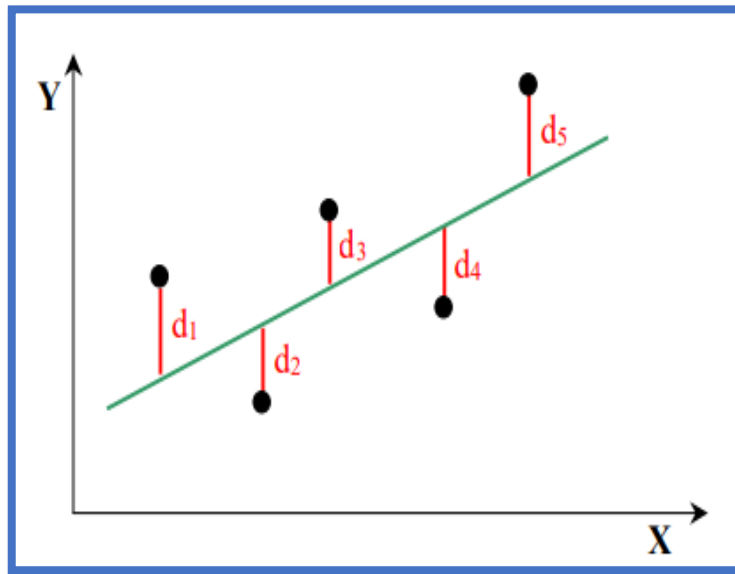


Figure II.2 : Droite de régression des moindres carrés $y = ax + b$ (Zidi, 2021).

C'est ce que montre la figure ci-dessus.

(d) Définie les carrés des écarte des pointes, à condition que La somme de $\sum d$ doit être petite

$$S = \sum d^2 = \text{minimum} \quad (\text{II.10})$$

Étant donné les données $\{(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)\}$, nous avons défini l'erreur associée à l'affirmation suivante $y = ax + b$ par

$$E(a, b) = \sum_{n=1}^N (y_n - (ax_n + b))^2. \quad (\text{II.11})$$

Notez que l'erreur est une fonction de deux variables, les paramètres inconnus a et b .

L'objectif est de trouver les valeurs de a et b qui minimisent l'erreur. En calcul à plusieurs variables, nous apprenons qu'il faut pour cela trouver les valeurs de (a, b) telles que

le gradient de E par rapport à nos variables (qui sont a et b) disparaît ; nous avons donc besoin de :

$$\nabla E = \left(\frac{\partial E}{\partial a}, \frac{\partial E}{\partial b} \right) = (0, 0), \quad (\text{II.12})$$

Où

$$\frac{\partial E}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial b} = 0. \quad (\text{II.13})$$

Notez que nous n'avons pas à nous préoccuper des points limites : lorsque $|a|$ et $|b|$ deviennent grands, l'ajustement devient de plus en plus mauvais. Nous n'avons donc pas besoin de vérifier la limite.

La différentiation de $E(a, b)$ donne :

$$\frac{\partial E}{\partial a} = \sum_{n=1}^N 2(y_n - (ax_n + b)) \cdot (-x_n), \quad (\text{II.14})$$

$$\frac{\partial E}{\partial b} = \sum_{n=1}^N 2(y_n - (ax_n + b)) \cdot (-1), \quad (\text{II.15})$$

En fixant $\partial E / \partial a = \partial E / \partial b = 0$ (et en divisant par -2), on obtient :

$$\sum_{n=1}^N (y_n - (ax_n + b)) \cdot x_n = 0, \quad (\text{II.16})$$

$$\sum_{n=1}^N (y_n - (ax_n + b)) = 0, \quad (\text{II.17})$$

Notez que nous pouvons diviser les deux côtés par -2 car il s'agit d'une constante ; nous ne pouvons pas diviser par x_i car cette valeur varie avec i .

Nous pouvons réécrire ces équations comme suit :

$$\left(\sum_{n=1}^N x_n^2 \right) a + \left(\sum_{n=1}^N x_n \right) b = \sum_{n=1}^N x_n y_n, \quad (\text{II.18})$$

$$\left(\sum_{n=1}^N x_n \right) a + \left(\sum_{n=1}^N 1 \right) b = \sum_{n=1}^N y_n, \quad (\text{II.19})$$

Nous avons obtenu que les valeurs de a et b qui minimisent l'erreur (définie dans (II.11)) satisfont à l'équation matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} \sum_{n=1}^N x_n^2 & \sum_{n=1}^N x_n \\ \sum_{n=1}^N x_n & \sum_{n=1}^N 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{n=1}^N x_n y_n \\ \sum_{n=1}^N y_n \end{pmatrix}, \quad (\text{II.20})$$

Nous avons besoin d'un fait d'algèbre linéaire. Rappelons que l'inverse d'une matrice A est une matrice B telle que $AB = BA = I$, où I est la matrice identité.

Si $A = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$ est une matrice 2×2 où $\det = \alpha\delta - \beta\gamma \neq 0$, alors A est inversible et

$$A^{-1} = \frac{1}{\alpha\delta - \beta\gamma} \begin{pmatrix} \delta & -\beta \\ -\gamma & \alpha \end{pmatrix} \quad (\text{II.21})$$

Nous pouvons montrer que la matrice dans (II.20) est inversible (tant qu'au moins deux des x_n ont différents), ce qui implique que :

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{n=1}^N x_n^2 & \sum_{n=1}^N x_n \\ \sum_{n=1}^N x_n & \sum_{n=1}^N 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum_{n=1}^N x_n y_n \\ \sum_{n=1}^N y_n \end{pmatrix} \quad (\text{II.22})$$

Notons la matrice de (II.20) par M . Le déterminant de M est :

$$\det M = \sum_{n=1}^N x_n^2 \cdot \sum_{n=1}^N 1 - \sum_{n=1}^N x_n \cdot \sum_{n=1}^N x_n. \quad (\text{II.23})$$

En tant que

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n, \quad (\text{II.24})$$

Nous trouvons que

$$\det M = N \sum_{n=1}^N x_n^2 - (N\bar{x})^2, \quad (\text{II.25})$$

$$= N^2 \left(\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n^2 - \bar{x}^2 \right), \quad (\text{II.26})$$

$$= N^2 \cdot \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (x_n - \bar{x})^2, \quad (\text{II.27})$$

Où la dernière égalité suit de l'algèbre simple. Ainsi, tant que tous les x_n ne sont pas égaux, $\det M$ sera non nul et M sera inversible. En utilisant la définition de la variance, nous remarquons que ce qui précède pourrait également être écrit sous la forme suivante :

$$\det M = N^2 \sigma_x^2, \quad (\text{II.28})$$

Nous obtenons ainsi que, tant que les x ne sont pas tous égaux, les valeurs de a et b les mieux ajustées sont obtenues en résolvant un système d'équations linéaires ; la solution est donnée dans (II.22).

Nous réécrivons (II.22) sous une forme plus simple. En utilisant l'inverse de la matrice et la définition de la moyenne et de la variance, nous trouvons

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{N^2 \sigma_x^2} \begin{pmatrix} N & -N\bar{x} \\ -N\bar{x} & \sum_{n=1}^N x_n^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum_{n=1}^N x_n y_n \\ \sum_{n=1}^N y_n \end{pmatrix}, \quad (\text{II.29})$$

L'expansion donne

$$a = \frac{N \sum_{n=1}^N x_n y_n - N\bar{x} \sum_{n=1}^N y_n}{N^2 \sigma_x^2} \quad (\text{II.30})$$

$$b = \frac{-N\bar{x} \sum_{n=1}^N x_n y_n + \sum_{n=1}^N x_n^2 \sum_{n=1}^N y_n}{N^2 \sigma_x^2} \quad (\text{II.31})$$

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_i \quad (\text{II.32})$$

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \quad (\text{II.33})$$

Les formules pour a et b étant très importantes.

Nous avons également, (Miller, 2006).

$$a = \frac{\sum_{n=1}^N 1 \sum_{n=1}^N x_n y_n - \sum_{n=1}^N x_n \sum_{n=1}^N y_n}{\sum_{n=1}^N 1 \sum_{n=1}^N x_n^2 - \sum_{n=1}^N x_n \sum_{n=1}^N x_n} \quad (\text{II.34})$$

$$b = \frac{\sum_{n=1}^N x_n \sum_{n=1}^N x_n y_n - \sum_{n=1}^N x_n^2 \sum_{n=1}^N y_n}{\sum_{n=1}^N x_n \sum_{n=1}^N x_n - \sum_{n=1}^N x_n^2 \sum_{n=1}^N 1} \quad (\text{II.35})$$

Approximation polynomiale de degré N :

Par général on peut déduire une formule matricielle pour l'interpolation des moindres carrés de degré N :

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^{2N} & \sum_{i=1}^n x_i^{2N-1} & \dots & \sum_{i=1}^n x_i^N \\ \sum_{i=1}^n x_i^{2N-1} & \sum_{i=1}^n x_i^{2N-2} & \dots & \sum_{i=1}^n x_i^{N-1} \\ \sum_{i=1}^n x_i^{2N-2} & \sum_{i=1}^n x_i^{2N-3} & \dots & \sum_{i=1}^n x_i^{N-2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sum_{i=1}^n x_i^N & \sum_{i=1}^n x_i^{N-1} & \dots & n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^N \cdot y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i^{N-1} \cdot y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n x_i^{N-N} \cdot y_i \end{bmatrix} \quad (\text{II.36})$$

II.5. Méthode de calcul :**II.5.1. Base de données :**

Dans le but de déterminer les paramètres nécessaires au calcul semi-empirique et empirique, nous avons défini et étudié les valeurs expérimentales du facteur de saut J_K pour les éléments de numéro atomique $57 \leq Z \leq 71$. La base de données utilisée dans ce travail se fonde sur la collection de Benattia, toutes ces valeurs sont obtenues par excitation des atomes par des photons (Benattia, 2023).

Dans le tableau II.2. nous présentons la base de données du facteur de saut J_{K-exp} pour les lanthanides obtenu par photon ionisation, les références dont ont été tirées les valeurs expérimentales sont également listées dans ce tableau, et on ajoute dans le même tableau les valeurs moyennes pondérées avec leurs incertitudes. Cette dernière est un calcul qui prend en compte les différents degrés pour la même quantité (dans ce cas c'est le facteur de saut (J_{K-exp})) le calcul de la valeur moyenne pondérée est donné par la relation suivantes :

$$J_{K-w} = \left(\sum_{i=1}^N (\Delta(J_K)_i)^{-2} \right)^{-1} \sum_{i=1}^N \left(\frac{(J_K)_i}{(\Delta(J_K)_i)^2} \right) \quad (\text{II.37})$$

$(J_K)_i$: est les valeurs expérimentales du facteur de saut.

$\Delta(J_K)_i$: représente l'incertitude des valeurs expérimentales.

N : est le nombre de données expérimentales.

L'incertitude $\Delta(J_K)_i$ associée est donnée par l'équation :

$$\Delta J_{K-w} = \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^N ((\Delta(J_K)_i)^{-2})}} \quad (\text{II.38})$$

Nous présentons le facteur $R = \frac{J_{K-exp}}{J_{K-w}}$ dans le même tableau.

Les valeurs expérimentales J_{K-exp} contenu dans le tableau pris brièvement de la mémoire de (Benattia, 2023). Ces données pourront être une source de données complémentaire des compilations.

Tableau II.2 : Valeurs expérimentales du facteur saut (J_K) éléments de numéro atomique $57 \leq Z \leq 71$ (lanthanides) (Benattia, 2023).

Z	J_{K-exp}	Références	J_{K-w}	$R = \frac{J_{K-exp}}{J_{K-w}}$
Z=57, La	0.786 ± 0.022	(Polat et al., 2005)	0.7961 ± 0.0193	0.98
	0.828 ± 0.048	(Akman et al., 2016)		1.04
	0.834 ± 0.073	(Turhan et al., 2018)		1.04
Z=58, Ce	0.840 ± 0.050	(Ertugrul et al., 2002)	0.8126 ± 0.0113	1.03
	0.835 ± 0.025	(Mallikarjuna et al., 2002)		1.02
	0.800 ± 0.016	(Polat et al., 2013)		0.98
	0.800 ± 0.047	(Akman et al., 2015)		0.98
	0.834 ± 0.092	(Akman et al., 2015)		1.01
	0.803 ± 0.042	(Akman et al., 2016b)		0.98
	0.824 ± 0.046	(Akman et al., 2016a)		1.01
0.833 ± 0.061	(Turhan et al., 2018)	1.02		
Z=59, Pr	0.833 ± 0.024	(Mallikarjuna et al., 2002)	0.8261 ± 0.0151	1
	0.825 ± 0.050	(Budak et al., 2003)		0.99
	0.821 ± 0.021	(Polat et al., 2013)		0.99
Z=60, Nd	0.810 ± 0.050	(Ertugrul et al., 2002)	0.8270 ± 0.0164	0.97
	0.831 ± 0.024	(Mallikarjuna et al., 2002)		1
	0.827 ± 0.025	(Polat et al., 2013)		1
Z=61, Pm	0.826 ± 0.050	(Budak et al., 2003)	0.826 ± 0.050	1
Z=62, Sm	0.813 ± 0.050	(Budak et al., 2003)	0.8202 ± 0.0135	0.99
	0.828 ± 0.024	(Mallikarjuna et al., 2002)		1
	0.816 ± 0.019	(Polat et al., 2013)		0.99
	0.822 ± 0.043	(Kaçal et al., 2015a)		1
Z=63, Eu	0.820 ± 0.050	(Budak et al., 2003)	0.8005 ± 0.0157	1.02
	0.794 ± 0.018	(Polat et al., 2013)		0.99
	0.821 ± 0.041	(Kaçal et al., 2015a)		1.02
Z=64, Gd	0.824 ± 0.024	(Mallikarjuna et al., 2002)	0.8035 ± 0.0104	1.02
	0.824 ± 0.050	(Budak et al., 2003)		1.02
	0.794 ± 0.019	(Budak et Polat, 2004)		0.98
	0.794 ± 0.019	(Polat et al., 2004)		0.98
	0.820 ± 0.041	(Kaçal et al., 2015a)		1.02
	0.812 ± 0.070	(Akman et al., 2015)		1.01
	0.826 ± 0.084	(Akman et al., 2015)		1.02
0.793 ± 0.041	(Akman et al., 2016b)	0.98		
Z=65, Tb	0.814 ± 0.050	(Budak et al., 2003)	0.7973 ± 0.0086	1.02
	0.837 ± 0.028	(Polat et al., 2004)		1.04
	0.817 ± 0.028	(Polat et al., 2013)		1.02
	0.790 ± 0.010	(Niranjana et Badiger, 2015)		0.99
	0.779 ± 0.045	(Akman et al., 2016b)		0.97
Z=66, Dy	0.821 ± 0.028	(Mallikarjuna et al., 2002)	0.8205 ± 0.0050	1
	0.813 ± 0.050	(Budak et al., 2003)		0.99
	0.765 ± 0.015	(Budak et Polat (2004)		0.93

	0.765 ± 0.015 0.839 ± 0.006 0.814 ± 0.034 0.790 ± 0.048	(Polat et al., 2004) (Hosur et al., 2011) (Kaçal et al., 2015a) (Akman et al., 2016b)		0.93 1.02 0.99 0.96
Z=67, Ho	0.819 ± 0.024 0.805 ± 0.050 0.823 ± 0.039 0.823 ± 0.039 0.785 ± 0.006 0.812 ± 0.040 0.778 ± 0.036	(Mallikarjuna et al., 2002) (Budak et al., 2003) (Budak et Polat (2004) (Polat et al., 2004) (Niranjana et Badiger (2015) (Kaçal et al., 2015a) (Akman et al., 2016b)	0.7889 ± 0.0055	1.03 1.02 1.04 1.04 0.99 1.02 0.98
Z=68, Er	0.818 ± 0.024 0.817 ± 0.050 0.752 ± 0.016 0.752 ± 0.016 0.808 ± 0.040 0.767 ± 0.035	(Mallikarjuna et al., 2002) (Budak et al., 2003) (Budak et Polat (2004) (Polat et al., 2004) (Kaçal et al., 2015a) (Akman et al., 2016b)	0.7685 ± 0.0094	1.06 1.06 0.97 0.97 1.05 0.99
Z=69, Tin	0.791 ± 0.016 0.805 ± 0.016	(Kaya et al., 2007) (Kaya et al., 2008)	0.7980 ± 0.0113	0.99 1
Z=70, Yb	0.796 ± 0.014 0.786 ± 0.014 0.820 ± 0.010	(Kaya et al., 2007) (Kaya et al., 2008) (Hosur et al., 2011)	0.8054 ± 0.0070	0.98 0.97 1.01
Z=71, Lu	0.803 ± 0.011 0.784 ± 0.011	(Kaya et al., 2007) (Kaya et al., 2008)	0.7935 ± 0.0078	1.01 0.98

II.5.2. Calcul empirique :

La méthode des moindres carrés adoptée dans le programme ORIGINE est l'une des méthodes les plus puissantes qui donne des résultats précis, que nous avons utilisés dans nos calculs, dans ce travail, nous nous appuyons sur la base de données de valeurs expérimentales pour les éléments lanthanides répertoriés dans le tableau II.2.

Ces valeurs sont tracées en fonction de Z, dans la figure II.3. et interpolées à l'aide de la formule suivante :

$$f(Z) = \sum_{i=0}^2 a_i Z^i \quad (\text{II.39})$$

Avec ; $i = 0, 1, 2$, les coefficients d'interpolation suivant l'équation (II.39) sont présentés dans le tableau II.3.

Tableau II.3 : Coefficients de l'interpolation.

I	$f(Z)$
	a_i
0	0.4704765998701
1	0.0130097572608
2	-0.0001198852237

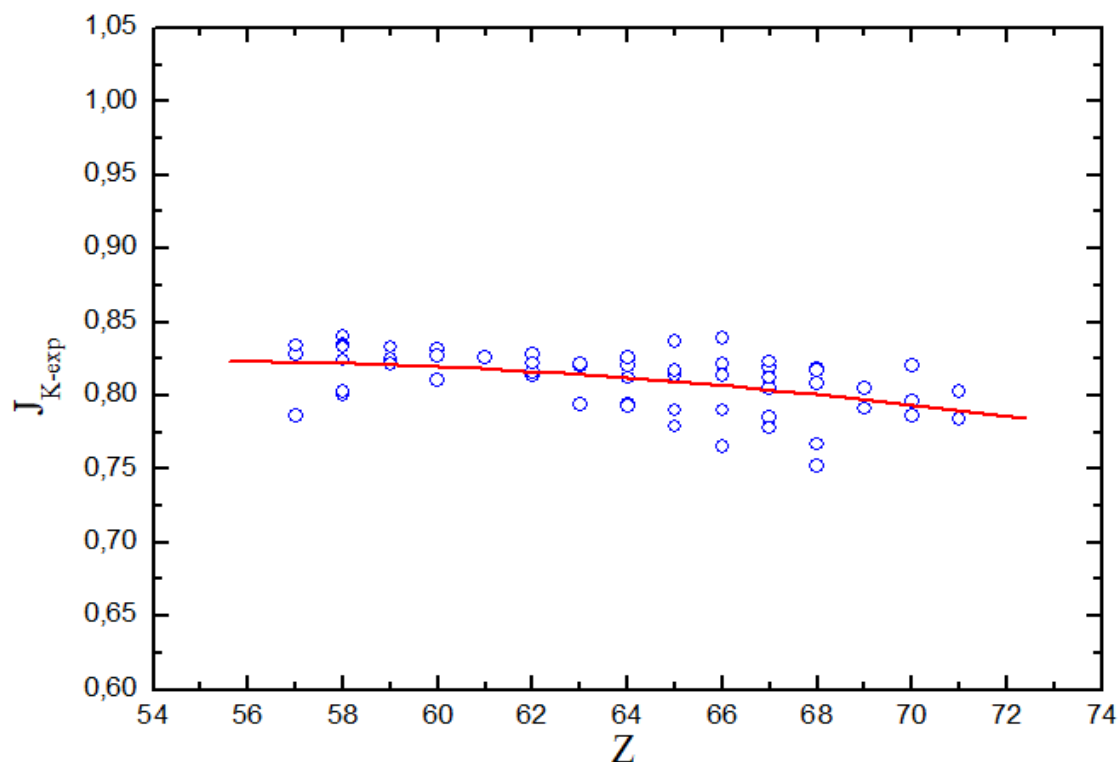


Figure II.3 : Les valeurs expérimentales du facteur de saut (J_{K-exp}) pour les lanthanides ($57 \leq Z \leq 71$) en fonction du numéro atomique Z , le trait plein, est représentée. La courbe de l'interpolation.

Dans la figure II.3. Nous avons présente toute les valeurs expérimentales du facteur de saut (J_{K-exp}) pour les éléments du lanthanide de numéro atomique ($57 \leq Z \leq 71$) en fonction du numéro atomique Z , où le trait plein, est représentée la courbe de l'interpolation.

Il ressort de cette figure que le facteur varie entre 0.752 jusqu'à 0.840 pour les valeurs expérimentales.

A l'aide de l'interpolation obtenue à partir de la formule, $f(Z)$, on a présenté les valeurs du facteur de saut empirique J_{K-emp} dans le tableau II.5.

II.5.3. Calcul semi-empirique :

Nous avons fait identifier dans cette étude les valeurs moyennes pondérées J_{K-W} et le facteur $R = \frac{J_{K-exp}}{J_{K-W}}$ comme suit :

Premièrement, les valeurs moyennes pondérées ont été calculées en appliquant les relations (II.37) et (II.38), et les résultats de ce calcul ont été enregistrés dans le tableau II.2.

Nous traduisons ces résultats sous la forme d'un graphique, comme le montre la figure II.4. Ensuite nous avons choisi un polynôme du troisième degré pour interpolation :

$$g(Z) = \sum_{i=0}^3 b_i Z^i \quad (\text{II.40})$$

La Figure II.4 montre la variation des valeurs moyennes pondérées recommandées J_{K-W} , en fonction du nombre atomique Z avec ($57 \leq Z \leq 71$).

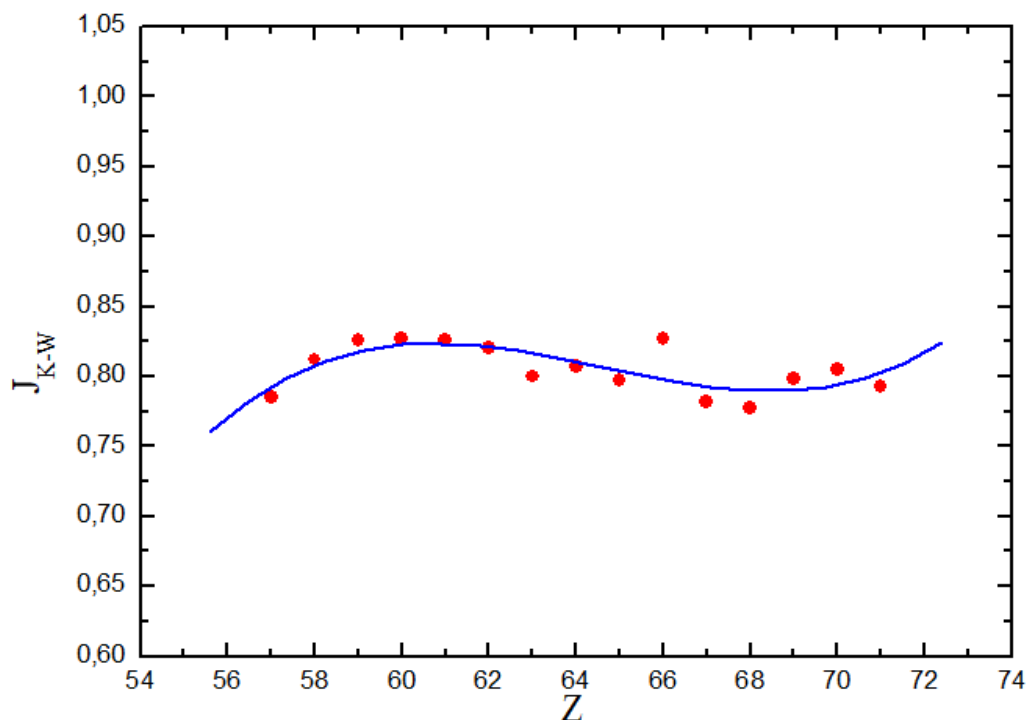


Figure II.4 : La variation des valeurs moyennes pondérées recommandées J_{K-W} pour les lanthanides ($57 \leq Z \leq 71$) en fonction du nombre atomique Z .

Pour l'étape suivante, nous avons tracé le facteur $R = \frac{J_{K-exp}}{J_{K-W}}$ en fonction de numéro atomique Z .

En ce qui concerne le facteur $R = \frac{J_{K-exp}}{J_{K-W}}$ nous avons utilisé l'approximation polynomiale de degré 2 :

$$h(Z) = \sum_{i=0}^2 c_i Z^i \quad (\text{II.41})$$

Figure II.5 montre la distribution des résultats de le facteur $R = \frac{J_{K-exp}}{J_{K-W}}$ pour toutes les valeurs expérimentales des éléments de lanthanides ($57 \leq Z \leq 71$), en fonction de numéro atomique Z . Selon la distribution des valeurs expérimentales, généralement pour la plupart de ces valeurs, le facteur R varie entre 0.93 et 1.06 comme on peut le voir sur la même figure.

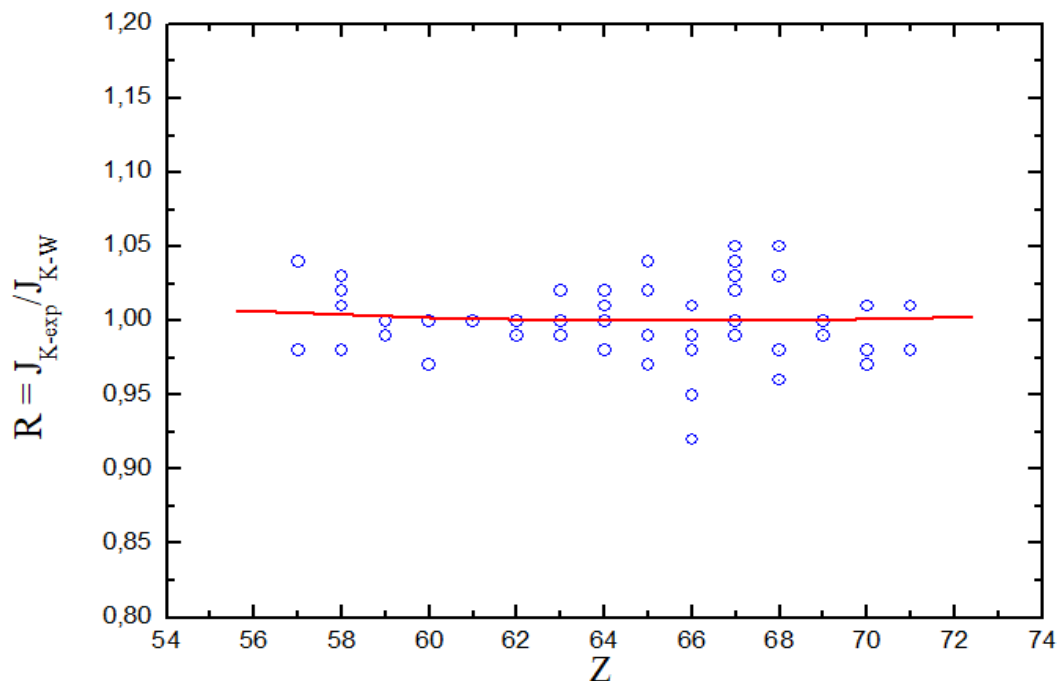


Figure II.5 : La distribution des résultats de le facteur $R = \frac{J_{K-exp}}{J_{K-W}}$ en fonction de numéro atomique Z pour les lanthanides ($57 \leq Z \leq 71$).

Finalement, nous concluons que les valeurs semi-empirique du le facteur de saut $J_{K-s-emp}$ D'après l'équation suivante :

$$J_{K-s-emp} = g(Z) \times h(Z) \quad (\text{II.42})$$

Le tableau II.4 résume les coefficients de l'interpolation des deux formules $g(Z)$ et $h(Z)$.

Tableau II.4 : Les Coefficients de l'interpolation des deux formules $g(Z)$ et $h(Z)$.

I	$g(Z)$	$h(Z)$
	b_i	c_i
0	-37.9505606981253	1.2833118318691
1	1.8131321913381	-0.0085969840716
2	-0.0281702488688	0.0000651646821
3	0.000145361991	-

II.6. Discussion et comparaison des résultats :

Après avoir calculé les valeurs empiriques et semi-empiriques du facteur de saut J_K pour tous les éléments dans la région $57 \leq Z \leq 71$ et les mètres dans le tableau II.5 avec des valeurs théoriques et empiriques des autres auteurs (Berger *et al.*, 1990), (Broll, 1986) et (Budak *et al.*, 2003) respectivement. Pour mieux comparer nos résultats semi-empiriques $J_{K-s-emp}$ et empiriques J_{K-emp} du facteur de saut avec ceux théoriques et empiriques des autres auteurs, nous avons présenté ces valeurs en fonction de Z dans la Figure II.6.

Tableau II.5 : Présent calcul des valeurs empiriques et semi-empiriques pour les cibles de ^{57}La à ^{71}Lu comparé aux valeurs théoriques de (Berger *et al.*, 1990) Et empiriques de (Broll., 1986) et (Budak *et al.*, 2003).

Z-élément	This work		Other Works		
	J_{K-emp}	$J_{K-s-emp}$	Theo.	Emp.	
			(Berger <i>et al.</i> , 1990)	(Broll, 1986)	(Budak <i>et al.</i> , 2003)
Z=57, La	0.8225	0.7968	-	0.828	0.828
Z=58, Ce	0.8217	0.8114	0.830	0.835	-
Z=59, Pr	0.8207	0.8203	0.816	0.830	0.824
Z=60, Nd	0.8195	0.8244	0.833	0.828	-
Z=61, Pm	0.8180	0.8245	0.820	0.833	0.821
Z=62, Sm	0.8162	0.8217	0.814	0.831	0.819
Z=63, Eu	0.8143	0.8167	0.813	0.827	0.817
Z=64, Gd	0.8121	0.8103	0.816	0.824	0.815
Z=65, Tb	0.8096	0.8036	0.813	0.827	0.814
Z=66, Dy	0.8069	0.7974	0.813	0.819	0.812
Z=67, Ho	0.8040	0.7924	0.803	0.818	0.810
Z=68, Er	0.8008	0.7897	0.812	0.812	0.809
Z=69, Tm	0.7974	0.7900	0.813	0.818	-
Z=70, Yb	0.7937	0.7943	0.811	0.813	-
Z=71, Lu	0.7898	0.8034	0.809	0.807	-

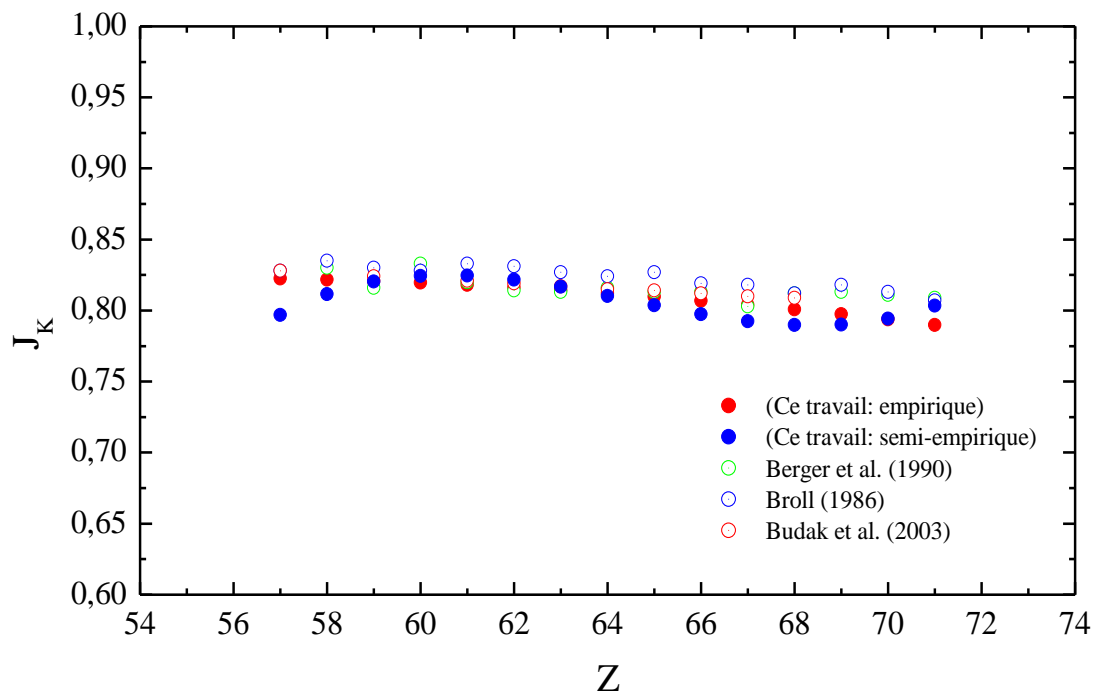


Figure II.6 : Présent résultats des valeurs semi-empiriques $J_{K-s-emp}$ et empiriques J_{K-emp} du facteur de saut et ceux théoriques et empiriques des autres auteurs en fonction du numéro atomique Z .

En général, on observe que nos valeurs semi-empiriques $J_{K-s-emp}$ du le facteur de saut sont en bon accord avec les valeurs théoriques et empiriques d'autres auteurs pour tous les éléments dans la région $57 \leq Z \leq 71$.

Où on observe que les valeurs de (Berger *et al.*, 1990) et (Budak *et al.*, 2003) sont les plus compatibles avec nos calculs avec une déviation qui varie de 0.45 % et 2.91 % pour (Berger *et al.*, 1990) et 0.04 % et 3.92 % pour (Budak *et al.*, 2003). On observe la même remarque pour valeurs de (Broll, 1986), où l'écart varie entre (0.44% et 3.92%).

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

$$RD (\%) = |(J_{K-exp} - J_{K-emp})/J_{K-emp}| \times 100. \quad (II.43)$$

On observe aussi, en générale, les résultats semi-empiriques et théoriques varient avec l'augmentation du numéro atomique Z .

Concernant les valeurs empiriques, on observe que ces valeurs sont en bon accord avec les valeurs de (Berger *et al.*, 1990), (Budak *et al.*, 2003) et (Broll, 1986). L'écart varie entre 0.12% et 2.43% pour les valeurs de (Berger *et al.*, 1990), 0.67% et 2.58% pour (Budak *et al.*, 2003), et 0.33% et 1.02% pour (Broll, 1986).

Tableau II.6 : Les calculs de différence relative pour les valeurs empiriques J_{K-emp} et semi-empiriques $J_{K-s-emp}$ du facteur de saut des autres auteurs.

J_{K-emp} - Berger	$J_{K-s-emp}$ - Berger	J_{K-emp} - Broll	$J_{K-s-emp}$ - Broll	J_{K-emp} - Budak	$J_{K-s-emp}$ - Budak
-	-	0,67	3,92	0,67	3,92
1,01	2,29	1,62	2,91	-	-
0,57	0,52	1,13	1,18	0,40	0,45
1,65	1,04	1,04	0,44	-	-
0,24	0,55	1,83	1,03	0,37	0,42
0,27	0,94	1,81	1,13	0,34	0,33
0,16	0,45	1,56	1,26	0,33	0,04
0,48	0,70	1,47	1,69	0,36	0,58
0,42	1,17	2,15	2,91	0,54	1,29
0,76	1,96	1,50	2,71	0,63	1,83
0,12	1,34	1,74	3,23	0,75	2,22
1,40	2,82	1,40	2,82	1,02	2,44
1,96	2,91	2,58	3,54	-	-
2,18	2,10	2,43	2,35	-	-
2,43	0,70	2,18	0,45	-	-

Références Bibliographiques

Akman, F., Durak, R., Kaçal, M.R., Turhan, M.F., Akdemir, F., 2015. Determination of K -shell absorption jump factors and jump ratios for La_2O_3 , Ce and Gd using two different methods, *Radiation Physics and Chemistry* 107; 75–81.

Akman, F., Kaçal, M.R., Durak, R., 2016b. The excitation probabilities of $K\alpha$, β and $L\alpha_1$, 2 for some elements in $56 \leq Z \leq 68$ at 59.54 keV, *Radiation Physics and Chemistry* 119; 29–36.

Akman, F., Kaçalb, M.R., et Durakc, R., 2016a. Chemical effect on the K shell absorption parameters of some selected cerium compounds, *Journal of Instrumentation*, 11(8), P08006–P08006.

Bennal, A.S., and Badiger, N.M., 2007. Measurement of K shell absorption and fluorescence parameters for the elements Mo , Ag , Cd , In and Sn using a weak gamma source, *Journal of physics b: atomic, molecular and optical physics*.

Berger, M.J., Hubbell, J.H., Seltzer, J., Seltzer, S.M., Coursey, J.S., Sukumar, R., et Zucker, D.S., 1990. XCOM : base de données de sections efficaces de photons. Disponible en ligne sur : <http://www.nist.gov/pml/data/xcom/index.cfm>.

Broll, N., 1986. Quantitative X-Ray Fluorescence Analysis. Theory and Practice of The Fundamental Coefficient Method, *X-RAY Spectrometry*, VOL. 15, 271-285.

Budak, G., Karabulut, A., Ertuğrul, M., 2003. Determination of K -shell absorption jump factor for some element using EDXRF technique, *Radiat. Meas.* 37; 103–107.

Budaka, G., Polatbn, R., 2004. Measurement of the K X-ray absorption jump factors and jump ratios of Gd , Dy , Ho and Er by attenuation of a Compton peak, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* 88; 525–532.

Charles, N., Tuduri, J., 2021. Gaétan Lefebvre, Olivier Pourret, Fabrice Gaillard, Kathryn Goodenough, Ressources en terres rares de l'Europe et du Groenland : un potentiel minier remarquable mais tabou, ISTE Science Publishing Ltd.

Claude, J., Bunzli G., 2013. Lanthanides, publisher: Wiley black well.

Ertugrul, M., Karabulut, A., Budak, G., 2002. Measurement of the K shell absorption jump factor of some elements, *Radiat. Phys. Chem.* 64 1–3, [https://doi.org/10.1016/S0969-806X\(01\)00448-0](https://doi.org/10.1016/S0969-806X(01)00448-0).

George., 2016. Algorithmes de calcul de positions GNSS bases sur les méthodes des moindres carrés es avancées, thèse, l'Université de Technologie de Belfort-Montbéliard.

Hosur, S.B., Naika, L.R., and Badiger, N.M., 2001. Study of the K shell photoelectric parameters of Dy , Yb and W atoms using low energy bremsstrahlung radiation, *Eur. Phys. J. D* 62, 155–161.

Kacal, M.R., Han, I., and Akman, F., 2014. Determination of K shell absorption jump factors and jump ratios of 3D transition metals by measuring K shell fluorescence parameters, *Applied Radiation and Isotopes*.

Kacal, M.R., Han, I., and Akman, F., 2015a. Measurements of *K* shell absorption jump factors and jump ratios using EDXRF technique, *The European physical journal D* 69 (103) 1–7.

Kaya, N., Tirasog˘lu, E., Apaydın, G., 2008. Determination of *K* shell absorption jump factors and jump ratios in the elements between *Tm* ($Z = 69$) and *Os* ($Z = 76$) by measuring *K* shell fluorescence parameters, *Nucl. Instr. and Meth. In Phys. Res. B* 266; 1043–1048.

Kaya, N., Tirasog˘lu, E., Apaydın, G., Aylıkçı, V., Cengiz, E., 2007. *K*-shell absorption jump factors and jump ratios in elements between *Tm* ($Z = 69$) and *Os* ($Z = 76$) derived from new mass attenuation coefficient measurements, / *Nucl. Instr. and Meth. In Phys. Res. B* 262; 16–23.

Maindron, N., 2012. Synthèse de sondes lanthanidiques luminescentes : applications au marquage covalent et à la détection de biomolécules, Thèse de doctorat, l'université de Rouen, Frans.

Mallikarjuna, M. L., Appaji Gowda, S.P., Gowda, R., Umesh, T.K., 2002. Studies on photon interaction around the *K*-edge of some rare-earth elements, *Radiat. Phys. Chem.* 65, 217–223.

Miller, J., S., 2006. *The Method of Least Squares*, Williamstown; MA 01267.

Mirji, S., Bennal, A.S., Badiger, N.M., Tiwari, M.K., Lodha, G.S., 2015. Chemical sensitivity of *K – L* vacancy transfer probability in compounds of 3D atoms using synchrotron radiation, *Chemical Physics Letters*, India.

Niranjana, K. M., Badiger, N.M., 2015. *K* Shell parameters of some lanthanide elements using bremsstrahlung, *Radiation Physics and Chemistry* 107; 59–64.

Nollet, F., 2006. Lois de commande par modes glissants du moteur pas à pas, Thèse, l'Université des Sciences et Technologies de Lille, Français.

Palasz, A., and Czekaj, P., 2000. Toxicological and cytophysiological aspects of lanthanides action, *Acta Biochimica Polonica*; 47(4):1107-14.

Polat, R., Budak, G., Gürol, A., Karabulut, A., Ertuğrul, M., 2005. *K*-shell absorption jump factors for the elements *Ag*, *Cs*, *Ba* and *La* derived from new mass attenuation coefficient measurement using EDXRF technique, *Radiation Measurements* 39; 409 – 415.

Polat, R., İçelli, O., Budak, G., 2004. New method to measure the *K*-shell absorption jump factor in some rare-earth elements, *Anal. Chim. Acta* 505, 307–314.

Polat, R., İçelli, O., Yalçın, Z., Pesen, E., Orak, S., 2013. Measurement of *K*-shell absorption jump factors and jump ratios in some lanthanide elements using EDXRF technique, *Ann. Nucl. Energy* 54, 267–273.

Pourtier, E., 2006. Les lanthanides dans les fluides géologiques : étude expérimentale des propriétés thermodynamiques standard et des solubilités, Thèse, Université Blaise Pascal, Frans.

Reisfeld, R., 2015. Optical Properties of Lanthanides in Condensed Phase, Theory and Applications, AIMS Materials Science.

Sabaye, F., J., Barre, N., 2021. Moindres Carrés Ordinaires et alternatives, Boussengui François.

Starck, M., 2010. Synthèse, propriétés photo physiques et marquage biologique par des complexes de lanthanides luminescents, Thèse de doctorat, l'université de Strasbourg.

Turhan, M. F., Durak, R., Akman, F.A., Kaçal, M.R., Araz, A., 2018. Determination of some selected absorption parameters for *Cd*, *La* and *Ce* elements, Radiation Physics and Chemistry, S0969-806X(17); 31314-2.

Weibel, N., 2005. Marqueurs Luminescents à Base d'Ions Lanthanides : Synthèse, Propriétés et Marquage de Protéines, Thèse, l'Université Louis Pasteur - Strasbourg I.

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

Conclusion générale

Conclusion Générale

Dans le travail de recherche accompli dans le cadre de ce mémoire de master, Nous avons présenté les résultats des calculs empirique et semi-empirique du rapport de saut J_K dans le cas des lanthanides $57 \leq Z \leq 71$. La connaissance de ce paramètre est essentiel dans l'étude des transitions électroniques entre deux niveaux d'énergie. Ce travail peut être divisé en deux parties.

Dans la première partie, nous avons calculé les valeurs empirique du rapport de saut J_K à partir de la base de données expérimentale du rapport de saut J_K , en utilisant des simples fonctions analytiques, et des courbes en fonction de numéro atomique Z .

Et pour la deuxième partie, nous avons calculé les valeurs semi-empirique du rapport de saut J_K , 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 bon accord avec ceux d'autres groupes de recherche.

Résumé

Le travail que nous rapportons ici est dans le but de présenter une étude des résultats expérimentaux du rapport de saut d'absorption J_K de la couche K , et la déduction des valeurs empiriques et semi-empiriques dans le cas des lanthanides ($57 \leq Z \leq 71$). Dans la première partie, nous nous sommes intéressés de calculé les valeurs empirique du rapport de saut J_K , dans la seconde partie, nous avons calculé les valeurs semi-empiriques du rapport de saut J_K , en utilisant des simples fonctions analytiques, et des courbes en fonction de numéro atomique Z . 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 : Le rapport de saut d'absorption J_K de la couche K , Lanthanides, Valeurs moyennes pondérées, Calcul empirique et semi-empirique.

Abstract

The work we report here is with the aim of presenting a study of the experimental results of the K-shell absorption jump factor J_K , and the deduction of empirical and semi-empirical values in the case of lanthanides ($57 \leq Z \leq 71$). In the first part, we are interested in the calculation of the empirical values of the jump ratio J_K , in the second part, we calculated the semi-empirical values of the jump ratio J_K , using simple analytical functions, and curves as a function of atomic number Z . We then compared the values obtained with the empirical and theoretical values of other authors, and the results are in very good agreement with them.

Keywords: K-shell absorption jump factor J_K , Weighted average values, Lanthanides, Empirical and semi-empirical calculation.

المخلص

يهدف العمل الذي نقدمه هنا إلى تقديم دراسة للنتائج التجريبية لنسبة القفز الامتصاصية J_K للطبقة K ، واستنتاج القيم التجريبية وشبه التجريبية في حالة اللانثانيدات ($57 \leq Z \leq 71$)، في الجزء الأول، نحن مهتمون بحساب القيم التجريبية لنسبة القفز J_K ، وفي الجزء الثاني، قمنا بحساب القيم شبه التجريبية لنسبة القفز J_K ، باستخدام دوال تحليلية بسيطة، ومنحنيات كدالة للعدد الذري Z . ثم قارنا بعد ذلك القيم التي حصلنا عليها مع القيم التجريبية والنظرية لمؤلفين آخرين، وكانت النتائج متوافقة معها بشكل جيد للغاية.

كلمات مفتاحية: نسبة امتصاص القفز J_K من طبقة K ، قيم المتوسطة الموزونة، اللانثانيدات، الحساب التجريبي وشبه التجريبي.