



Thèse

Présentée pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT LMD

Filière : Physique

Option : Rayonnement et Matière

THEME

Emission Auger et émission Coster-Kronig des couches atomiques internes en vue d'application analytique

Présenté Par
Meddah Samia

Soutenue le : 21/05/2026

Devant le jury composé de :

Président	Khelladi Mohamed Redha	Professeur	(U. Bordj Bou-Arreridj)
Rapporteur	Kahoul Abdelhalim	Professeur	(U. Bordj Bou-Arreridj)
Co-encadreur	Daoudi Salim	Professeur	(U. Bordj Bou-Arreridj)
Examineur	Imakhlaf Anis	MCA	(U. Bordj Bou-Arreridj)
Examineur	Rekab Djabri Hamza	Professeur	(U. Bouira)
Examineur	Lebga Noudjoud	MCA	(U. Sétif 1)

Année Universitaire : 2025/2026

Remerciements

Avant tout, j'exprime ma profonde gratitude envers Dieu Tout-Puissant.

Je tiens à remercier mon directeur de thèse, Pr. **Abdelhalim Kahoul**, pour sa patience infinie, sa disponibilité constante et son soutien indéfectible. Il a été à mes côtés tout au long de l'élaboration de cette thèse, m'apportant un encouragement constant. Sa précieuse aide à chaque étape du travail me touche profondément. Un grand merci également à Pr. **Daoudi Salim** pour ses précieux conseils, ses orientations judicieuses et son soutien tout au long de la recherche. Je suis profondément reconnaissante envers Messieurs **Fernando Parente**, **José Pires Marques** et **Jorge Miguel Sampaio**, dont les contributions ont considérablement enrichi ce travail. Je tiens aussi à remercier chaleureusement Monsieur **Stephen Croft** et Monsieur **Andrea Favalli** pour leur soutien constant et leurs conseils précieux, notamment dans la rédaction de mes travaux. Un remerciement particulier va au président de mon jury, Pr. **Khalladi Mohamed Redha**, pour avoir accepté de présider ma commission avec bienveillance. Je suis aussi reconnaissante envers Messieurs **Imakhlaf Anis**, **Rekab Djabri Hamza** et Madame **Lebga Noudjoud**, qui ont l'honneur d'être les rapporteurs de ma thèse. J'espère avoir présenté ce travail de manière satisfaisante. Je tiens à exprimer toute ma gratitude envers mon mari bien-aimé, **Abdelrahman**, pour son soutien sans faille, sa patience et sa bienveillance tout au long de ce parcours. Il a été un pilier fondamental dans ce travail. Je n'oublie pas non plus mon fils, **Luqman**, qui m'a soutenue et accompagnée à chaque étape de cette thèse. Merci à vous deux du fond du cœur. Un grand merci à mes amies chères : **Leila**, **Sarah**, **Amina**, **Imane** et **Assala**, pour leur soutien précieux et constant.

Leur présence a été d'une grande aide pour moi.

Enfin, mes remerciements les plus sincères vont à mes parents, les personnes les plus chères de ma vie. Leur soutien inconditionnel, leur amour et leur encouragement ont été essentiels dans les moments les plus difficiles. Leur rôle dans l'accomplissement de cette thèse est inestimable et je leur dois tout. Je remercie également toutes les personnes qui ont contribué, de près ou de loin, à la réalisation de ce travail, et je leur adresse ma profonde reconnaissance.

Table des matières

Introduction Générale	1
1. Rappel sur l'interaction rayonnement-matière	4
1.1 Généralité sur les rayons X	5
1.2 Interaction rayonnement matière	6
1.2.1 Mécanismes d'interaction	7
a. Effet photoélectrique	7
b. Effet Compton	9
c. Effet de création de paires	10
d. Diffusion de Thomson-Rayleigh	12
1.2.2 Combinaison des trois effets	12
1.2.3 Loi d'atténuation et sections efficaces atomiques	13
1.3 Relaxations atomiques	14
1.4 Notation de Siegbahn	15
1.5 Processus radiatif	16
1.5.1 Principes de la fluorescence X	16
1.5.2 Rendements de fluorescence	18
1.6 Processus non radiatif	18
1.6.1 Transition Auger	18
1.6.2 Transition Coster-Kronig	20
1.7 Le rendement de fluorescence en absence et en présence de transitions de Coster-Kronig	21
1.8 Relation entre rendement de fluorescence transition Coster-Kronig et Auger pour la couche L	23
1.9 Section efficace de production des rayons X de la couche L	24
1.10 Référence	26
2. Bases de données des probabilités de transitions de Coster-Kronig et Auger	27
2.1 État de l'art	28
2.2 Aperçu des travaux expérimentaux	29
2.2.1 Analyse des données	30
2.3 Références	56

3. Calcul empirique et relativiste des transitions de Coster Kronig et Auger.....	61
3.1. Calcul empirique	62
3.1.1 Procédure de calcul des transitions empiriques de Coster-Kronig	62
3.2.1 Procédure de calcul des transitions empiriques de transition Auger.....	66
3.2 Calcul relativiste.....	70
3.2.1 Méthodes de calcul atomique.....	70
3.2.2 Méthodes Hartree et Hartree-Fock - notions de base.....	70
3.2.3 Méthode de multi-configuration de Dirac-Fock.....	72
3.2.4 Hamiltonien de Dirac-Coulomb-Breit.....	75
3.2.5 Corrections de l'électrodynamique quantique (QED)....	78
a. Polarisation du vide.....	79
b. Energie propre.....	80
3.2.6 Relaxation atomique	81
a. Transitions radiatives.....	82
b. Transitions non radiatives.....	83
3.2.7 Paramètres atomiques fondamentaux.....	85
3.3 Références.....	89
4. Résultats et discussion	91
4.1 Objectifs et contribution du travail.....	92
4.2 Résultats et discussion.....	93
4.2.1 Transitions de Coster-Kronig	93
4.2.2 Transitions Auger	105
4.3 Références.....	112
Conclusion	113
Annexes	116

Liste des figures

1-1. Processus de production de rayons X de base (Zink, 1997)	6
1-2. Schéma de l'effet photoélectrique [6].....	8
1-3. Schéma de l'effet Compton [6].....	10
1-4. Représentation schématique du phénomène de création des paires et triplets suivi de l'annihilation[9].....	11
1-5. diffusion de Rayleigh[10].....	12
1-6. Les effets photoélectrique, Compton et de production de paires (matérialisation) dépendent du numéro atomique Z du milieu et de l'énergie du photon.....	13
1-7. Illustration du phénomène d'atténuation des photons dans la matière [12].....	14
1-8. Niveaux d'énergie et quelque transition électronique permise.....	16
1-9. (a) Schéma du phénomène d'émission des rayons X (b) Création de vacance dans la couche interne par les rayons X ou les particules chargées (c) Processus d'émission des électrons Auger comprenant la désexcitation et l'émission d'électron d'une couche supérieure (d) Processus d'émission des rayons X.....	17
1-10. Radiative decay (X-ray fluorescence).....	19
1-11. Non-radiative (processus d'Auge).....	20
1-12. Schéma illustratif des transitions non-radiatives suivantes : (a) Auger, (b) Coster–Kronig, et (c) Super Coster–Kronig [36].....	21
1-13. Rendements de la couche K et rendements Auger en fonction du numéro atomique.....	24
2-1. Distribution du nombre de valeurs expérimentales de f_{12} , f_{23} , f_{13} , F_{123} , et F_1 en fonction du numéro atomique Z.....	34
2-2. Distribution du nombre de valeurs expérimentales de a_1 , a_2 , et a_3 en fonction du numéro atomique Z.....	36
2-3. Histogramme des données pour les valeurs expérimentales de f_{12} , f_{23} , f_{13} , F_{123} et F_1 telles que compilées dans ce travail.....	38
2- 4. Histogramme des données pour les valeurs expérimentales de a_1 , a_2 , et a_3 telles que compilées dans ce travail.....	40
2-5. La distribution de $S_{12} = \frac{(f_{12})_{Exp}}{(f_{12})_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1955 à 2024).	41

2-6. La distribution de $S_{23} = \frac{(f_{23})_{Exp}}{(f_{23})_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1978 à 2023).	42
2-7. La distribution de $S_{13} = \frac{(f_{13})_{Exp}}{(f_{13})_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1955 à 2024).	42
2- 8. La distribution de $R_{123} = \frac{(F_{123})_{Exp}}{(F_{123})_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1955 à 2023).	43
2-9. La distribution de $R_1 = \frac{(F_1)_{Exp}}{(F_1)_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1955 à 2024).	43
2-10. La distribution de $T_1 = \frac{(a_1)_{Exp}}{(a_1)_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1958 à 2024).	44
2-11. La distribution de $T_2 = \frac{(a_2)_{Exp}}{(a_2)_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1955 à 2024).	45
2-12. La distribution de $T_3 = \frac{(a_3)_{Exp}}{(a_3)_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1955 à 2024).	45
2-13. Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour f_{12} en fonction du numéro atomique Z...	47
2-14. Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour f_{23} en fonction du numéro atomique Z...	47
2-15. Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour f_{13} en fonction du numéro atomique Z...	48
2-16. Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour F_{123} en fonction du numéro atomique Z.	48
2-17. Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour F_1 en fonction du numéro atomique Z.....	49
2-18. Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour a_1 en fonction du numéro atomique Z.....	49
2-19. Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour a_2 en fonction du numéro atomique Z....	50
2-20. Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour a_3 en fonction du numéro atomique Z.....	50
2-21. Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour f_{12} en fonction du numéro atomique Z....	52
2-22. Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour f_{23} en fonction du numéro atomique Z....	52
2-23. Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour f_{13} en fonction du numéro atomique Z...	53
2-24. Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour F_{123} en fonction du numéro atomique Z.	53
2-25. Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour F_1 en fonction du numéro atomique Z.....	54
2-26. Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour a_1 en fonction du numéro atomique Z.....	54
2-27. Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour a_2 en fonction du numéro atomique Z.....	55
2-28. Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour a_3 en fonction du numéro atomique Z.....	55

3-1. Distribution des valeurs expérimentales (a): $(f_{12})_{\text{exp}}$, (b): $(f_{23})_{\text{exp}}$, (c): $(f_{13})_{\text{exp}}$, (d): $(F_{123})_{\text{exp}}$, et (e): $(F_1)_{\text{exp}}$ en fonction du numéro atomique Z. La courbe est l'interpolation, selon l'équation (3-1).....	64
3- 2. Distribution des valeurs expérimentales $a_{1\text{-exp}}$ en fonction du numéro atomique Z. La courbe correspond à l'interpolation selon l'équation (3-3).....	66
3-3. Distribution des valeurs expérimentales $a_{2\text{-exp}}$ en fonction du numéro atomique Z. La courbe correspond à l'interpolation selon l'équation (3-3).....	67
3-4. Distribution des valeurs expérimentales $a_{3\text{-exp}}$ en fonction du numéro atomique Z. La courbe correspond à l'interpolation selon l'équation (3-3).	68
3.5. Diagramme de Feynman du premier ordre pour la contribution d'une paire électron-positron à une boucle à la polarisation du vide en QED [26-14]. Une paire électron-positron virtuelle est créée dans le champ nucléaire, le photon virtuel étant absorbé par les électrons.....	79
3.6. Diagramme de Feynman pour l'énergie propre à une boucle dans la QED [14]. Une particule avec un moment $4p$ émet un photon virtuel avec un moment $4q$ qui est ensuite réabsorbé.....	80
3.7. Représentation d'une transition radiative [26,14]. Dans un état initial (à gauche), l'atome présente une lacune interne, tandis que dans l'état final (à droite), la lacune est comblée par un électron de la couche supérieure et un photon est émis. Dans cet état final, on constate que la lacune s'est déplacée vers une couche supérieure.....	82
3.8. Représentation d'une transition non radiative (Auger) [26-14]. Dans un état initial (à gauche), l'atome présente une lacune interne, tandis que dans l'état final (à droite), la lacune est comblée par un électron, accompagné de l'émission d'un électron de la couche externe (électron Auger), laissant l'atome dans un état final avec deux lacunes.....	84
3-9. Transitions possibles d'un niveau initial i vers des niveaux finaux f [26-14]. Dans ce schéma, il existe trois canaux de désintégration différents pour le niveau initial i , chacun ayant sa propre probabilité (w_{i1} , w_{i2} et w_{i3}).....	85
4-1. Comparaison des valeurs empiriques et théoriques actuelles de Coster Kronig avec les valeurs théoriques et expérimentales pour f_{12} , f_{23} , f_{13} , F_{123} , et F_1 en fonction du nombre atomique Z.....	97
4-2. Comparaison des valeurs empiriques et théoriques actuelles de l'Auger avec les valeurs théoriques et expérimentales pour a_1 en fonction du numéro atomique Z.....	106
4-3. Comparaison des valeurs empiriques et théoriques actuelles de l'Auger avec les valeurs théoriques et expérimentales pour a_2 en fonction du numéro atomique Z.....	107
4-4. Comparaison des valeurs empiriques et théoriques actuelles de l'Auger avec les valeurs théoriques et expérimentales pour a_3 en fonction du numéro atomique Z.....	108

Liste des tableaux

3-1. Coefficients d'ajustement selon la formule (3-1).....	65
3-2. Résumé des coefficients d'ajustement selon l'équation (3-3).....	68
4-1. Calculs empiriques, théoriques, (ce travail), utilisant la méthode multiconfiguration Dirac-Fock (MCDFGME), de la transition Coster-Kronig f_{12} de ^{28}Ni to ^{96}Cm	100
4-2. Calcul empirique (ce travail), théoriques, utilisant la méthode multiconfiguration Dirac-Fock (MCDFGME), de la transition Coster-Kronig f_{23} de ^{28}Ni to ^{96}Cm	101
4-3. Calculs empirique (ce travail), théoriques, utilisant la méthode multiconfiguration Dirac Fock (MCDFGME) de la transition Coster-Kronig f_{13} de ^{28}Ni to ^{98}Cf	102
4-4. Calcul empirique (ce travail), théoriques, utilisant la méthode multiconfiguration Dirac-Fock (MCDFGME) de la transition Coster-Kronig F_{123} de ^{28}Ni to ^{96}Cm	103
4-5. Calcul empirique (ce travail), théoriques, utilisant la méthode multiconfiguration Dirac-Fock (MCDFGME), de la transition Coster-Kronig F_1 de ^{28}Ni to ^{96}Cm	104
4-6. Calculs empiriques (ce travail), théoriques, utilisant la méthode de Dirac-Fock multiconfiguration (MCDFGME), la transition Auger a_1 from ^{40}Zr to ^{93}Np	109
4-7. Calculs empiriques (ce travail), théoriques, utilisant la méthode de Dirac-Fock multiconfiguration (MCDFGME), la transition Auger a_2 from ^{40}Zr to ^{96}Cm	110
4-8. Calculs empiriques (ce travail), théoriques, utilisant la méthode de Dirac-Fock multiconfiguration (MCDFGME), la transition Auger a_3 from ^{40}Zr to ^{96}Cm	111
Table 1. Résumé des paramètres atomiques pour les éléments allant du ^{28}Ni to ^{96}Cm , les sources d'excitation, les échantillons cibles et les détecteurs. Les références à partir desquelles ces données ont été obtenues sont également incluses.....	116
Table 2. Résumé des données expérimentales $(f_{12})_{\text{Exp}}$ de ^{28}Ni à ^{96}Cm présentées en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(f_{12})_{\text{W}}$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ϵ_{ISD} , ϵ_{ESD} , l'écart type interne et externe (z_{ISD} , z_{ESD}) et leurs moyennes (\bar{z}_{ISD} , \bar{z}_{ESD}) sont également indiqués.....	131
Table 3. Résumé des données expérimentales $(f_{23})_{\text{Exp}}$ de ^{28}Ni à ^{100}Fm sont présentées en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(f_{23})_{\text{W}}$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ϵ_{ISD} , ϵ_{ESD} , l'écart type interne et externe (z_{ISD} , z_{ESD}), et leurs moyennes (\bar{z}_{ISD} , \bar{z}_{ESD}) sont également répertoriées.....	134
Table 4. Résumé des expériences $(f_{13})_{\text{Exp}}$ Coster Kronig de ^{28}Ni à ^{96}Cm sont présentées en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(f_{13})_{\text{W}}$, les références à partir	

desquelles les bases de données sont extraites, ϵ_{ISD} , ϵ_{ESD} , les écarts-types internes et externes (z_{ISD} , z_{ESD}), et leurs moyennes (\bar{z}_{ISD} , \bar{z}_{ESD}) sont également indiqués.....138

Table 5. Résumé des expériences $(F_{123})_{Exp}$ Coster Kronig de ^{28}Ni à ^{92}Cm sont présentées en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(F_{123})_W$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ϵ_{ISD} , ϵ_{ESD} , les écarts-types internes et externes (z_{ISD} , z_{ESD}) et leurs moyennes (\bar{z}_{ISD} , \bar{z}_{ESD}) sont également indiqués.....141

Table 6. Résumé des résultats expérimentaux $(F_1)_{Exp}$ Coster Kronig de ^{28}Ni à ^{92}Cm sont présentés en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(F_1)_W$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ϵ_{ISD} , ϵ_{ESD} , les écarts-types internes et externes (z_{ISD} , z_{ESD}) et leurs moyennes (\bar{z}_{ISD} , \bar{z}_{ESD}) sont également indiqués.....144

Table 7. Résumé des désintégrations Auger expérimentales $(a_1)_{Exp}$ de ^{40}Zr à ^{92}U présentées en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(a_1)_W$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ϵ_{ISD} , ϵ_{ESD} , les écarts-types internes et externes (z_{ISD} , z_{ESD}) et leurs moyennes (\bar{z}_{ISD} , \bar{z}_{ESD}) sont également indiqués.....147

Table 8. Résumé des désintégrations Auger expérimentales $(a_2)_{Exp}$ de ^{40}Zr à ^{92}U présentées en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(a_2)_W$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ϵ_{ISD} , ϵ_{ESD} , les écarts-types internes et externes (z_{ISD} , z_{ESD}) et leurs moyennes (\bar{z}_{ISD} , \bar{z}_{ESD}) sont également indiqués.....155

Table 9. Résumé des désintégrations Auger expérimentales $(a_3)_{Exp}$ de ^{40}Zr à ^{92}U présentées en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(a_3)_W$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ϵ_{ISD} , ϵ_{ESD} , les écarts-types internes et externes (z_{ISD} , z_{ESD}) et leurs moyennes (\bar{z}_{ISD} , \bar{z}_{ESD}) sont également indiqués.....153

Scientific production

1. L-Subshell experimental Coster–Kronig probabilities and Auger Decays for elements in the atomic number range $28 \leq Z \leq 100$.

S. Meddah, A. Kahoul, F. Parente, S. Daoudi, J.P. Marques, J.M. Sampaio, S. Croft, A. Favalli, Y. Kasri, N.K. Kup Aylikci, V. Aylikci, A. Hamidani,
Atomic Data and Nuclear Data Tables 164 (2025) 101731,
URL : <https://doi.org/10.1016/j.adt.2025.101731>.

2. Empirical and theoretical calculations of L-subshell Coster-Kronig transitions in atoms with $28 \leq Z \leq 98$

S. Meddah, A. Kahoul, F. Parente, Y. Kasri, J. M. Sampaio, J. P. Marques, S. Croft, A. Favalli, E. Cengiz, & S. Daoudi.
Radiation Physics and Chemistry, 241(2025) 113543.
URL: <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2025.113543>.

3. Photon-Induced L-Subshell Auger Yield Yields for Elements in the Atomic Number Range $28 \leq Z \leq 96$

S. Meddah, A. Kahoul, F. Parente, Y. Kasri, J. M. Sampaio, J. P. Marques, S. Croft, A. Favalli, E. Cengiz, & S. Daoudi.
X- Ray Spectrometry, 2026; 0:1–13
URL: <https://doi.org/10.1002/xrs.70115>.

Introduction générale

Une connaissance précise des paramètres atomiques est essentielle dans divers domaines de la physique et de la technologie, notamment la spectroscopie atomique, la physique des plasmas, l'astrophysique et la science des matériaux. Des recherches récentes soulignent l'importance croissante des techniques analytiques dans ce domaine, en particulier celles liées à la fluorescence X , aux transitions de Coster-Kronig et aux processus Auger, car elles sont cruciales pour l'analyse quantitative des matériaux et pour la détermination de paramètres tels que les sections efficaces d'ionisation et d'excitation, sur la base des spectres observés. Les paramètres atomiques font l'objet de recherches théoriques et expérimentales approfondies depuis le milieu du XXe siècle, ce qui a permis d'acquérir un corpus de connaissances substantiel. Ces fondements continuent de soutenir le développement de modèles atomiques, améliorant notre compréhension des phénomènes microphysiques.

Les sections efficaces de fluorescence K , L et M (XRFCS), les rapports d'intensité relative des rayons X , les rendements de fluorescence et les probabilités de transition de lacunes sont des paramètres atomiques fondamentaux dont l'importance croît dans plusieurs domaines. Ils sont couramment employés dans le cadre des essais non destructifs des matériaux, de la dosimétrie des rayonnements et de la radio-oncologie. Ils participent à la sûreté nucléaire, à la recherche sur le plasma et à l'optimisation des industries liées aux rayonnements.

Les avancées technologiques, en particulier le rayonnement synchrotron et la spectroscopie à haute résolution, ont mis en exergue l'importance de ces paramètres, favorisant les innovations scientifiques et industrielles et ouvrant de nouvelles applications dans des domaines tels que la spectroscopie, la technologie médicale, l'innovation en matière d'appareils électriques, l'analyse des matériaux et l'optimisation des processus environnementaux et industriels. Dans le cadre de l'étude de la physique atomique et de la chimie quantique, les mécanismes de transport non radiatifs, tels que les transitions de Coster-Kronig et les transitions Auger, se révèlent des outils indispensables pour étudier et exploiter la dynamique interne des éléments chimiques.

Une connaissance précise des probabilités de transition Auger et Coster–Kronig est essentielle pour modéliser les spectres de radiation des isotopes émetteurs d'électrons Auger et pour évaluer leurs effets physiques et biologiques dans les applications médicales, en particulier dans le cadre de la radiothérapie sélective et des calculs de doses de radiation subcellulaires.

Dans le cadre de notre thèse de doctorat, nous contribuerons à la recherche sur les transitions d'Auger et Coster Kronig. L'efficacité des transitions Coster Kronig et Auger d'un atome est définie comme la probabilité de remplir un vide dans la couche par un processus non radiatif. Le manuscrit de cette thèse comporte trois chapitres :

- Dans le premier chapitre, nous avons fait un rappel théorique sur l'interaction rayonnement-matière, en passant en revue les différents processus d'interaction des photons avec la matière. Nous avons également traité des concepts liés à l'émission des rayons X , ainsi que des paramètres qui la caractérisent.
- Dans le deuxième chapitre, après avoir effectué une revue des travaux précédents à notre travail de recherche, nous présenterons une compilation exhaustive de données concernant les transitions de Coster-Kronig et Auger de la sous-couche L . Dans le cadre de cette étude, l'objectif principal est de regrouper 1058 valeurs expérimentales issues de la littérature et d'articles de recherches publiés entre 1955 et 2024, et de les présenter dans 8 tableaux. L'ensemble des

données en question fait référence à des éléments allant du ^{28}Ni au ^{100}Fm . Ces éléments ont été étudiés sous bombardement photonique. La distribution des données expérimentales compilées inclut la majorité des éléments pertinents. Nous listerons de façons très brève les différentes sources d'excitations, échantillons.

- Le chapitre 3 est consacré à l'établissement d'une méthode de calcul des valeurs empirique et théoriques. Obtenir des valeurs fiables pour les transitions dans la couche L reste particulièrement difficile en raison de la complexité des mesures et des limites de la précision expérimentale. Comme les données expérimentales étaient insuffisantes pour certains éléments, les données ont été organisées et utilisées pour établir des tendances empiriques lisses en utilisant l'interpolation polynomiale. Dans ce chapitre, nous avons également présentés les résultats de nos calculs théoriques réalisés à l'aide d'un programme de calcul basé sur le modèle MCDFGME (*Multi Configuration Dirac Fock and General Matrice Elements*).
- Dans le chapitre 4, une étude comparative détaillée a été présentée. L'étude consiste à examiner et confronter les résultats empiriques et théoriques obtenues avec et les données expérimentales disponibles. Enfin, les principaux résultats de notre thèse seront résumés sous la forme d'une conclusion générale.

Chapitre 1

Rappel sur l'interaction rayonnement-matière

Le concept d'atome est désormais largement reconnu par la communauté scientifique et le grand public, même s'il reste, par essence, un modèle théorique. Ce modèle n'a cessé d'évoluer au fil du temps en réponse aux exigences des nouvelles théories physiques et pour rendre compte des résultats expérimentaux accumulés. L'interaction entre le rayonnement et la matière constitue l'un des piliers fondamentaux de la physique atomique et se manifeste différemment selon la nature des particules incidentes. Les particules chargées interagissent directement avec la matière en provoquant des excitations ou des ionisations, tandis que les particules non chargées agissent indirectement en générant, dans un premier temps, des particules chargées capables d'induire ces processus.

1.1 Généralité sur les rayons X

En 1894, Wilhelm Conrad Röntgen observa qu'une décharge électrique produite dans un gaz raréfié, soumis à une forte différence de potentiel entre deux électrodes, générait un rayonnement fortement pénétrant. Lorsque la tension appliquée dépassait 30 kV, ce rayonnement était capable de traverser la main humaine et de projeter des ombres sur un écran fluorescent. Röntgen désigna ce phénomène sous le nom de « rayons X ». Il comprit rapidement que ce rayonnement électromagnétique résultait de l'accélération et de la décélération brutale des électrons, provoquées lors de leur collision avec l'anode ou les parois du tube de décharge soumis à une haute tension [1]. Dans un tube à rayons X, des électrons de haute énergie sont accélérés par une forte différence de potentiel puis dirigés vers une cible métallique, généralement appelée anode. Lors de leur interaction avec les atomes de cette cible, une partie de leur énergie cinétique T est convertie en rayonnement électromagnétique sous forme de rayons X. L'énergie des photons émis est toujours inférieure ou égale à celle des électrons incidents, ce qui se traduit par la relation:

$$hv \leq T \quad (1 - 1)$$

L'émission de ces rayons résulte essentiellement du processus de décélération des électrons à proximité du noyau atomique ou lors d'interactions électroniques. Les photons ainsi produits trouvent de nombreuses applications, notamment dans le domaine de l'imagerie médicale et de l'analyse des matériaux.

D'un point de vue physique, les rayons X appartiennent au spectre des ondes électromagnétiques et présentent de nombreuses propriétés communes avec la lumière visible, les micro-ondes ou encore les ondes radio. Bien qu'invisibles à l'œil nu, ils présentent une structure ondulatoire similaire, caractérisée par des champs électrique et magnétique oscillants.

La production de rayons X s'effectue à l'aide d'un tube à électrons. Ce dispositif repose sur l'application d'une différence de potentiel élevée, généralement comprise entre 20 et 150 kV, entre la cathode et l'anode. Un circuit distinct à basse tension alimente le filament de la cathode, ce qui entraîne son échauffement et l'émission d'électrons par effet thermoïonique. La tension appliquée au tube principal accélère ces électrons vers l'anode, ce qui permet de contrôler leur énergie et leur trajectoire. Lorsque les électrons atteignent l'anode, ils produisent des rayons X selon deux mécanismes principaux:

– le rayonnement de freinage (Bremsstrahlung), résultant de la décélération brutale des électrons au voisinage des noyaux de l'anode.

– le rayonnement caractéristique, émis lorsque des électrons atomiques excités de l'anode retournent vers leur état fondamental.

Les rayons X générés sont émis dans toutes les directions, mais leur faisceau est soigneusement contrôlé à l'aide de blindages en plomb et de collimateurs afin d'obtenir une géométrie adaptée. Le faisceau ainsi formé interagit ensuite avec le sujet ou le détecteur, permettant la formation d'une image exploitable [2].

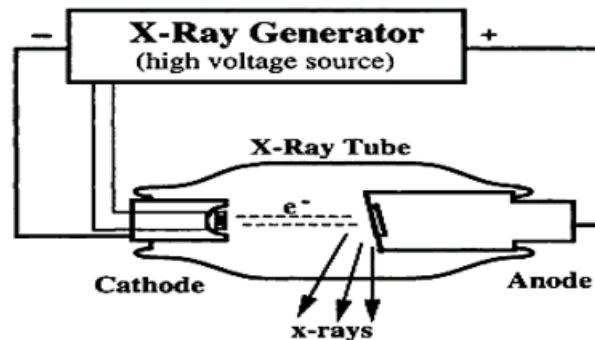


Figure 1.1: Processus de production de rayons X de base [2].

1.2 Interaction-rayonnement matière

Les photons sont des rayonnements indirectement ionisants dont le transfert d'énergie au milieu absorbant s'effectue selon un mécanisme en deux étapes distinctes. Dans un premier temps, l'énergie du photon est transmise à une particule chargée issue de l'interaction. Dans un second temps, cette particule chargée dépose l'énergie reçue dans le milieu absorbant. En règle générale, l'énergie transférée aux particules chargées lors de l'interaction photon-matière excède l'énergie réellement stockée dans le milieu. Cette différence s'explique notamment par le fait qu'une partie de cette énergie peut être émise sous forme de photons par les particules chargées elles-mêmes [3].

La nature de l'interaction photonique dépend à la fois de l'énergie du photon incident et du numéro atomique de l'absorbeur. Le photon peut donc interagir avec l'atome dans son ensemble, avec le noyau atomique ou avec un électron orbital [4]. À l'issue de cette interaction avec l'atome absorbant, deux situations peuvent se présenter : soit le photon est totalement absorbé et une partie de son énergie est transférée aux particules chargées, soit il est diffusé sans disparition intégrale [3]. Par ailleurs, certaines interactions photoniques revêtent une importance majeure en physique médicale en raison de leur rôle fondamental en imagerie médicale, en radiothérapie et en dosimétrie des rayonnements.

D'autres présentent un intérêt essentiellement théorique et contribuent à une meilleure compréhension globale des mécanismes régissant les interactions photon-matière [5].

1.2.1 Mécanismes d'interaction

Le présent travail de thèse est consacré au calcul de valeurs empiriques des probabilités de transition associées aux émissions de Coster-Kronig et Auger, à partir de données mesurées expérimentalement. L'obtention de ces grandeurs nécessite, en première étape, la création d'une lacune électronique au sein du cortège électronique de l'atome cible.

La formation de cette lacune peut résulter de plusieurs mécanismes physiques. Elle peut être induite soit par des collisions photons-atome, soit par des collisions impliquant des particules chargées. Dans le cadre de cette étude, seule la première catégorie de processus est considérée.

Lorsque des rayonnements électromagnétiques, tels que les rayons X ou γ , pénètrent dans la matière, différentes interactions peuvent se produire. Les photons incidents peuvent être totalement absorbés par les atomes cibles, donnant lieu à l'effet photoélectrique. Ils peuvent également être diffusés avec modification de leur énergie et de leur direction, correspondant à la diffusion Compton, ou être déviés sans perte d'énergie, phénomène connu sous le nom de diffusion Rayleigh. Enfin, pour des photons de très haute énergie (de l'ordre de quelques MeV), le processus de création de paires électron-positon (e^- , e^+) peut se produire, suivi éventuellement de l'annihilation des positrons.

a. Effet photoélectrique

L'effet photoélectrique est une interaction fondamentale entre un photon d'énergie $h\nu$ et un électron orbital fortement lié d'un atome absorbant. Au cours de cette interaction, le photon est totalement absorbé et l'électron est éjecté de son orbite avec une énergie cinétique E_K . L'électron ainsi émis est appelé photoélectron. Ce phénomène constitue l'une des premières manifestations expérimentales de la dualité onde-corpuscule de la lumière et a valu à Albert Einstein le prix Nobel de physique en 1921. Pour que l'effet photoélectrique se produise, l'énergie du photon incident doit être supérieure ou égale à l'énergie de liaison E_b de l'électron sur son orbite atomique. L'énergie cinétique de l'électron éjecté est alors donnée par la relation :

$$T = h\nu - E_b \quad (1 - 2)$$

L'effet photoélectrique concerne principalement les électrons fortement liés, en particulier ceux des couches internes K et L , contrairement à l'effet Compton qui met en jeu des électrons libres ou faiblement liés. La distinction entre un couplage « fort » et un couplage « faible » repose sur la comparaison entre l'énergie de liaison de l'électron E_b et l'énergie du photon $h\nu$ plutôt que sur leurs

valeurs absolues. Ainsi, lorsque $E_B \ll h\nu$, l'électron peut être considéré comme faiblement lié ou quasi libre, tandis que dans le cas où $E_B \lesssim h\nu$, il est considéré comme fortement lié. [3].

La probabilité d'absorption photoélectrique est particulièrement élevée pour les électrons des couches internes en raison de leur proximité avec le noyau atomique. Dans ce processus, le noyau absorbe une partie de la quantité de mouvement afin d'assurer la conservation de la quantité de mouvement totale. Cette probabilité d'interaction est décrite par la section efficace photoélectrique σ_{PE} , grandeur probabiliste exprimée en barn (b) ($1b = 10^{-24} \text{ cm}^2$).

La section efficace de l'effet photoélectrique dépend fortement du numéro atomique Z du matériau cible et de l'énergie du photon incident. Elle augmente rapidement avec Z et diminue fortement lorsque l'énergie du photon augmente, suivant approximativement la relation :

$$\sigma_{PE} \propto Z^4 E^{-3} \quad (1 - 3)$$

Par conséquent, les matériaux à numéro atomique élevé et les photons de faible énergie présentent une forte probabilité d'interaction photoélectrique.

Après l'éjection du photoélectron, l'atome se trouve dans un état excité et instable. Il s'ensuit un réarrangement du cortège électronique : un électron d'une couche externe comble la lacune créée dans la couche interne, entraînant l'émission d'un photon de fluorescence X dont l'énergie correspond à la différence entre les deux niveaux d'énergie. Dans certains cas, ce photon peut être réabsorbé par l'atome, provoquant l'émission d'un électron périphérique appelé électron d'Auger figure (1-2). Ce mécanisme est plus fréquent dans les atomes légers.

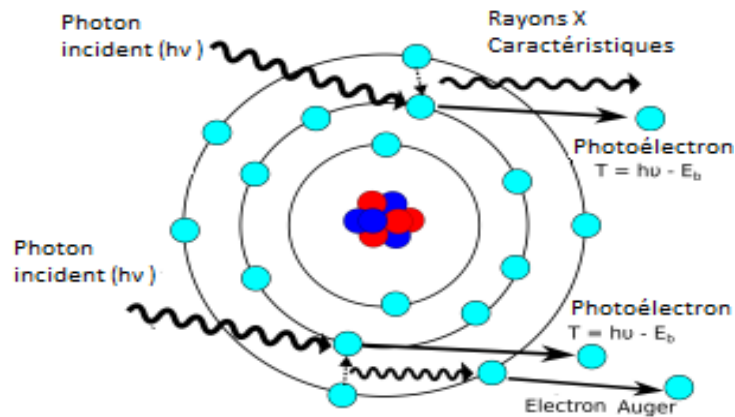


Figure 1-2: Schéma de l'effet photoélectrique [6].

b. Effet Compton

La diffusion Compton fait référence à la diffusion inélastique des photons provenant d'électrons libres ou faiblement liés, qui sont au repos. Puisque l'électron est presque libre, il peut également être dispersé à la suite de la collision.

La diffusion Compton a été découverte et étudiée par Compton en 1923. Lors d'une expérience de diffusion, il constata que la longueur d'onde de la lumière dispersée était différente de celle de la lumière incidente. Il expliqua avec succès ce phénomène en considérant la lumière comme étant constituée de paquets d'ondes quantifiés ou de photons.

La figure (1-3) montre ce processus pour un électron lié. Le lecteur peut se rappeler que les énergies de liaison des éléments de faible Z sont de l'ordre de quelques centaines d'électron-volts (eV), tandis que les sources de rayons γ utilisées dans les laboratoires ont des énergies dans la plage des centaines de keV. Par conséquent, l'électron lié peut être considéré comme presque libre et au repos par rapport aux photons incidents. En général, pour les électrons orbitaux, l'effet Compton est plus probable que l'effet photoélectrique si l'énergie du photon incident est supérieure à l'énergie de liaison de l'électron le plus interne dans l'atome cible [7].

Les lois simples de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement peuvent être utilisées pour dériver la relation entre les longueurs d'onde des photons incidents et diffusés :

$$\lambda = \lambda_0 + \frac{h}{m_0 c} [(1 - \cos \theta)] \quad (1 - 4)$$

Ici, λ_0 et λ représentent respectivement les longueurs d'onde des photons incidents et diffusés. m_0 est la masse au repos et θ est l'angle entre les photons incidents et diffusés.

En termes d'énergies des photons incidents et diffusés, l'équation (1-5) peut être écrite comme suit:

$$E_\gamma = E_{\gamma 0} \left[1 + \frac{E_{\gamma 0}}{m_0 c^2} (1 - \cos \theta) \right]^{-1} \quad (1 - 5)$$

où nous avons utilisé la relation énergie-longueur d'onde $E_\gamma = \frac{hc}{\lambda}$, cette relation montre que l'énergie du photon diffusé dépend non seulement de l'énergie du photon incident mais aussi de l'angle de diffusion. En d'autres termes, le processus de diffusion n'est en aucun cas isotropique. Nous verrons plus tard que cette dépendance directionnelle est en réalité avantageuse pour les objectifs spectroscopiques.

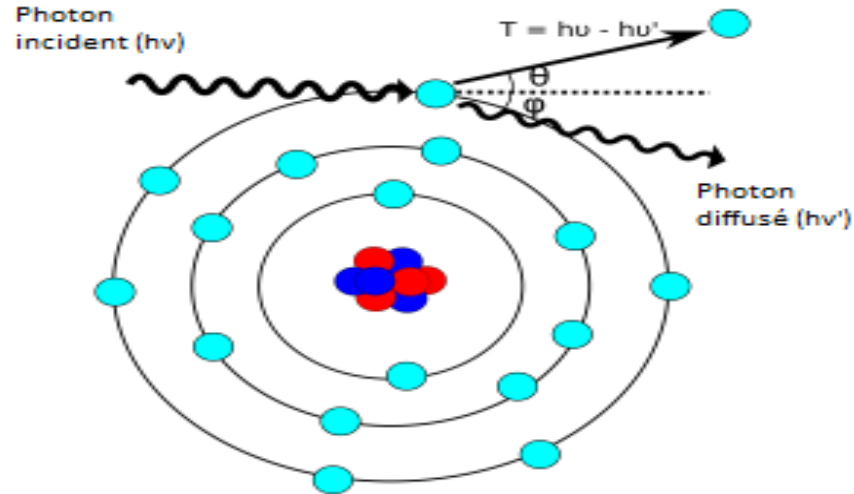


Figure 1-3: Schéma de l'effet Compton [6].

c. Effet de création de paires

Un photon ayant une énergie d'au moins 1.022 MeV peut créer une paire électron-positron lorsqu'il interagit avec le champ Coulomb intense d'un noyau. Les positrons, qui sont produits par la création de la paire, ont une durée de vie très courte et disparaissent par annihilation avec des électrons, produisant ainsi deux photons d'énergie de 0.51 MeV. La production de paires est d'une importance particulière lorsque les photons à haute énergie traversent des matériaux avec un numéro atomique élevé. Elle est presque inexistante pour les faibles énergies utilisées dans les expériences de diffraction des rayons X . La production de paires est impossible si les rayons X incidents n'atteignent pas 1.02 MeV, et elle devient significative uniquement lorsque l'énergie dépasse 2 MeV [8].

nous pouvons considérer la production de paires comme le processus inverse de l'annihilation électron-positron. Cependant, il existe une différence opérationnelle entre les deux processus : la production de paires se produit toujours dans un matériau, tandis que l'annihilation électron-positron n'a pas de telle exigence. Pour que la production de paires ait lieu, il doit y avoir une autre particule à proximité pour assurer la conservation du moment. Le processus dans le voisinage d'un noyau lourd peut être représenté par :



où X et X^{*} représentent les états fondamental et excité d'un noyau lourd.

En pensant de manière intuitive, on peut dire que, puisque l'énergie se transforme en particules qui ont des masses discrètes, une énergie suffisante doit être disponible pour que ce processus ait lieu. C'est-à-dire que le photon doit avoir au moins l'équivalent de la masse au repos de deux électrons

(l'électron et le positron ont des masses égales). Par conséquent, l'énergie du photon doit être supérieure ou égale à l'énergie au repos des électrons et peut être écrite comme suit :

$$E_\nu = h\nu > 2m_e c^2 \quad (1 - 7)$$

Cela implique que :

$$E_\nu = h\nu > 1.022 \text{ MeV} \quad (1 - 8)$$

Ici, m_e est la masse d'un électron ou d'un positron.

L'énergie réelle du seuil pour le processus dans le voisinage d'un noyau lourd est donnée par :

$$E_\nu = > 2m_e c^2 + \frac{2m_e^2 c^4}{m_{nuc}} \quad (1 - 9)$$

où m_{nuc} est la masse du noyau. Nous pouvons aussi écrire l'équation sous la forme suivante :

$$E_\nu = > 2m_e c^2 \left(1 + \frac{m_e}{m_{nuc}} \right) \quad (1 - 10)$$

Maintenant, étant donné que la masse d'un noyau est beaucoup plus grande que celle de l'électron $m_{nuc} \gg m_e$, nous pouvons négliger le second terme dans les parenthèses à droite et obtenir la condition de seuil que nous avons dérivée plus tôt, comme suit :

$$E_\nu = > 2m_e c^2 \quad (1 - 11)$$

La production de paires peut aussi se produire dans le voisinage de particules plus légères, comme les électrons. Le processus dans le voisinage d'un électron est généralement appelé production de paires triplet et peut être écrit comme suit :

$$\gamma + e^- \rightarrow e^- + e^+ + e^- \quad (1 - 12)$$

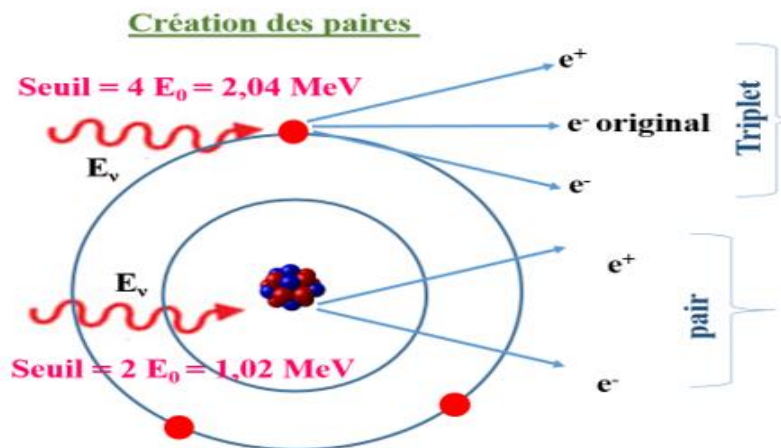


Figure 1-4: Représentation schématique du phénomène de création des paires et triplets suivi de l'annihilation. [9].

d. Diffusion de Thomson-Rayleigh

La diffusion de Thomson est un processus de diffusion élastique entre un électron libre et un photon de faible énergie. Par "faible énergie", on entend l'énergie à laquelle les effets quantiques ne sont pas significatifs. Ainsi, pour dériver les quantités cinématiques liées à la diffusion de Thomson, les concepts de la théorie électromagnétique classique suffisent.

En revanche, dans le processus de diffusion de Rayleigh, il y a un couplage minimal entre les photons et la structure interne de l'atome cible. Proposée par Lord Rayleigh en 1871, cette théorie s'applique lorsque le rayon de l'atome cible est beaucoup plus petit que la longueur d'onde du photon incident. Le photon diffusé par Rayleigh a une longueur d'onde pratiquement identique à celle du photon incident, ce qui implique que le transfert d'énergie est extrêmement faible. La diffusion de Rayleigh est donc le mode prédominant pour les rayons X et les rayons gamma de faible énergie [7].

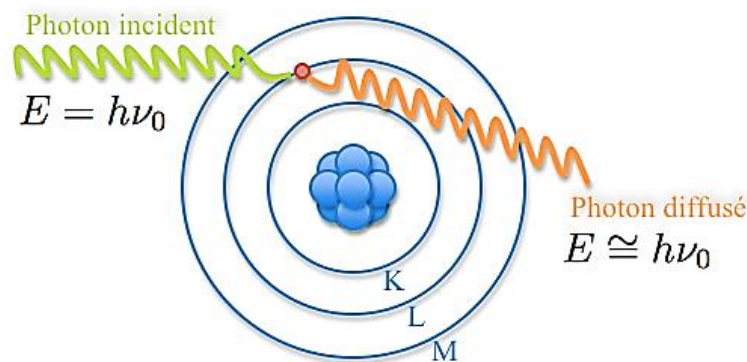


Figure 1-5: diffusion de Rayleigh [10].

1.2.2 Combinaison des trois effets

L'importance relative des effets de Compton, de l'effet photoélectrique et de la production de paires dépend à la fois de l'énergie quantique du photon ($E_\gamma = h\nu$) et du numéro atomique Z du milieu absorbant. Le figure (1-6) indique les régions de Z et E_γ dans lesquelles chaque interaction prédomine. Les courbes montrent où deux types d'interactions sont également probables. Il sera observé que l'effet photoélectrique est dominant aux énergies plus faibles.

Pour les énergies de photons moyennes, l'effet Compton prend le dessus, et la production de paires devient prédominante à des énergies plus élevées. Pour les milieux à faible Z (par exemple, le carbone,

l'air, l'eau, les tissus humains), la région de dominance de l'effet Compton est très large, s'étendant de ≈ 20 keV à ≈ 30 MeV. Cette région se réduit progressivement avec l'augmentation de Z [10].

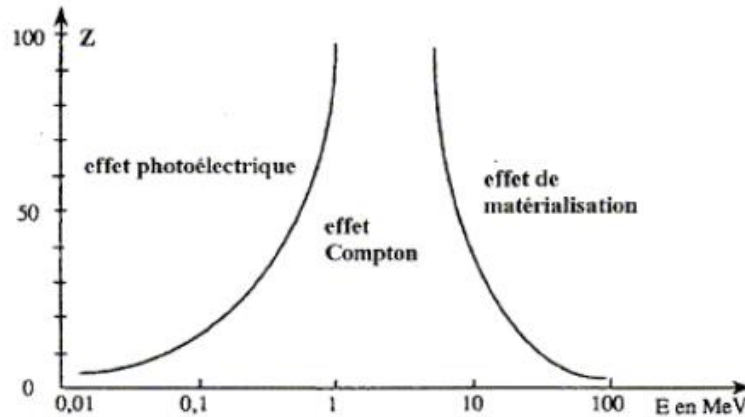


Figure 1-6: Les effets photoélectrique, Compton et de production de paires (matérialisation) dépendent du numéro atomique Z du milieu et de l'énergie du photon.

1.2.3 Loi d'atténuation et sections efficaces atomiques

Lorsqu'un faisceau de photons incidents traverse un milieu matériel, son intensité diminue progressivement en raison des interactions des photons avec les constituants de la matière. Ce phénomène, appelé atténuation, est illustré schématiquement à la figure (1-7), qui montre la réduction du nombre initial de photons N_0 après la traversée d'un matériau d'épaisseur l .

Le nombre de photons transmis N à la sortie du milieu est régi par la loi exponentielle d'atténuation suivante :

$$N(x) = N_0 e^{-\mu_{att} l} \quad (1 - 13)$$

Où μ_{att} désigne le coefficient d'atténuation linéique. Ce paramètre, exprimé en (cm^{-1}) , représente la probabilité d'interaction d'un photon d'énergie donnée par unité de longueur parcourue dans le milieu. Il intègre l'ensemble des contributions liées aux différents mécanismes d'interaction photon-matière, principalement l'effet photoélectrique et la diffusion Compton dans le domaine d'énergie considéré.

Le coefficient d'atténuation est directement lié à la section efficace totale des interactions par la relation suivante :

$$\mu_{att} = \frac{N_A \rho}{A} \sigma_{tot} \quad (1 - 14)$$

Où ρ correspond à la masse volumique du matériau traversé (en g/cm^3), σ_{tot} est la section efficace

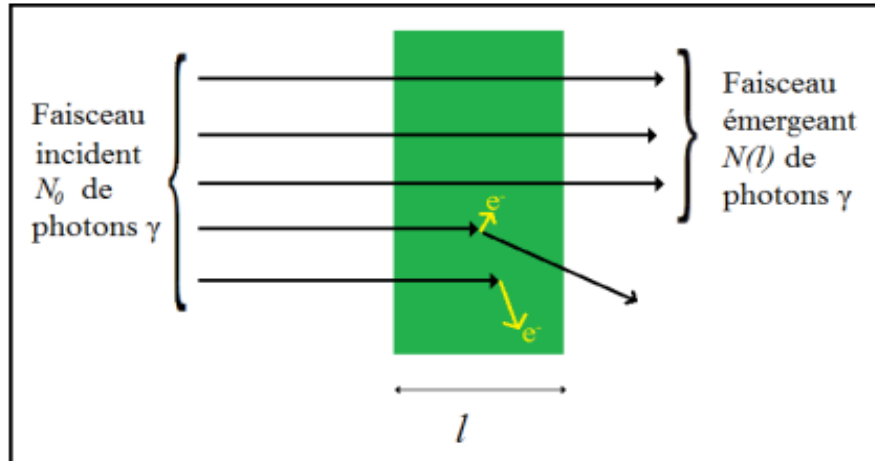


Figure 1-7: Illustration du phénomène d'atténuation des photons dans la matière [12].

1.3 Relaxations atomiques

À la suite d'interactions entre particules chargées et non chargées dans le champ d'un électron atomique, ainsi que de certaines désintégrations de radionucléides conduisant à l'ionisation d'un atome, des vacuités sont créées dans les couches atomiques et l'atome se retrouve dans un état excité. Ces processus incluent des collisions inélastiques de particules chargées, l'ionisation par impact d'électrons, de photons sur des atomes (à l'origine de l'effet photoélectrique et de l'effet Compton) et l'annihilation de positrons après la production de paires, ainsi que la capture d'électrons et la conversion interne. Selon la nature et l'énergie de l'interaction ainsi que selon le numéro atomique de l'atome cible, la vacuité peut se produire dans la couche externe ou dans l'une des couches internes de l'atome. L'ion excité se « détend » ensuite pour revenir à son état fondamental. L'énergie d'excitation est généralement libérée par la transition. Quant à l'énergie des particules émises lors de la relaxation, elle est déterminée par les niveaux d'énergie des couches ou sous-couches impliquées dans la transition. Ces transitions sont régies par les sélections mécaniques quantiques qui s'appliquent aux nombres quantiques des couches et des sous-couches. Les nombres quantiques impliqués sont : (a) le nombre quantique principal n avec des valeurs $n = 0,1,2,3,\dots$

(b) le nombre quantique du moment angulaire orbital ℓ avec des valeurs $\ell = 0,1,2,\dots,n-1$, qui correspond au moment angulaire orbital de l'électron $L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$

(c) le nombre quantique magnétique m_ℓ , déterminant la composante Z du moment angulaire, $L_Z = m_\ell \hbar$, avec $m_\ell = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell$

(d) le nombre quantique du moment angulaire intrinsèque ou le nombre quantique du spin s avec une valeur $s = 1/2$, qui correspond au spin $s = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \hbar\sqrt{3/2}$, et le nombre quantique m_s , qui détermine la composante z du moment angulaire intrinsèque, $s_z = m_s \hbar$, avec $j = -1/2, +1/2$.

Si aucune interaction n'existe entre le moment orbital et le moment spin, l'état de l'atome est déterminé par les quatre nombres quantiques, n, ℓ, m_ℓ, m_s . En réalité, il existe un couplage entre le moment orbital et le moment spin, conduisant à l'état quantique couplé pour lequel $J = L + S$ est déterminé par les nombres quantiques j et m_j . Le vecteur J peut prendre les valeurs

$$J = \hbar\sqrt{j(j+1)} \quad j = |\ell - s|, |\ell - s + 1|, \dots, |\ell + s| \quad \text{et } (s = 1/2)$$

et $m_j = -j, -j + 1$ déterminant la composante z de l'état couplé $J_z = \hbar m_j$. Avec le couplage spin-orbite, l'état des électrons est alors déterminé par les quatre nombres quantiques n, ℓ, j, m_j .

Les règles de sélection des transitions pour les soi-disant lignes normales des rayons X , basées sur les règles de sélection dipolaire électrique, dictent les principales transitions autorisées selon :

$$\Delta\ell = +1, -1 \quad \text{et } \Delta j = 0, +1, -1$$

Les règles de sélection dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique donnent lieu à d'autres transitions, mais l'intensité de ces transitions est nettement plus faible que celles résultant des règles de sélection dipolaire électrique. La correspondance entre les nombres quantiques n, ℓ, j , avec $j = \ell \pm 1/2$, et les différentes sous-couches électroniques atomiques, ainsi que le soi-disant nombre de remplissage des couches nombre maximal d'électrons dans une sous-couche, donné par $2j + 1$.

1.4 Notation de Siegbahn

La notation spectroscopique des rayons X désigne les transitions électroniques entre différentes couches. Les transitions entre les couches K et L sont représentées par des symboles tels que $L\alpha_1$ et $L\beta_1$, avec des sous-couches spécifiques comme $2s_{1/2}, 2p_{1/2}, 2p_{3/2}$ pour L et $3s_{1/2}, 3p_{1/2}, 3p_{3/2}, 3d_{5/2}$ pour M . En plus des lignes caractéristiques appelées lignes de diagramme, il existe des lignes non-diagramme telles que les lignes satellites et hypersatellites, qui apparaissent dans le spectre complexe des rayons X en raison des transitions entre les couches K et L , provenant des atomes multiplement ionisés. Ces lignes sont souvent remplies par des transitions de deux électrons accompagnées de l'émission de photons ou d'électrons Auger. Le processus RAE (Radiative Auger Effect) se produit lorsque la vacance de la couche K se désintègre en émettant simultanément un photon à faible énergie et un électron provenant des couches L ou M , ce qui concurrence les processus $K\alpha$ et $K\beta$ et produit une large structure dans les spectres des rayons X . Enfin, lorsqu'une désexcitation survient durant la

collision entre les électrons cibles et projetés, un rayonnement moléculaire ou orbital peut être émis, bien qu'un rayonnement "caractéristique" n'apparaisse que lorsque la vacance se désexcite après la collision.

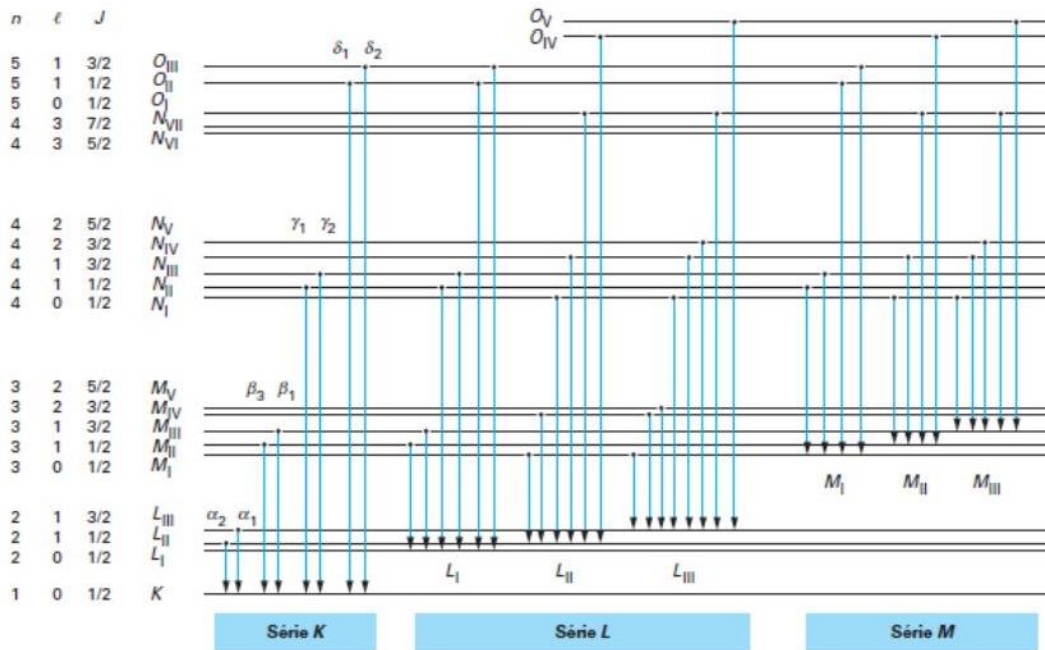


Figure 1-8: Niveaux d'énergie et quelque transition électronique permise.

1.5 Processus radiatif

1.5.1 Principes de la fluorescence X

Le principe de technique est d'exciter les atomes de la substance à analyser en bombardant l'échantillon avec des particules suffisamment énergétiques, telles que des rayons X/γ ou des particules chargées. L'ionisation photoionisation des électrons internes est produite par les photons et les particules chargées. Lorsque cette interaction enlève un électron d'un atome de l'échantillon, un électron provenant d'une couche externe (ou orbitale) occupe généralement la vacance. La distribution des électrons dans l'atome ionisé est alors hors d'équilibre et, en très peu de temps ($\sim 10^{-15}$ s), revient à l'état normal, par transition des électrons de l'extérieur vers l'intérieur des couches. Lorsqu'un électron d'une couche externe occupe une vacance, il doit perdre une quantité spécifique d'énergie pour occuper la couche interne la plus proche, avec une énergie de liaison plus forte. Cette quantité d'énergie est facilement prédite par les lois de la mécanique quantique et la majeure partie de l'énergie est émise sous forme de rayons X. Chaque transfert d'électron, par exemple de la couche L vers la couche K, représente une perte d'énergie potentielle de l'atome. Lorsqu'un photon X est émis, le

processus est l'émission des rayons X . Cette énergie apparaît sous la forme d'un photon (dans ce cas un photon $K\alpha$) dont l'énergie est la différence entre les énergies de liaison de la couche externe remplie et de la couche K vacante. Dans le processus normal d'émission, un électron de la couche interne est éjecté, produisant le photoélectron. De même, dans les collisions ion-atome, un ou plusieurs électrons atomiques peuvent se libérer (ionisation simple ou multiple), un ou plusieurs électrons peuvent être transférés d'un partenaire de collision à l'autre, ou les deux partenaires de la collision peuvent devenir excités, et une combinaison de ces processus peut se produire.

Des processus élémentaires peuvent également se produire. L'énergie excédentaire est évacuée soit par des photons (rayons X caractéristiques) — lorsqu'un électron d'un niveau supérieur tombe dans la vacance d'une couche interne, soit par des électrons Auger (électrons de couche supérieure) — lorsque l'énergie libérée au cours du processus de remplissage de la vacance par l'électron externe est transférée à un autre électron d'une couche externe. Ces émissions présentent des énergies caractéristiques déterminées fondamentalement par l'énergie de liaison des niveaux. La fraction des décroissances radiatives (rayons X) est appelée le rendement de fluorescence et est élevée pour les couches internes profondes. Le processus de désexcitation menant à l'émission des rayons X caractéristiques et des électrons Auger est illustré dans la figure. (1-9). L'effet Auger est plus courant pour les éléments à faible Z .

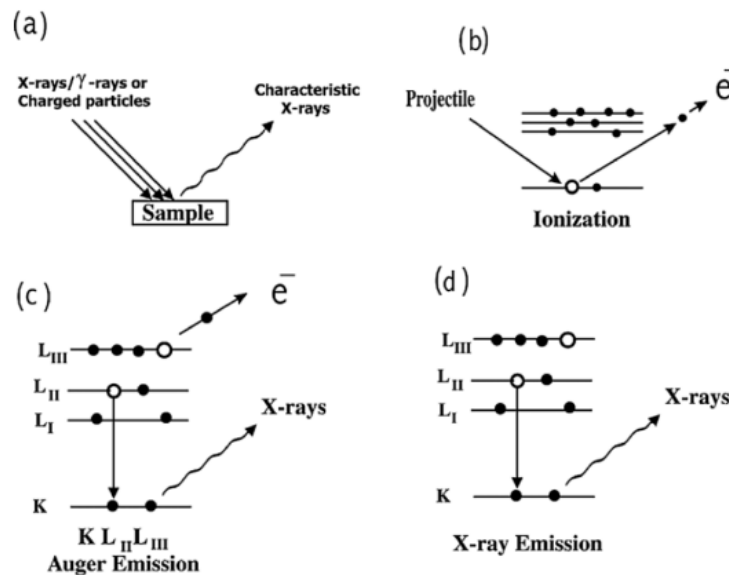


Figure 1-9: (a) Schéma du phénomène d'émission des rayons X (b) Création de vacance dans la couche interne par les rayons X ou les particules chargées (c) Processus d'émission des électrons Auger comprenant la désexcitation et l'émission d'électron d'une couche supérieure (d) Processus d'émission des rayons X .

1.5.2 Rendements de fluorescence

Le rendement de fluorescence d'une couche ou d'une sous-couche atomique est une mesure de la probabilité pour qu'une lacune dans cette couche ou sous-couche soit comblée par une transition radiative, c'est-à-dire par l'émission d'un rayon X caractéristique. Le rendement de fluorescence d'une couche est défini comme le rapport entre le nombre de rayons X émis (I_X) lors des transitions radiatives depuis cette couche, et le nombre initial de lacunes (n_X) présentes dans cette couche. En d'autres termes, c'est le nombre de transitions radiatives qui se produisent par rapport au nombre de lacunes initiales.

Cette définition s'applique facilement à la couche X d'un atome, Le rendement de fluorescence est donné par la formule suivante :

$$\omega_K = \frac{I_K}{n_K} \quad (1 - 15)$$

Où :

I_X représente le nombre de photons émis lorsque les lacunes dans cette couche sont comblées, n_X désigne le nombre de lacunes primaires [13].

1.6 Processus non radiatif

Un électron provenant d'une couche supérieure remplit la vacance, les lois de conservation étant satisfaites par l'éjection d'un électron d'une couche externe, laissant l'atome doublement ionisé dans ses couches externes. Cela est appelé une transition non radiative.

1.6.1 Transition Auger

En 1922, Pierre Auger commence ses activités de recherche en construisant, la première chambre d'expansion Wilson en France. En changeant les conditions expérimentales et en remplissant la chambre avec de l'argon, il remarque que les trajectoires des photoélectrons contiennent un petit groupe de gouttes au début de chaque trajectoire. Au début des années 1920, le seul processus d'assèchement admis pour un atome ionisé était la fluorescence X , où le premier électron du noyau est rempli par un électron ayant une énergie de liaison moins profonde E_2 , et l'équilibre énergétique étant rétabli par l'émission d'un photon secondaire $h\nu'$ (voir Figure (1-10)) : $h\nu' = E_1 - E_2$

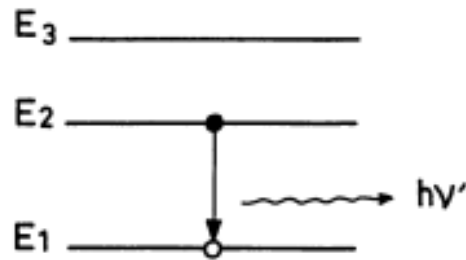


Figure 1-10: Radiative decay (X-ray fluorescence).

Auger remarqua que les électrons émis lors de cette ionisation initiale pouvaient induire l'émission d'autres électrons, qu'il appela les électrons β tertiaires. Ces électrons provenaient du même point que le photoélectron initial.

Au départ, Auger expliqua ce phénomène comme étant le résultat d'une réabsorption interne du rayonnement caractéristique (fluorescence) émis après l'ionisation, et il proposa que cette réabsorption conduisît à l'émission d'un second électron. Toutefois, il se rendit vite compte que l'émission de ces électrons β tertiaires ne résulte pas d'un effet de fluorescence radiative, mais plutôt d'un autre processus de décroissance non radiatif, où le vide interne de la couche ionisée est comblé par un électron d'un niveau plus superficiel, d'une couche externe [14].

Auger observa que l'énergie des électrons β tertiaires dépendait de la nature de l'atome ionisé, et non de l'énergie du faisceau incident. Il découvrit également que ce processus ne nécessitait pas l'émission de rayonnement électromagnétique interne et que l'énergie libérée par l'électron retourné pouvait quitter l'atome sous forme de particules, laissant l'atome deux fois ionisé.

Ainsi, cette découverte de la présence d'électrons β tertiaires représentait une avancée importante dans la compréhension des processus atomiques et a contribué à affiner les théories des phénomènes de fluorescence et de décroissance non radiative.

L'énergie cinétique E_A de l'électron éjecté est alors donnée par :

$$E_A = E_1 - E_2 - E_3^* \quad (1 - 16)$$

où E_3^* est l'énergie de liaison d'un électron dans le niveau 3 en présence d'un trou dans le niveau 1. Après le processus de relaxation, l'atome se trouve dans un état doublement ionisé avec des vides dans les niveaux 2 et 3 (voir figure (1-11)).

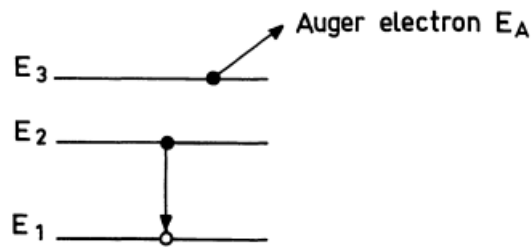


Figure 1-11: Non-radiative (processus d'Auger) [14].

1.6.2 Transition Coster-Kronig

Dans le cadre de l'étude de la physique atomique et de la chimie quantique, les mécanismes de transport non radiatif, tels que les transitions de Coster-Kronig et les événements Auger, sont des outils essentiels pour modéliser et comprendre la dynamique interne des éléments chimiques.

Lorsqu'un atome est frappé par des rayons X , des électrons ou des particules plus lourdes, une lacune peut être créée dans l'une de ses couches internes, ce qui provoque son excitation. Dans le cadre de cette étude, nous nous intéressons à la valeur de fluorescence de la couche L . Cette dernière est définie comme la probabilité qu'un électron d'une couche supérieure comble cette lacune en émettant un rayonnement X . Les transitions non radiatives constituent une autre classe de processus de désexcitation. La lacune initiale se déplace alors vers une couche (ou sous-couche) supérieure, tandis qu'un électron est éjecté du système, laissant deux lacunes. Une autre représentation de ce processus pourrait être la suivante : un électron de la couche supérieure comble la lacune initiale, tandis qu'un autre électron est éjecté dans le continuum. Lorsque la lacune initiale se déplace entre les sous-couches d'une même couche et que l'électron éjecté provient d'une couche supérieure, le processus est désigné sous le nom de « transition de Coster-Kronig » (ou « transition super-Coster-Kronig » si l'électron éjecté provient d'une autre sous-couche de la même couche). Dans le cadre de la physique quantique, le concept de transition Auger fait référence à un processus d'échange d'énergie entre deux couches atomiques distinctes. [15]. Par exemple, un vide peut être déplacé de la sous-couche L_1 vers les sous-couches L_2 ou L_3 (ou, de manière équivalente, un électron peut être déplacé des sous-couches L_2 ou L_3 vers la sous-couche L_1). Le rendement de Coster-Kronig f_{ij} , où i et j désignent les sous-couches impliquées dans le mouvement, quantifie la probabilité que ce processus se produise. Ainsi, f_{12} est la probabilité qu'un vide passe de L_1 à L_2 , et qu'un électron soit éjecté d'une couche supérieure. De même, f_{13} est la probabilité qu'un vide se déplace de L_1 vers L_3 , et f_{23} est la probabilité qu'un vide se déplace de L_2 vers L_3 [16].

Les transitions non radiatives sont principalement responsables de la relaxation des vides dans les sous-couches L et au-dessus, mais les transitions Auger sont le seul autre mécanisme de fluorescence produit par les vides dans la couche K. Lorsque cela est énergétiquement permis, les transitions Coster-Kronig et Super Coster-Kronig dominent l'effet Auger et multiplient davantage le nombre de vides. La figure (1-12) illustre les trois types de transitions (utilisant la notation IUPAC), qui sont souvent désignées sous le nom global de transitions Auger. Du point de vue de la dosimétrie, les émissions radiatives et non radiatives ont une importance particulière. Lorsque l'émission des rayons X de fluorescence se produit, l'énergie est transportée loin de l'interaction.

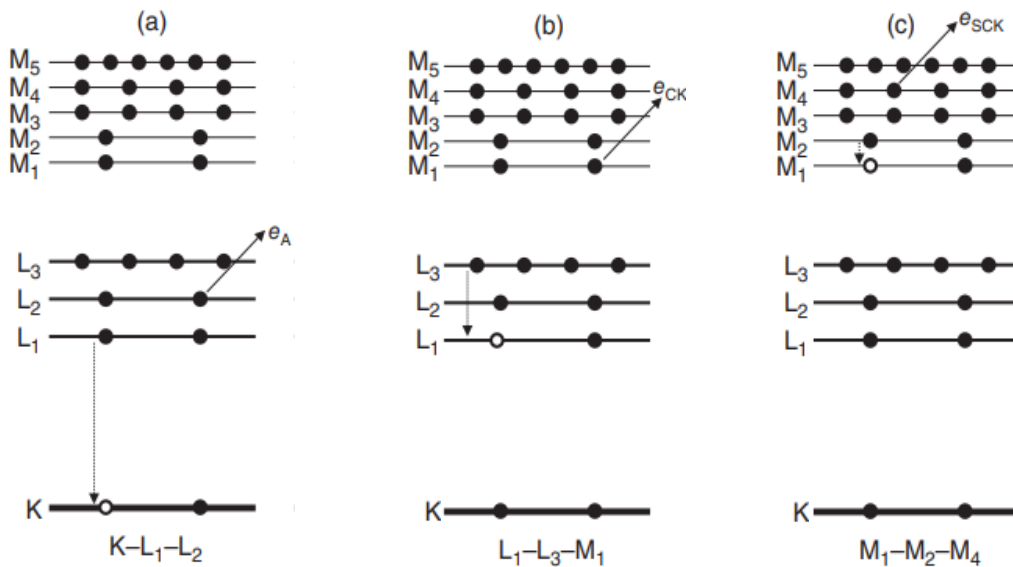


Figure 1-12: Schéma illustratif des transitions non-radiatives suivantes : (a) Auger, (b) Coster-Kronig, et (c) Super Coster-Kronig [17]

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

Dans la majorité des expériences réalisées pour mesurer le rendement de fluorescence d'une couche atomique, des vacuités primaires sont générées dans plusieurs sous-couches (i). Soit ω_i^X le rendement de fluorescence de la sous-couche i ème d'une couche dont le nombre quantique principal est désigné par X ($X=K$ pour $n=1$, $X=L$ pour $n=2$, $X=M$ pour $n=3$, ...) nous avons [13] :

$$\omega_i^X = I_i^X / n_i^X \quad (1 - 17)$$

Ainsi, un rendement moyen de fluorescence pour la couche X peut être défini comme suit :

$$\bar{\omega}_X = \sum_{i=1}^m N_i^X \omega_i^X \quad (1 - 18)$$

où N_i^X est le nombre relatif de vides primaires pour la couche X et $m=1$ pour la couche K, $m=3$ pour la couche L, $m=5$ pour la couche M,....:

$$N_i^X = \frac{n_i^X}{\sum n_i^X} \quad (1 - 19)$$

Où $\sum_{i=1}^m N_i^X = 1$.

Lorsqu'il y a des transitions Coster-Kronig, le rendement de fluorescence s'exprime de la manière suivante :

$$\bar{\omega}_X = \sum_{i=1}^K V_i^X \omega_i^X \quad (1 - 20)$$

Ici, contrairement à la distribution des vacances primaires N_i^X de l'équation (1-18), les coefficients V_i^X désignent les nombres relatifs de vacance dans les sous-couches X_i y compris les vacances transférées à chaque sous-couche par les transitions Coster-Kronig. Les quantités V_i^X obéissent à la relation :

$$\sum_{i=1}^K V_i^X > 1 \quad (1 - 21)$$

La probabilité de transition de Coster-Kronig pour déplacer une vacance d'une sous-couche X_i à une sous-couche supérieure X_j est notée f_{ij}^X . En conséquence, les quantités V_i^X peuvent être écrites en termes des nombres relatifs N_i^X des vacances primaires comme suit :

$$\begin{aligned} V_1^X &= N_1^X \\ V_2^X &= f_{12} N_1^X + N_2^X \\ V_3^X &= (f_{13} + f_{12} f_{23}) N_1^X + f_{23} N_2^X + N_3^X \\ &\vdots \\ V_k^X &= (f_{1k}^X + f_{12}^X f_{2k}^X + f_{12}^X f_{23}^X f_{3k}^X + \dots) N_1^X + (f_{k-2,k-1}^X f_{k-1,k}^X) N_{k-2}^X + f_{k-1,k}^X N_{k-3}^X + N_k^X \end{aligned} \quad (1 - 22)$$

Les distributions des lacunes dans la couche L sont associées de la manière suivante :

$$\begin{aligned} V_1^L &= N_1^L \\ V_2^L &= f_{12} N_1^L + N_2^L \\ V_3^L &= (f_{13} + f_{12} f_{23}) N_1^L + f_{23} N_2^L + N_3^L \end{aligned} \quad (1 - 22)$$

Les coefficients v_i^X et ω_i^X sont liés comme suit dans la couche L :

$$\begin{aligned} v_1^L &= \omega_1^L + f_{12} \omega_2^L + (f_{13} + f_{12} f_{23}) \omega_3^L \\ v_2^L &= \omega_2^L + f_{23} \omega_3^L \\ v_3^L &= \omega_3^L \end{aligned} \quad (1 - 23)$$

1.8 Relation entre rendement de fluorescence transition Coster-Kronig et Auger pour la couche L

Le rendement de fluorescence ω_i ($i = 1, 2, 3$ pour la couche L) a été défini comme la probabilité qu'un vide dans la sous-couche i soit rempli par une transition radiative. Le rendement Auger a_i ($i = 1, 2, 3$ pour la couche L) est la probabilité qu'un vide dans la sous-couche i soit rempli par une transition non radiative. Il faut se rappeler que le rendement Coster-Kronig f_{ij} est la probabilité qu'un vide dans la sous-couche X_i soit rempli par un électron effectuant une transition depuis une sous-couche supérieure X_j dans la même couche principale X , tandis que l'électron éjecté peut provenir de la même ou d'une couche principale supérieure.

Il peut être vu à partir de ces définitions que la relation suivante doit être valable entre le rendement Auger, le rendement de fluorescence et les rendements Coster-Kronig [18]:

$$\omega_i + a_i + \sum_{j>i} f_{ij} = 1 \quad (1 - 24)$$

Cette équation peut être écrite pour chaque sous-couche :

$$\omega_3 + a_3 = 1 \quad (1 - 25)$$

$$\omega_2 + a_2 + f_{23} = 1 \quad (1 - 26)$$

Ces rendements se répartissent comme suit :

- rendements de fluorescence : $\omega_1, \omega_2, \omega_3$
- rendements Auger : a_1, a_2, a_3
- rendements de Coster-Kronig : f_{12}, f_{23}, f_{13}

Les transitions de fluorescence X et Auger sont des processus compétitifs. Leur abondance relative dépend du numéro atomique, comme le montre la figure (1-13), où le rendement relatif est tracé en fonction du numéro atomique. Pour les excitations de la couche K , les transitions Auger dominent pour $Z \leq 31$ (Ga), tandis que l'émission fluorescente est plus forte pour les éléments plus lourds.

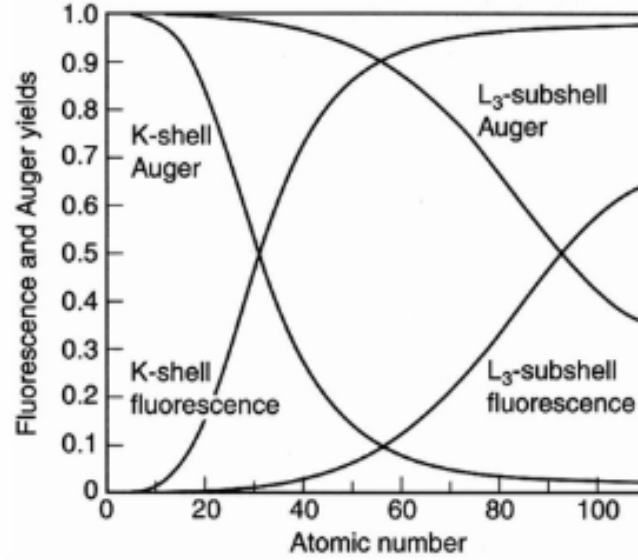


Figure 1-13: Comparaison des rendements de fluorescence X des couches K et L₃, ainsi que des rendements Auger en fonction du numéro atomique [19].

Pour l'excitation de la couche L, les transitions Auger dominent pour tous les éléments stables. Les deux processus, l'émission de fluorescence X et la désintégration Auger, se sont imposés comme des bases pour les spectroscopies largement utilisées. Bien sûr, la spectroscopie Auger nécessite de meilleures conditions de vide. En raison de la longueur de diffusion plus petite des électrons éjectés, elle est également plus influencée par la surface.

1.9 Section efficace de production des rayons X de la couche L

La section efficace de production d'un rayon X spécifique est obtenue en multipliant la section efficace d'ionisation de la couche considérée σ_I par le rendement de fluorescence ω , comme le montre l'expression suivante [20] :

$$\sigma_X = \sigma_I \omega \quad (1 - 27)$$

Les valeurs des sections efficaces de fluorescence des rayons X dans la couche L ont été calculées à partir des sections efficaces théoriques de photoionisation des sous-couches L_i (Scofield [21]) et des taux de désintégration radiatifs Scofield [22,23], en utilisant des valeurs semi-empiriques des rendements de fluorescence et des probabilités de transition de Coster-Kronig, en utilisant les équations suivantes Close et al. [24]; Bissinger et al. [25] :

$$\begin{aligned} \sigma_{Ll} &= (\sigma_{L1}f_{13} + \sigma_{L1}f_{12}f_{23} + \sigma_{L2}f_{23} + \sigma_{L3})\omega_3F_{3l} \\ \sigma_{L\alpha} &= [(f_{13} + f_{12}f_{23})\sigma_{L1} + f_{23}\sigma_{L2} + \sigma_{L3}]\omega_3F_{3\alpha} \\ \sigma_{L\beta} &= [\omega_1F_{1\beta} + f_{12}\omega_2F_{2\beta}(f_{13} + f_{12}f_{23})\omega_3F_{3\alpha}]\sigma_{L1} + (\omega_2F_{2\beta} + f_{23}\omega_3F_{3\beta})\sigma_{L2} + F_{3\alpha}\sigma_{L3} \end{aligned} \quad (1 - 28)$$

$$\sigma_{L\eta} = (\sigma_{L2} + \sigma_{L1}f_{12})\omega_2 F_{2\eta}$$

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

où σ_{L1} , σ_{L2} et σ_{L3} sont les sections efficaces de photoionisation

où σ_{L1} , σ_{L2} et σ_{L3} sont les sections efficaces de photoionisation des sous-couches des éléments à

l'énergie d'excitation ω_1 , ω_2 et ω_3 sont les rendements de fluorescence des sous-couches L f_{12} , f_{13} ,

f_{23} sont les probabilités de transition de Coster-Kronig et F_{ny} (F_{3l} , $F_{3\alpha}$, $F_{3\beta}$, etc.) sont les fractions

des Largeur de rayonnement de la sous-couche L_i ($L1$, $L2$, $L3$) contenue dans la ligne spectrale y^t ,

c'est-à-dire :

$$F_{ny} = \frac{\Gamma_{ny}}{\Gamma_i} \quad \text{e.g. } F_{3\alpha} = \frac{\Gamma_{3\alpha}}{\Gamma} \quad (1 - 29)$$

où Γ est le taux total de transition radiative de la couche L_3 et $\Gamma_{3\alpha}$ est la somme des taux de

transition radiative contribuant aux lignes L_α associées au remplissage des trous dans la couche L_3 .

Cela signifie :

$$\Gamma_{1\beta} = \Gamma_1(M_2, M_3 - L_1) + \Gamma_1(M_4, M_5 - L_1)$$

$$\Gamma_{1\gamma} = \Gamma_1(N_2, N_3 - L_1) + \Gamma_1(O_2, O_3 - L_1)$$

$$\Gamma_{2\eta} = M_1 - L_2$$

$$\Gamma_{2\beta} = \Gamma_2(M_4 - L_2) + \Gamma_2(M_3 - L_2)$$

$$(1 - 30)$$

$$\Gamma_{2\gamma} = \Gamma_2(N_1 - L_2) + \Gamma_2(N_4 - L_2) + \Gamma_2(O_1, O_4 - L_2)$$

$$\Gamma_{3l} = \Gamma_3(M_1 - L_3)$$

$$\Gamma_{3\alpha} = \Gamma_3(M_4 - L_3) + \Gamma_3(M_5 \rightarrow L_3)$$

$$\Gamma_{3\beta} = \Gamma_3(N_1 - L_3) + \Gamma_3(N_4 - L_3) + \Gamma_3(N_5 - L_3) + \Gamma_3(O_1 - L_3) + \Gamma_3(O_4, O_5 - L_3)$$

où $\Gamma_{1\beta}$ et $\Gamma_{1\gamma}$ sont les taux de transition radiative depuis les (M_2, M_3, M_4, M_5) , (N_2, N_3) et (O_2, O_3)

vers la couche L_1 , $\Gamma_{2\eta}$, $\Gamma_{2\beta}$ et $\Gamma_{2\gamma}$ sont les taux de transition radiative depuis les (M_1, M_3, M_4) , (N_1, N_4)

et (O_1, O_4) vers la couche L_2 et $\Gamma_{3\eta}$, $\Gamma_{3\alpha}$ et $\Gamma_{3\beta}$ sont les taux de transition radiative depuis les

(M_1, M_4, M_5) , (N_1, N_4, N_5) et (O_1, O_4, O_5) vers la couche L_3 respectivement.

1.10 Références

- [1] Prabhu, S., Naveen, D. K., Bangera, S., & Bhat, B. S. (2020). *J. Phys.: Conf. Ser.*, 1712, 012036.
- [2] Zink, F. E. (1997). *Radiographics*, 17, 1259–1268.
- [3] Podgorsak, E. B., & Podgoršak, E. B. (2014). *300 Problems and Solutions*, 387–514.
- [4] Abdel-Rahman, W., & Podgorsak, E. B. (2010). *Radiat. Phys. Chem*, 79, 552–566.
- [5] Roncali, E., Mosleh-Shirazi, M. A., & Badano, A. (2017). *Phys. Med Biol*, 62, R207.
- [6] Hupman, M. A. (2021).
- [7] Ahmed, S. N. (2007). *Academic Press*.
- [8] Connolly, J. R. (2007). *Prepared for EPS400-002 Spring*.
- [9] Alhelou, N. (2018). *Doctoral thesis, Université de Lille, France*.
- [10] Nicol, S. (2010). *Université de la Méditerranée-Aix-Marseille II*.
- [11] Attix, F. H. (2004). *Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA*.
- [12] Hazim, M. (2017). *Thèse de Doctorat, Université de Nantes*.
- [13] Bambynek, W., Carsemann, B., Fink, W., Freund, H. U., Mark, H., Swift, C. D., Price, R. E., & Rao, P. V. (1972). *Rev. Mod. Phys.*, 44, 716.
- [14] Briant J-P.(1994) *Le Vide, Les Couches Minces* 271,127.
- [15] Chattarji, D. (1976). *Academic Press, London, New York, San Francisco*, 12.
- [16] Chattarji, D. (1976). *Academic Press, London, New York, San Francisco*, 12-169850-5. [17] Andreo, P., Burns, D. T., Nahum, A. E., Seuntjens, J., & Attix, F. H. (2017). JWS.
- [18] Fink, R.W., Jopson, R.C., Mark, H., & Swift, C.D. (1966). *Rev. Mod. Phys.*, 38, 513–540.
- [19] Attwood, D. T. (2000). *Cambridge Univ. Press*.
- [20] Dupuis, T. (2012). *Thèse de Doctorat, Université de Liège, Belgique*.
- [21] Scofield, J.H., 1973. *Lawrence Livermore Laboratory, Livermore, CA*.
- [22] Scofield, J.H. (1969). *Phys. Rev. A*, 179(1), 9-15.
- [23] Scofield, J.H. (1974). *Atom. Data Nucl. Data Tables*, 14, 121-137.
- [24] Close, D.A., Beorse, R.C., Malonitify, J.J., & Umberger, C.J. (1973). *Phys. Rev. A*, 8(4), 1873-1879.
- [25] Bissinger, G.A., Baskin, A.B., Choi, B.H., Shafroth, S.M., Howard, T.M., & Waltner, A.W. (1972). *Phys. Rev. A*, 6(2), 545-547.

Chapitre 2

Base de données des probabilités de transitions de Coster-Kronig et Auger

Les chercheurs ont observé que la probabilité des transitions Coster-Kronig varie considérablement en fonction de l'énergie photonique, illustrant la sensibilité de ces processus aux conditions d'excitation. Ces résultats sont essentiels pour améliorer les modèles théoriques des transitions de Coster-Kronig et leurs applications en spectroscopie et en physique atomique. Dans le prolongement de nos travaux systématiques antérieurs sur les bases de données des paramètres atomiques fondamentaux, les résultats de ces études approfondissent notre compréhension de la dynamique impliquée dans les transitions Auger et Coster-Kronig, ainsi que leur influence sur les rendements radiatifs et non radiatifs. Cela contribuera à faire progresser les applications scientifiques dans les domaines de la spectroscopie, du développement de dispositifs électroniques, de la médecine et de l'environnement.

2.1 État de l'art

Les transitions de Coster-Kronig sont des processus non radiatifs dans lesquels une lacune est transférée d'une sous-couche à une autre au sein de la même couche (par exemple, de L_2 à L_3), avec l'éjection d'un électron de couche supérieure. Ces processus sont très sensibles aux variations même mineures de l'énergie de liaison, en particulier lorsque l'atome approche de son seuil énergétique. Un léger changement dans l'énergie de l'élément peut débloquent une transition qui était auparavant interdite, entraînant un changement brusque dans son comportement d'émission [1]. Dans la littérature, les études sur les transitions de Coster-Kronig de la sous-couche L ont utilisé diverses approches expérimentales, en fonction du mécanisme d'ionisation spécifique, de la nature du matériau cible et des caractéristiques des systèmes de détection, ainsi que diverses méthodologies de calcul. Des études importantes ont déjà été menées sur les coefficients f_{ij} de la sous-couche L relatifs aux transitions de Coster-Kronig de plusieurs éléments, souvent présentées sous forme de tableaux. Fink et al. [2] ont passé en revue les valeurs expérimentales des paramètres de transition de Coster-Kronig publiées avant 1966. Dans le cadre de l'étude de la physique atomique et de la chimie quantique, les mécanismes de transport non radiatifs, tels que les transitions de Coster-Kronig et les transitions Auger, se révèlent être des outils indispensables pour appréhender et exploiter la dynamique interne des éléments chimiques [3]. Bambynek et al. [4] ont fourni une compilation des valeurs expérimentales des transitions de Coster-Kronig du baryum au curium. Guerra et al. [5] ont publié des valeurs de transitions de Coster-Kronig f_{ij} pour le nickel, obtenues expérimentalement et théoriquement. En ce qui concerne les méthodes empiriques, des travaux importants ont été publiés sur les valeurs (f_{12} , f_{13} , f_{23}) pour une large gamme d'éléments. Krause [6] a présenté des valeurs semi-empiriques ajustées pour les transitions de Coster-Kronig de la sous-couche L , pour les éléments dont le numéro atomique est compris entre 22 et 110, en utilisant toutes les données expérimentales disponibles avant 1979. Les travaux d'Öz et al. [7] ont permis d'examiner de manière approfondie les effets Auger et Coster-Kronig pour les éléments dont le numéro atomique est compris entre ${}_{59}\text{La}$ et ${}_{85}\text{Bi}$. Ils se sont concentrés sur l'application de méthodes analytiques utilisant des modèles mathématiques adaptés aux données afin de décrire ou de représenter de manière fluide les effets radiatifs et les rendements non radiatifs. Pour certains éléments dont le numéro atomique est compris entre $59 \leq Z \leq 90$, Öz et al. [8] ont comparé les valeurs déduites avec des modèles théoriques et des valeurs semi-empiriques antérieures, ainsi qu'avec des valeurs mesurées des transitions de Coster-Kronig. Campbell [9] a compilé des données exhaustives sur les transitions

de Coster-Kronig et de la fluorescence pour les sous-couches L , qui ont ensuite été réévaluées sur la base de nouvelles données [10]. Özdemir et al. [11] ont utilisé un rayonnement gamma de 59.54 keV provenant de sources ^{241}Am pour étudier les rendements radiatifs et non radiatifs d'éléments dont le numéro atomique est compris entre 55 et 92. Bansal et al. [3] ont mis l'accent sur les effets Coster-Kronig dans leur étude concernant les mesures par fluorescence X (XRF) de la couche L dans les éléments des terres rares dont les numéros atomiques vérifient $62 \leq Z \leq 67$.

Dans le cadre de la poursuite de nos travaux systématiques portant sur les bases de données des paramètres atomiques fondamentaux [12-23], les résultats présentés apportent un éclairage approfondi sur la dynamique des transitions Auger et Coster-Kronig et sur leur rôle dans les rendements radiatifs et non radiatifs. Ces bases de données comprennent un total de 130 valeurs publiées entre 1955 et 2024 et couvrent les éléments dont le numéro atomique est compris entre $28 \leq Z \leq 100$. Les valeurs z moyens et les écarts-types combinés ont été calculés pour chaque élément et chaque paramètre et sont également présentés dans les bases de données.

2.2 Aperçu des travaux expérimentaux

Le tableau 1 (voir Annexe) présente un aperçu des transitions non radiatives de Coster-Kronig et d'Auger publiées entre 1955 et 2024, à l'aide de diverses méthodes expérimentales et dans plusieurs conditions expérimentales. Ce tableau répertorie les paramètres atomiques pour les éléments allant du nickel ($Z=28$) à Fermium ($Z=100$) ionisé par des photons incidents. Il comprend les références aux articles originaux dont ils sont extraits, la nature de l'échantillon cible utilisé et les types de détecteurs de rayons X . Les sources de photons incluent généralement l'utilisation de rayons gamma de 59.5 keV émis par une source radioactive ^{241}Am lorsque cela est possible, les rayons gamma de 122 keV émis par une source radioactive ^{57}Co , et les rayons X de 22.69 keV émis par une source radioactive ^{109}Cd , bien que diverses autres sources radioactives aient également été utilisées. Les échantillons cibles se présentent sous forme d'éléments purs, d'alliages ou de composés, généralement sous forme d'échantillons de poudre, de feuilles, de pastilles ou de disques circulaires. De même, de nombreux types de détecteurs ont été déployés pour mesurer la fluorescence des rayons X émis, les plus populaires étant les semi-conducteurs monocristallins, comme le silicium $\text{Si}(\text{Li})$ et le germanium $\text{Ge}(\text{Li})$, avec une résolution variant selon le fabricant et le modèle.

Les spectromètres à faible énergie $\text{Si}(\text{Li})$ et les détecteurs Ultra-LEGe sont souvent utilisés pour étendre la gamme d'énergie jusqu'à quelques centaines d'électronvolts. Des détecteurs à germanium de haute pureté (HPGe), à germanium (Ge) et à iodure de sodium dopé au thallium ($\text{NaI}(\text{Tl})$) ont

également été utilisés. Les détecteurs HPGe ont une meilleure résolution énergétique que les détecteurs Ge (Li) et NaI (Tl), ce qui leur permet de mieux distinguer les raies d'émission rapprochées et d'identifier différents matériaux nucléaires.

2.2.1 Analyse des données

Les rendements Auger et Coster-Kronig tirés des articles utilisés sont présentés sous forme de tableaux à deux ou quatre chiffres, accompagnés d'estimations des erreurs de mesure exprimées en écart-type. Ces paramètres sont résumés dans huit tableaux (tableaux 2 à 9 (voir annexe)), couvrant les éléments dont le numéro atomique est compris entre $_{28}\text{Ni}$ et $_{100}\text{Fm}$. Chaque tableau comprend les données expérimentales des transitions de Coster-Kronig et Auger ainsi que les références à leur origine. De plus, des analyses statistiques ont été menées pour chaque élément et chaque paramètre, ce qui a permis de déterminer des valeurs moyennes pondérées, des scores z moyens (\bar{z}), et des écarts types combinés (z_i). Il est important de noter que certains des articles cités dans les tableaux 7 à 9 n'indiquent pas les valeurs des rendements Auger. Nous avons calculé ces valeurs à l'aide d'équations standard et de l'écart-type quadratique [2] :

$$a_1 = 1 - \omega_1 - f_{12} - f_{13}, \quad (2 - 1)$$

avec

$$\Delta a_1 = \sqrt{(\Delta\omega_1)^2 + (\Delta f_{12})^2 + (\Delta f_{13})^2} \quad (2 - 2)$$

$$a_2 = 1 - \omega_2 - f_{23}, \quad (2 - 3)$$

avec

$$\Delta a_2 = \sqrt{(\Delta\omega_2)^2 + (\Delta f_{23})^2} \quad (2 - 4)$$

et

$$a_3 = 1 - \omega_3, \quad (2 - 5)$$

avec

$$\Delta a_3 = \Delta\omega_3 \quad (2 - 6)$$

Dans ces expressions, les a_i sont les rendements (transitions) Auger, f_{ij} sont les probabilités de transitions de Coster-Kronig des sous-couches atomiques L_i , et ω_1 , ω_2 , et ω_3 sont les rendements de fluorescence des sous-couches L_i . De plus, les quantités composées F_{123} et F_1 sont obtenues comme suit :

$$F_{123} = f_{12} \times f_{23} + f_{13}, \quad (2 - 7)$$

avec:

$$\Delta(F_{123}) = \sqrt{(f_{12})^2 \times (\Delta f_{23})^2 + (f_{23})^2 \times (\Delta f_{12})^2 + (\Delta f_{13})^2} \quad (2-8)$$

et

$$F_1 = f_{12} + f_{13}, \quad (2-9)$$

avec:

$$\Delta(F_1) = \sqrt{(\Delta f_{12})^2 + (\Delta f_{13})^2} \quad (2-10)$$

Nous notons que la quantité F_{123} est nécessaire pour écrire la distribution finale des lacunes (V_3) en termes de distribution primaire des lacunes (N_1, N_2 et N_3) en utilisant les transitions de Coster-Kronig appropriés (f_{ij}) [2,4]. F_{123} est également utilisé pour déduire certains paramètres atomiques importants tels que les rendements moyens de la fluorescence de la couche L et les sections efficaces de production de rayons X des raies L . Ici, F_1 est la somme de la probabilité totale de Coster-Kronig de la sous couche L_1 .

Dans l'équation (2-11), $(\varphi)_{Exp-n}$ représente la $n^{ième}$ valeur expérimentale des transitions de Coster-Kronig. Les formules utilisées pour calculer les valeurs moyennes pondérées dans cette étude sont les suivantes [18,19,21,22,24,25]:

$$(\varphi)_W \pm \varepsilon_{ISD-\varphi} = \frac{1}{\sum_{n=1}^N \frac{1}{(\Delta(\varphi)_{Exp-n})^2}} \cdot \sum_{n=1}^N \frac{(\varphi)_{Exp-n}}{(\Delta(\varphi)_{Exp-n})^2} \pm \frac{1}{\left(\sum_{n=1}^N \frac{1}{(\Delta(\varphi)_{Exp-n})^2} \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (2-11)$$

N représente le nombre total ou le comptage des points de données expérimentales, $\Delta(\varphi)_{Exp-n}$ désigne l'incertitude (écart type) associée à la $n^{ième}$ valeur expérimentale, et $\varepsilon_{ISD-\varphi}$ désigne l'estimation résultante de l'écart type interne. Une manière simple et naturelle de présenter visuellement l'écart des points expérimentaux individuels par rapport à la moyenne pondérée correspondante pour l'élément consiste à tracer l'écart signé en multiples de l'écart type interne et externe combiné défini par [21,22]:

$$Z_{i,ISD-\varphi} = \frac{(\varphi)_{Exp-n} - (\varphi)_W}{\sqrt{(\Delta(\varphi)_{Exp-n})^2 + (\Delta(\varphi)_{ISD})^2}}, \quad (2-12)$$

$$Z_{i,ESD-\varphi} = \frac{(\varphi)_{Exp-n} - (\varphi)_W}{\sqrt{(\Delta(\varphi)_{Exp-n})^2 + (\Delta(\varphi)_{ESD})^2}}, \quad (2-13)$$

où $(\varphi)_{Exp-n}$ et $(\varphi)_W$ font référence respectivement aux $n^{\text{ième}}$ valeurs expérimentales et aux valeurs moyennes pondérées élémentaires correspondantes. $\Delta(\varphi)_{ISD} = \varepsilon_{ISD-\varphi}$, est l'écart type attribué associé, l'écart type externe étant donné par l'équation [22]:

$$\varepsilon_{ESD-\varphi} = \sqrt{\frac{\sum_n ((\varphi)_{Exp-n} - (\varphi)_W)^2 / (\Delta(\varphi)_{Exp-n})^2}{(n-1) \sum_n \frac{1}{(\Delta(\varphi)_{Exp-n})^2}}} \quad (2 - 14)$$

L'idée est de quantifier l'écart de chaque point par rapport à la moyenne pondérée en multiples d'une mesure de distance comprenant la somme en quadrature d'une contribution associée à l'expérience et d'une estimation de la précision avec laquelle la moyenne globale est définie. La mesure est simple dans le sens où nous n'avons pas exclu le point en question des calculs de l'écart type interne et externe, mais les avons maintenus fixes dans l'ensemble de données. Il convient de noter que les écarts types internes et externes calculés selon les équations ((2-11), (2-14)) sont appelés erreurs types internes et externes dans la littérature technique. Ils quantifient la confiance dans le résultat sur la base de l'ensemble des données plutôt que sur une détermination individuelle.

Le \bar{z} moyen est calculé comme suit [21,22]:

$$\bar{z}_{ISD-\varphi} = \frac{\sum_{i=1}^n z_{i,ISD-\varphi}}{n}, \quad (2 - 15)$$

$$\bar{z}_{ESD-\varphi} = \frac{\sum_{i=1}^n z_{i,ESD-\varphi}}{n} \quad (2 - 16)$$

Où n représente le nombre de points expérimentaux pour chaque élément.

Les tableaux 2 à 9 comprennent plusieurs remarques importantes concernant les sources et la précision des valeurs indiquées. Par exemple, deux valeurs moyennes pour le ^{82}Pb sont indiquées sur la base de Campbell et al. [26], tandis que la valeur spécifique pour le ^{56}Ba indiquée par Burford et Haynes [27], puis citée par Fink et al. [2], est utilisée avec le même taux d'erreur. Pour le ^{91}Pa , Richard et al. [28] ont rapporté une erreur de 100 %, la même que celle rapportée par Karttunen [29] pour le ^{96}Cm , et par Weksler et Pinho [30] et Bayrn et al. [31] pour le ^{92}U . D'autres valeurs ont été obtenues à partir de sources indirectes, car elles étaient difficiles à extraire directement, comme la valeur de ^{100}Fm documentée par Freedman et Porter [153] et cité par Krause [6], et la valeur de ^{94}Pu rapportée par Salgueiro et al. [32] et citée ultérieurement dans Bayrn [31]. En outre, les travaux de Sojkowski et Melin [33] ont fourni les données sur le ^{81}Tl citées par Vleuri [34], et Holmes et al. [35] ont fourni les

données sur le ${}_{67}\text{Ho}$ rapportées dans Baymbenk et al. [24] et Burhop [36], ainsi que la thèse de Mohan [37], qui documente les données relatives au ${}_{70}\text{Yb}$. Les données relatives au ${}_{65}\text{Tb}$ ont également été rapportées dans les travaux de Douglas [38], cités par la suite dans Nix et Fink [39]. Il existe également des contributions de Persson [40] et de Sojkowski et Mellin [33] pour le ${}_{81}\text{Tl}$, ainsi que des données d'Akalaev [41] pour le ${}_{93}\text{Np}$, tandis que la valeur pour le ${}_{96}\text{Cm}$ est utilisée dans les travaux de McGeorge et Fink [42] cités dans Bambynek et al. [4]. Enfin, Freund et Fink [43] fournissent les données pour le ${}_{83}\text{Bi}$, citées par Weksler et Pinho [30]. Les valeurs en gras dans le tableau représentent les calculs que nous avons effectués à l'aide des équations ((2-3)-(2-10)).

La distribution du nombre de points de données pour les transitions expérimentales de Coster-Kronig f_{12} , f_{23} , f_{13} , F_{123} et F_1 en fonction du numéro atomique Z ($28 \leq Z \leq 100$) sont illustrées dans la figure (2-1). L'analyse de cette figure nous permet de tirer les conclusions suivantes :

- Presque toutes les cibles de $28 \leq Z \leq 96$ (pour f_{12} , f_{13} , F_{123} et F_1) et de ${}_{98}\text{Cf}$ à ${}_{100}\text{Fm}$ (pour f_{23}) sont couvertes, à l'exception de quelques cas isolés pour lesquels aucune donnée n'est disponible ou moins de deux données sont disponibles.
- Pour les éléments ${}_{28}\text{Ni}$, ${}_{29}\text{Cu}$, ${}_{40}\text{Zr}$, ${}_{42}\text{Mo}$, ${}_{44}\text{Ru}$, ${}_{45}\text{Rh}$, ${}_{46}\text{Pd}$, ${}_{47}\text{Ag}$, ${}_{50}\text{Sn}$, ${}_{51}\text{Sb}$, ${}_{54}\text{Xe}$, ${}_{56}\text{Ba}$, ${}_{57}\text{La}$, ${}_{59}\text{Pr}$, ${}_{60}\text{Nd}$, ${}_{62}\text{Sm}$, il y a entre une et quatre mesures par élément.
- Les cibles les plus exploitées se situent dans la région $63 \leq Z \leq 83$ et comprennent un nombre important d'éléments tels que ${}_{64}\text{Cu}$, ${}_{65}\text{Zn}$, ${}_{66}\text{Ga}$, ${}_{67}\text{Ge}$, ${}_{70}\text{Se}$, ${}_{74}\text{W}$, ${}_{79}\text{Au}$, ${}_{80}\text{Hg}$, ${}_{81}\text{Tl}$, ${}_{83}\text{Bi}$. On a également observé qu'il existe une quantité importante de données pour ${}_{73}\text{Ta}$ et ${}_{82}\text{Pb}$.
- Nous avons enregistré plusieurs valeurs de données expérimentales, allant de un à treize, pour plusieurs éléments compris entre ${}_{83}\text{Bi}$ et ${}_{100}\text{Fm}$.

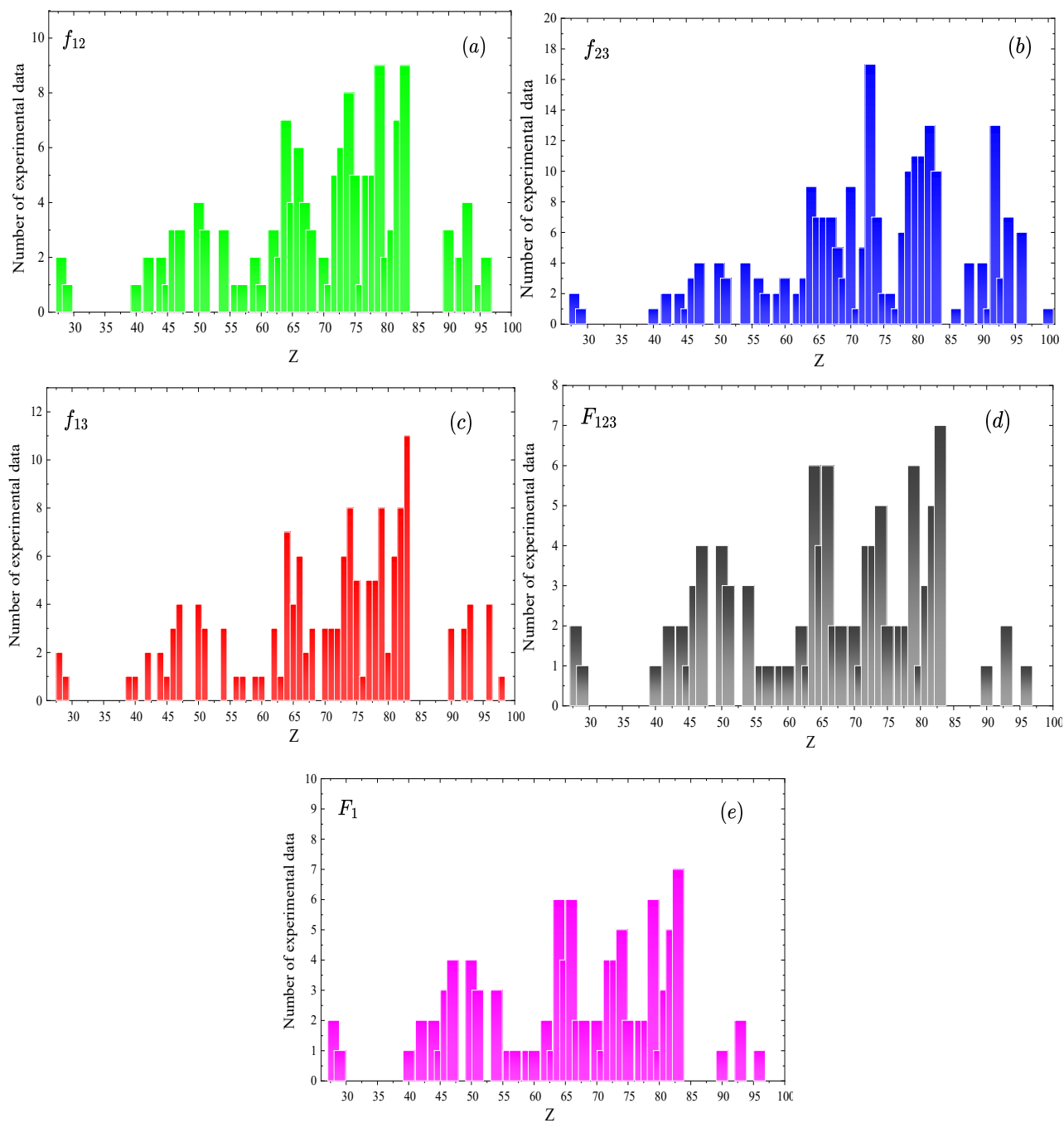


Figure 2-1: Distribution du nombre de valeurs expérimentales de f_{12} , f_{23} , f_{13} , F_{123} et F_1 en fonction du numéro atomique Z .

La distribution du nombre de points de données pour les rendements Auger expérimentaux a_1 , a_2 , et a_3 en fonction du numéro atomique, pour des cibles allant de ${}_{40}\text{Zr}$ à ${}_{96}\text{Cm}$, est illustrée dans la figure (2-1). L'analyse de cette figure nous permet de tirer les conclusions suivantes:

- Presque toutes les cibles se situent dans la plage $40 \leq Z \leq 96$ (pour a_1 , a_2 , et a_3), à l'exception de quelques cas isolés, en raison du manque de données ou parce qu'elles ont moins de deux points de données.
- Pour les éléments ${}_{40}\text{Zr}$, ${}_{42}\text{Mo}$, ${}_{44}\text{Ru}$, ${}_{46}\text{Pd}$, ${}_{47}\text{Ag}$, ${}_{50}\text{Sn}$, ${}_{51}\text{Sb}$, ${}_{54}\text{Xe}$, ${}_{55}\text{Cs}$, ${}_{56}\text{Ba}$, ${}_{57}\text{La}$, ${}_{58}\text{Ce}$, ${}_{59}\text{Pr}$, ${}_{60}\text{Nd}$, ${}_{62}\text{Sm}$, dans la plage $40 \leq Z \leq 63$, ont entre un et trois points de données.
- La plupart des cibles se situent dans la plage des numéros atomiques $64 \leq Z \leq 83$ et fournissent une grande quantité de données, notamment ${}_{64}\text{Cu}$, ${}_{65}\text{Zn}$, ${}_{66}\text{Ga}$, ${}_{67}\text{Ga}$, ${}_{67}\text{Ge}$, ${}_{70}\text{Se}$, ${}_{74}\text{Se}$, ${}_{74}\text{W}$, ${}_{79}\text{Au}$, ${}_{80}\text{Hg}$, ${}_{81}\text{Tl}$, et ${}_{83}\text{Bi}$.
- Les cibles métalliques sont les plus exploitées et comprennent le plus grand nombre de données, comme ${}_{64}\text{Cu}$, ${}_{83}\text{Bi}$.
- Le nombre de valeurs varie de un à cinq entre $86 \leq Z \leq 96$, les éléments ${}_{92}\text{U}$ et ${}_{94}\text{Pu}$ enregistrant respectivement 10 et 7 points.
- Les données pour les éléments ${}_{41}\text{Nb}$, ${}_{43}\text{Tc}$, ${}_{45}\text{Rh}$, ${}_{48}\text{Cd}$, ${}_{49}\text{In}$, ${}_{52}\text{Te}$, ${}_{53}\text{I}$, ${}_{61}\text{Pm}$, ${}_{69}\text{Tm}$, ${}_{75}\text{Re}$, ${}_{80}\text{Hg}$, ${}_{84}\text{Po}$, ${}_{85}\text{At}$, ${}_{86}\text{Rn}$, ${}_{87}\text{Fr}$, ${}_{88}\text{Ra}$, ${}_{89}\text{Ac}$, ${}_{91}\text{Pa}$, et ${}_{95}\text{Am}$, ne sont pas encore disponibles en raison de la difficulté à préparer et à manipuler les cibles, du caractère radioactif des éléments et/ou de leur indisponibilité.

Une partie de la motivation du présent travail consistait à identifier les lacunes dans les données expérimentales, à trouver les domaines présentant un degré élevé d'incertitude, comme en témoignent les écarts fractionnaires importants entre les résultats rapportés par différents chercheurs, et à repérer les domaines où un examen approfondi à l'aide d'outils perfectionnés serait le plus justifié. C'est le cas du ${}_{36}\text{Kr}$, pour lequel il existe un manque surprenant de données expérimentales. Le ${}_{36}\text{Kr}$ de qualité recherche (pureté atomique de 99.99%) est facilement disponible dans le commerce et la communauté des physiciens est familiarisée avec la manipulation de cet élément dans toute une série d'applications, notamment en tant que composant de compteurs proportionnels remplis de gaz utilisés pour mesurer les rayonnements ionisants, et, à l'échelle de la tonne, comme liquide dans les calorimètres utilisés dans les expériences de physique des hautes énergies.

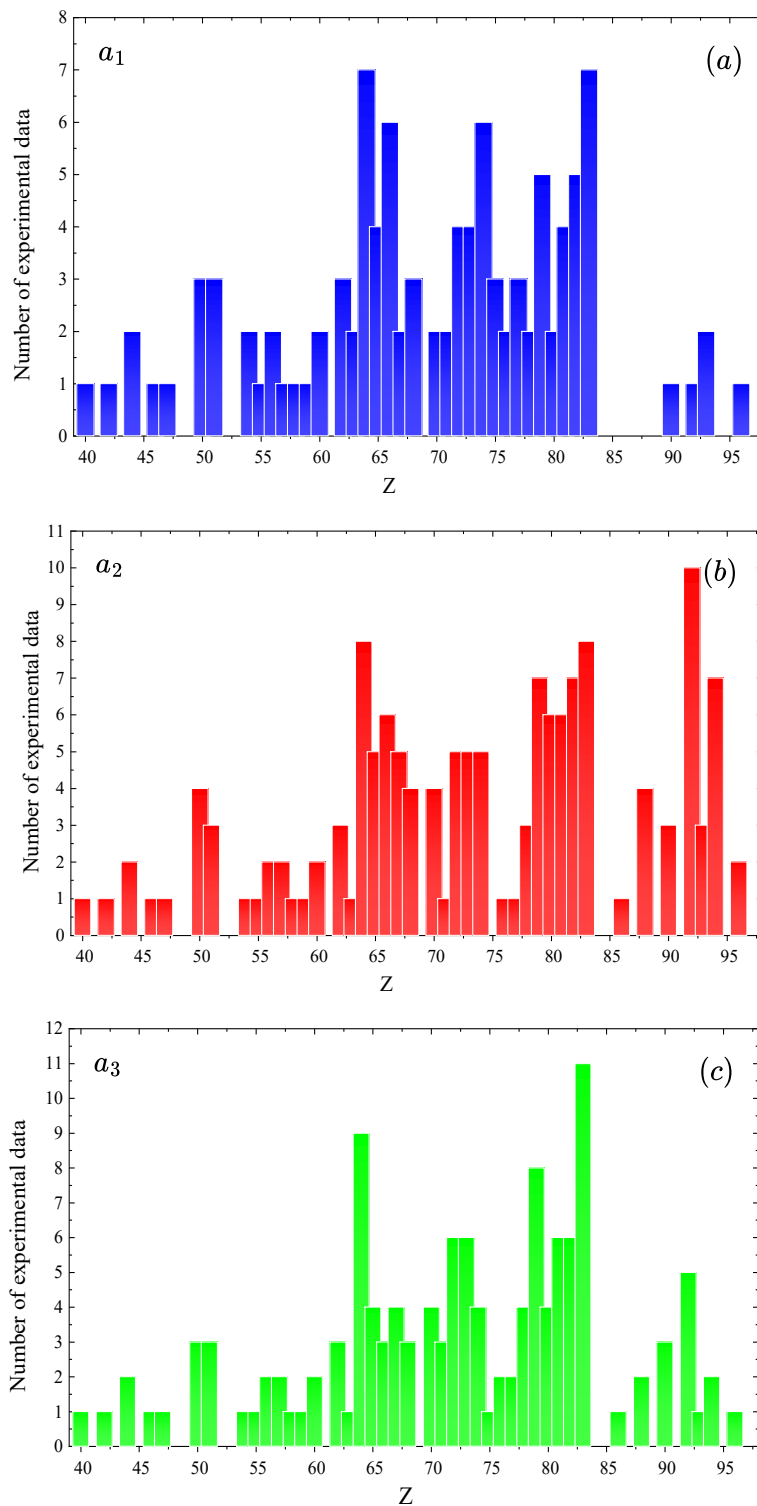


Figure 2-2: Distribution du nombre de valeurs expérimentales de a_1 , a_2 et a_3 en fonction du numéro atomique Z .

La figure (2-3) montre les histogrammes du nombre de valeurs expérimentales rapportées pour f_{12} , f_{23} , f_{13} , F_{123} , et F_1 entre 1955 et 2024, classées par année de publication des travaux originaux. Ces figures nous permettent de constater ce qui suit :

- Il existe 139 valeurs expérimentales pour les probabilités de transition de Coster-Kronig f_{12} , soit une moyenne de 3 valeurs par an. Au cours des cinq premières décennies, la moyenne était de 1 valeur par an. En 1988, sept valeurs ont été publiées. En 2001, les valeurs ont augmenté de manière exponentielle jusqu'à atteindre un pic en 2003. En 2004, les valeurs ont fortement chuté, puis ont légèrement augmenté. De plus, les points de données ont augmenté en 2016 et 2017, puis ont diminué de 12 à 1 point entre 2018 et 2024.
- Pour f_{23} , il existe 222 valeurs expérimentales, avec une moyenne de 7.13 valeurs par an. Les valeurs expérimentales ont ensuite augmenté jusqu'à atteindre un pic en 1975 avec 20 points de données. Entre 1976 et 2024, la disponibilité des données expérimentales a diminué. À l'exception de 1988, 2001, 2001, 2016, 2017 et 2021, il y avait 58 valeurs expérimentales.
- De 1955 à 2024, la publication de données expérimentales pour f_{13} a été modeste. La première décennie a été marquée par peu de données, suivie d'une légère augmentation en 1965. Après cela, peu d'activité a été observée, les données fluctuant d'une année à l'autre. Le début des années 1970 a connu une croissance modeste, atteignant son apogée en 1975. Les années 1980 ont montré une certaine augmentation des données expérimentales, mais une activité irrégulière. Entre 1995 et 2024, il y a eu une augmentation significative de l'activité de publication, qui a atteint son apogée en 2001. Après 2004, le rythme de publication des valeurs a diminué, avec des fluctuations continues, puis une augmentation significative en 2016 et 2017.
- Pour F_{123} et F_1 le taux de publication sur la période 1955-2024 a été relativement stable. La deuxième période, de 1976 à 2010, a connu des fluctuations importantes. Les années 1988 et 2001, qui ont connu des augmentations importantes du nombre de valeurs, représentent la plus grande partie des valeurs totales. La dernière période, de 2012 à 2024, a connu des augmentations significatives certaines années, comme 2016 et 2021, tandis que les valeurs ont diminué d'autres années. Le nombre moyen de valeurs pendant cette période était de 4.3, soit un chiffre supérieur à celui des deux périodes précédentes.

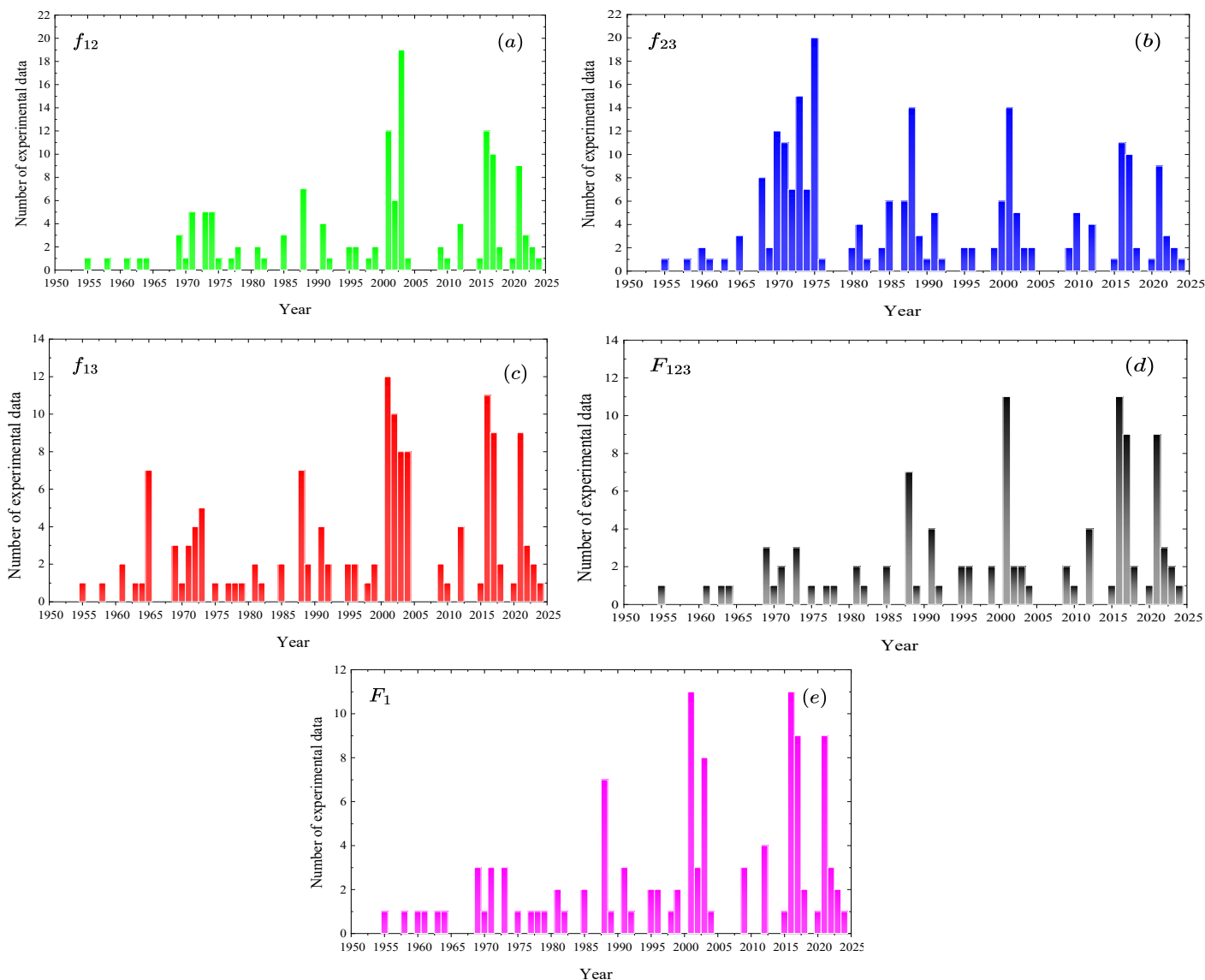


Figure 2-3: Histogramme des données pour les valeurs expérimentales de f_{12} , f_{23} , f_{13} , F_{123} et F_1 telles que compilées dans ce travail.

La figure (2-4) présente les histogrammes du nombre de valeurs expérimentales rapportées pour a_1 entre 1954 et 2024, et pour a_2 et a_3 entre 1955 et 2024. Ces histogrammes sont classés par année de publication des travaux originaux. Cette figure nous permet de constater les éléments suivants :

- La distribution des données expérimentales a_1 , a_2 , et a_3 est étudiée sur une période de 70 ans. Au cours des premières années (1954-1981), l'activité éditoriale était faible, la plupart des années n'enregistrant qu'une seule publication. Nous avons observé une légère augmentation de l'activité en 1969 et 1973. Entre 1985 et 1999, l'activité éditoriale s'est poursuivie à un rythme lent, avec une légère augmentation en 1988. Au début du XXI^e siècle, une augmentation significative des publications a été enregistrée, principalement grâce aux travaux d'Öz et al. [7] et d'Özdemir [11], reflétant une augmentation marquée de l'activité de recherche à cette époque. Nous observons une fluctuation de l'activité entre 2010 et 2024, avec quelques légères hausses en 2017 et 2021, mais les chiffres ont diminué ces dernières années, avec 2 valeurs publiées en 2023 et une en 2024.

Après le calcul des valeurs moyennes pondérées de (f_{ij}) , (F_{123}) , et (a_i) pour tous les éléments à l'aide de l'équation (2-11), nous avons déterminé les paramètres expérimentaux f_{ij} , F_{123} , F_1 , et a_i pour les transitions Coster-Kronig et Auger, par rapport à leurs valeurs moyennes pondérées correspondantes pour chaque élément. Ces paramètres sont notés :

$$S_{ij} = \frac{(f_{ij})_{\text{Exp}}}{(f_{ij})_{\text{W}}}, ij = 12, 23, 13 \quad (2 - 17)$$

$$R_{123} = \frac{(F_{123})_{\text{Exp}}}{(F_{123})_{\text{W}}} \quad (2 - 18)$$

$$R_1 = \frac{(F_1)_{\text{Exp}}}{(F_1)_{\text{W}}} \quad (2 - 19)$$

$$T_i = \frac{(a_i)_{\text{Exp}}}{(a_i)_{\text{W}}}, i = 1, 2, 3 \quad (2 - 20)$$

Ces rapports ont ensuite été représentés graphiquement en fonction du numéro atomique Z , comme illustré dans la Figure (2-5) pour f_{12} , Figure (2-6) pour f_{23} , Figure (2-7) pour f_{13} , Figure (2-8) pour F_{123} , Figure (2-9) pour F_1 , Figure (2-10) pour a_1 , Figure (2-11) pour a_2 , et Figure (2-12) pour a_3 .

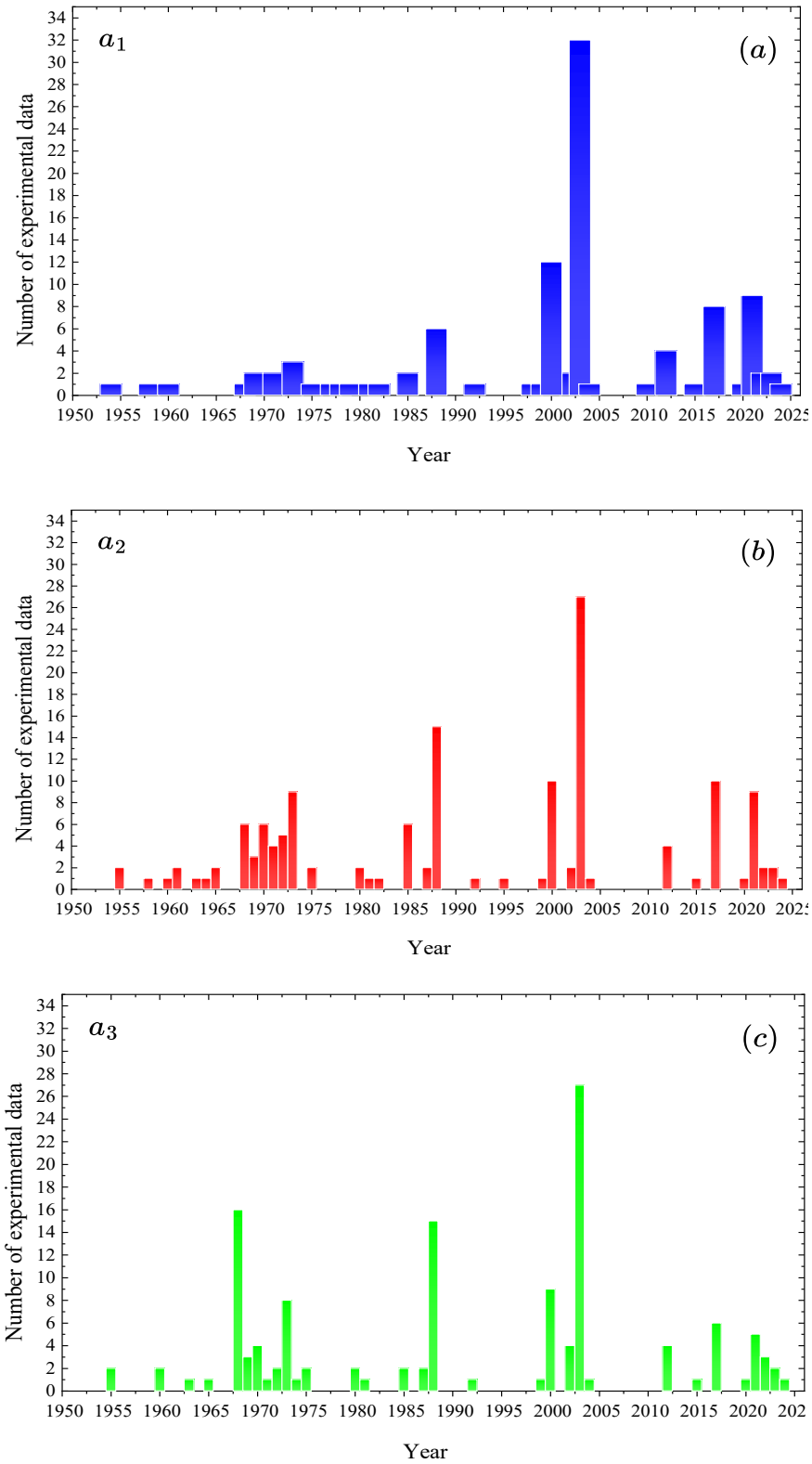


Figure 2-4: Histogramme des données pour les valeurs expérimentales de a_1 , a_2 et a_3 telles que compilées dans ce travail.

La grande majorité des valeurs de S_{12} comprises entre (0.3 et 1.2) sont proches de l'unité. En outre, il existe une différence notable entre certaines valeurs $(f_{12})_{Exp}$ et les valeurs pondérées. Cela est particulièrement évident dans les recherches de Ménesguen et al. [44] pour $_{50}Sn$, Tousset et Moussa [45] pour $_{83}Bi$, Rao et al. [46] pour $_{82}Pb$, Jitschin et al. [47] pour $_{47}Ag$, et Öz et al. [8] pour le $_{74}W$ et le $_{79}Au$. Les autres se situent dans la fourchette (1.2-2.54). En ce qui concerne f_{23} , qui a été étudié dans différents articles, la plupart des valeurs de S_{23} se situent dans une fourchette étroite comprise entre [0.43, 1.64]. Mais certaines valeurs ne se situent pas dans cette fourchette. Par exemple, les valeurs élevées de $_{79}Au$ Päschrke et al. [48], $_{81}Tl$ Sujkowski et Melin, [33], Byrne et al. [31], $_{66}Dy$ (Bansal et al. [3] ; Kaur et al. [49] ; Öz et al. [8] ; Şimşek, [50]), et $_{88}Ra$ Gill et al., [51]. En ce qui concerne f_{13} , il convient de noter que les valeurs de S_{13} varient entre 0.57 et 1.44, ce qui reflète généralement en bon accord avec les valeurs de référence. Cependant, certaines valeurs se situent en dehors de cette plage, comme les valeurs élevées de Ménesguen et al. [44] et Bansal et al. [3] pour le $_{62}Sm$, Sorensen et al. [52] pour le $_{28}Ni$, qui dépassent la fourchette acceptable. Certaines valeurs très faibles, telles que celles de Guerra et al. [5] pour le $_{28}Ni$, constituent également des écarts inhabituels. Presque toutes les valeurs de R_{123} et R_1 ont tendance à se situer entre [0.71 et 1.7].

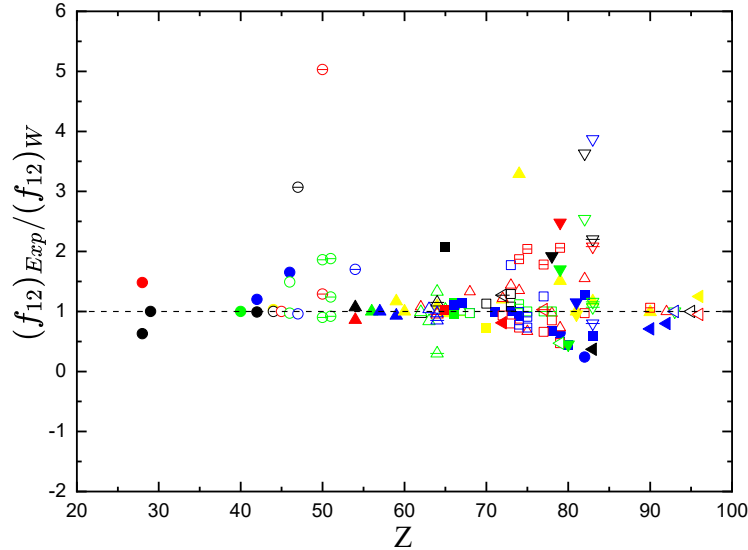


Figure 2-5: La distribution de $S_{12} = \frac{(f_{12})_{Exp}}{(f_{12})_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1955 à 2024). ●: [52]; ●: [53]; ●: [65]; ●: [54]; ●: [66]; ○: [67]; ○: [68]; ○: [59]; ○: [69]; ⊖: [47]; ⊖: [44]; ⊖: [70]; ⊖: [71]; ▲: [72]; ▲: [73]; ▲: [74]; ▲: [75]; ▲: [8]; △: [76]; △: [77]; △: [3]; △: [78]; △: [79]; △: [80]; △: [81]; △: [82]; ■: [83]; ■: [84]; ■: [49]; ■: [85]; ■: [86]; □: [87]; □: [55]; □: [88]; □: [89]; □: [90]; □: [91]; □: [92]; □: [58]; ▼: [93]; ▼: [48]; ▼: [94]; ▼: [33]; ▼: [95]; ▼: [46]; ▼: [96]; ▼: [60]; ▼: [45]; ▼: [97]; ▼: [43]; ▼: [30]; ▼: [98]; ▼: [99]; ▼: [62]; ▼: [29]; ▼: [153]; ▼: [42]; ▼: [56]; ▼: [41]; ▼: [100]; ▼: [101].

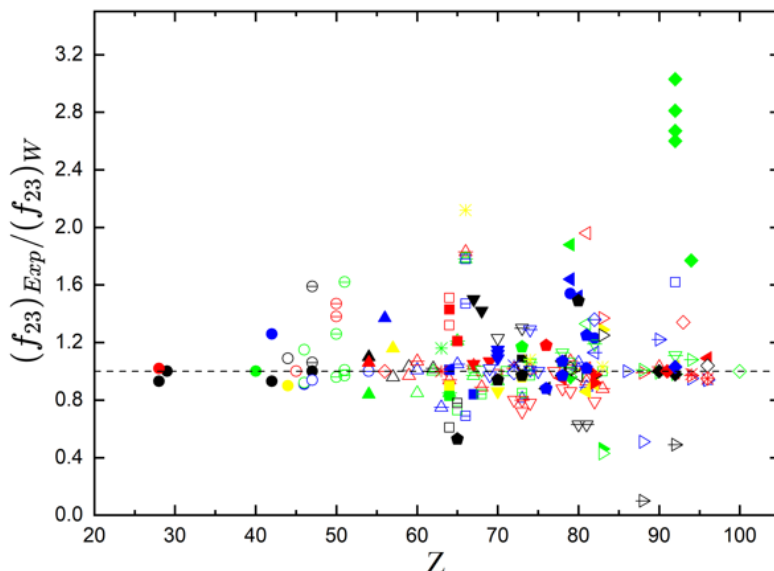


Figure 2-6: La distribution de $S_{23} = \frac{(f_{23})_{Exp}}{(f_{23})_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1978 à 2023). ●: [52]; ●: [53]; ●: [65]; ●: [54]; ●: [66]; ○: [67]; ○: [68]; ○: [59]; ○: [69]; ⊖: [47]; ⊖: [44]; ⊖: [70]; ⊖: [72]; ▲: [71]; ▲: [102]; ▲: [73]; ▲: [27]; ▲: [103]; △: [75]; △: [104]; △: [105]; △: [106]; △: [76]; △: [8]; △: [3]; △: [34]; ■: [107]; ■: [38]; ■: [108]; ■: [79]; □: [81]; □: [82]; □: [83]; □: [109]; ⊞: [84]; ⊞: [110]; ⊞: [85]; ⊞: [49]; ▼: [35]; ▼: [111]; ▼: [112]; ▼: [113]; ▼: [86]; ▼: [87]; ▼: [55]; ▼: [88]; ▼: [114]; ▼: [115]; ▼: [90]; ▼: [116]; ▼: [58]; ◀: [117]; ◀: [48]; ◀: [64]; ◀: [39]; ◀: [33]; ◀: [95]; ◀: [118]; ◀: [60]; ▶: [26]; ▶: [119]; ▶: [97]; ▶: [46]; ▶: [120]; ▷: [30]; ▷: [121]; ▷: [99]; ▷: [122]; ▷: [51]; ▷: [123]; ▷: [124]; ▷: [125]; ◆: [62]; ◆: [28]; ◆: [31]; ◆: [126]; ◆: [127]; ◆: [29]; ◆: [153]; ◆: [100]; ⊕: [128]; ⊕: [74]; ⊕: [129]; ⊕: [130]; * [131]; * [132]; * [133]; * [50]; * [134]; * [135]; * [37]; * [136]; * [137]; * [138].

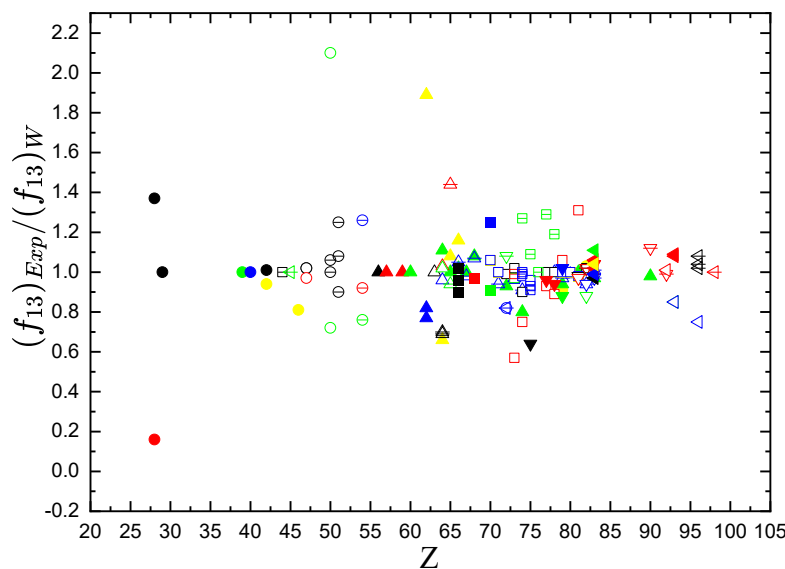


Figure 2-7: La distribution de $S_{13} = \frac{(f_{13})_{Exp}}{(f_{13})_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1955 à 2024). ●: [52]; ●: [53]; ●: [139]; ●: [65]; ●: [54]; ○: [69]; ○: [47]; ○: [44]; ○: [67]; ⊖: [70]; ⊖: [71]; ⊖: [72]; ⊖: [73]; ▲: [74]; ▲: [75]; ▲: [8]; ▲: [76]; ▲: [3]; △: [78]; △: [79]; △: [80]; △: [81]; △: [82]; △: [83]; △: [84]; △: [85]; ■: [49]; ■: [88]; ■: [86]; ■: [87]; ■: [140]; □: [55]; □: [141]; □: [142]; ⊞: [66]; ⊞: [90]; ⊞: [92]; ⊞: [58]; ▼: [143]; ▼: [144]; ▼: [48]; ▼: [56]; ▼: [33]; ▼: [40]; ▼: [95]; ▼: [46]; ▼: [96]; ▼: [60]; ▼: [145]; ▼: [133]; ▼: [97]; ◀: [43]; ◀: [30]; ◀: [98]; ◀: [99]; ◀: [45]; ◀: [126]; ◀: [41]; ◀: [29]; ◀: [146]; ◀: [153]; ◀: [68]; ◀: [100].

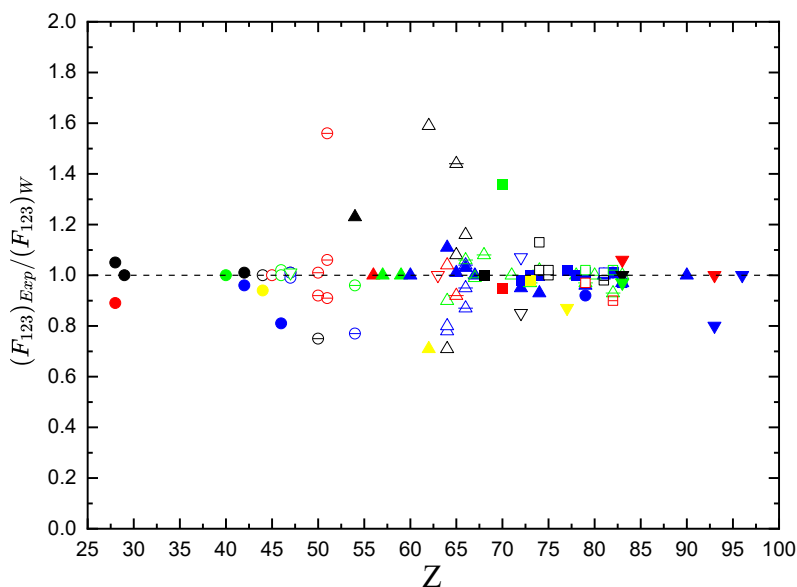


Figure 2-8: La distribution de $R_{123} = \frac{(F_{123})_{Exp}}{(F_{123})_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1955 à 2023). ●: [52]; ●: [53]; ●: [65]; ●: [54]; ●: [66]; ○: [67]; ○: [68]; ○: [59]; ○: [47]; ⊖: [44]; ⊖: [70]; ⊖: [71]; ⊖: [72]; ▲: [73]; ▲: [74]; ▲: [75]; ▲: [8]; ▲: [76]; △: [3]; △: [79]; △: [81]; △: [82]; △: [83]; △: [84]; △: [85]; △: [49]; ■: [88]; ■: [86]; ■: [87]; ■: [55]; ■: [90]; □: [58]; □: [48]; □: [56]; □: [33]; ⊞: [95]; ⊞: [46]; ⊞: [60]; ⊞: [97]; ▼: [43]; ▼: [30]; ▼: [99]; ▼: [29]; ▼: [89]; ▼: [100]; ▼: [78]; ▼: [69]; ▼: [133].

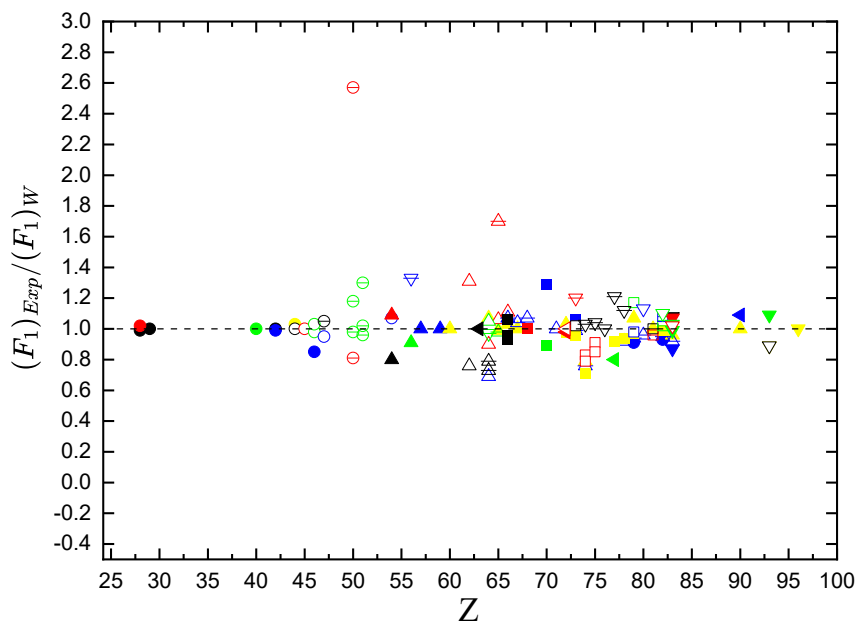


Figure 2-9: La distribution de $R_1 = \frac{(F_1)_{Exp}}{(F_1)_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1955 à 2024). ●: [52]; ●: [53]; ●: [65]; ●: [54]; ●: [66]; ○: [67]; ○: [68]; ○: [59]; ○: [69]; ⊖: [47]; ⊖: [44]; ⊖: [70]; ⊖: [71]; ▲: [72]; ▲: [73]; ▲: [74]; ▲: [75]; ▲: [8]; ▲: [76]; △: [3]; △: [79]; △: [81]; △: [82]; △: [83]; △: [84]; △: [85]; ■: [49]; ■: [88]; ■: [86]; ■: [87]; ■: [55]; □: [90]; □: [58]; □: [48]; □: [56]; ⊞: [33]; ⊞: [95]; ⊞: [46]; ⊞: [60]; ▼: [97]; ▼: [43]; ▼: [30]; ▼: [99]; ▼: [29]; ▼: [41]; ▼: [98]; ▼: [96]; ▼: [147]; ▼: [92]; ▼: [142]; ▼: [80]; ▼: [27]; ▼: [78]; ▼: [100]; ▼: [89]; ▼: [62]; ▼: [133].

La plupart des valeurs T_1 et T_2 sont raisonnablement proches de l'unité (variant entre [0.61 et 1.53]). En outre, il est important de souligner que certaines valeurs $(a_1)_{Exp}$ diffèrent considérablement à partir des valeurs pondérées. Cela est particulièrement évident dans les travaux de Kolbe et Hönicke [54], Werner et Jitschin [55], et Jitschin et al. [56] pour ^{79}Au et ^{78}Pt , et dans Rich [57] pour ^{81}Tl .

De plus, la plupart des valeurs T_2 associées a_2 se situent dans la plage attendue, mais certaines valeurs élevées et les valeurs très faibles ne se situent pas dans cette plage. Par exemple, les valeurs élevées de Gil et al. [51]. D'autre part, nous observons également certaines valeurs très

faibles (Byrne et al. [31]). La plupart des valeurs de T_3 sont étroitement regroupées autour de l'unité, variant généralement entre [0.8 et 1.1], la fourchette attendue sur la base des valeurs pondérées.

Ces valeurs de $(a_3)_{Exp}$ reflètent une excellente concordance avec les données. En examinant de plus près les valeurs moyennes pondérées, la plupart des points de données expérimentales pour les rendements Auger s'alignent étroitement sur la valeur moyenne pondérée pour tous les éléments.

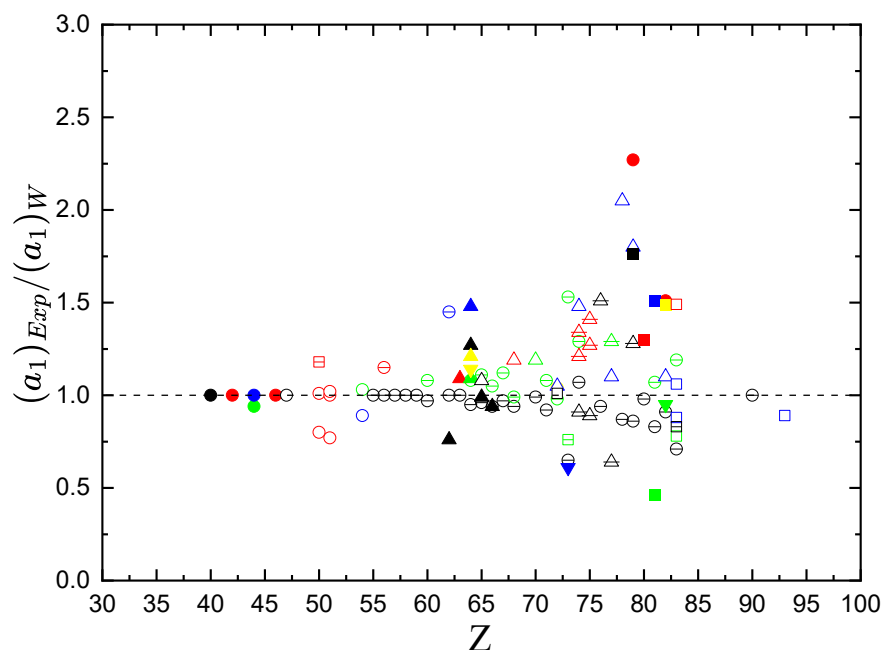


Figure 2-10: La distribution de $T_1 = \frac{(a_1)_{Exp}}{(a_1)_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1958 à 2024). ●: [65]; ●: [54]; ●: [66]; ●: [67]; ●: [100]; ○: [47]; ○: [70]; ○: [71]; ○: [73]; ⊖: [11]; ⊖: [74]; ⊖: [7]; ⊖: [76]; ▲: [3]; ▲: [78]; ▲: [79]; ▲: [81]; ▲: [82]; ▲: [84]; ▲: [88]; ▲: [86]; ▲: [55]; ▲: [92]; ▲: [58]; ▲: [89]; ■: [56]; ■: [147]; ■: [57]; ■: [95]; ■: [148]; □: [96]; □: [97]; □: [43]; □: [30]; ⊞: [98]; ⊞: [44]; ⊞: [90]; ▼: [29]; ▼: [60]; ▼: [89]; ▼: [80].

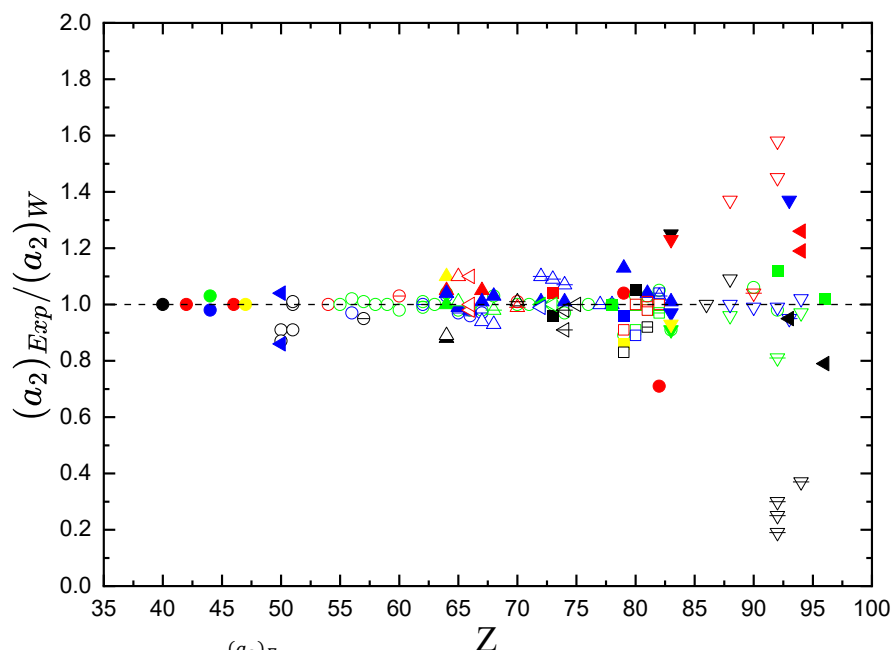


Figure 2-11: La distribution de $T_2 = \frac{(a_2)_{Exp}}{(a_2)_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1955 à 2024). ●: [65]; ●: [54]; ●: [66]; ●: [67]; ●: [47]; ○: [70]; ○: [71]; ○: [11]; ○: [74]; ⊖: [103]; ⊖: [105]; ⊖: [76]; ⊖: [3]; ▲: [38]; ▲: [79]; ▲: [7]; ▲: [81]; △: [82]; △: [83]; △: [84]; △: [35]; △: [113]; △: [86]; △: [88]; △: [55]; ■: [115]; ■: [90]; ■: [117]; ■: [61]; ■: [48]; □: [56]; □: [112]; □: [147]; □: [64]; ⊞: [57]; ⊞: [95]; ⊞: [46]; ⊞: [60]; ▼: [97]; ▼: [43]; ▼: [120]; ▼: [30]; ▼: [121]; ▼: [122]; ▼: [51]; ▼: [123]; ▼: [124]; ▼: [31]; ▼: [125]; ▼: [126]; ▼: [41]; ◀: [29]; ◀: [32]; ◀: [100]; ◀: [44]; ◀: [49]; ◀: [135]; ◀: [133]; ◀: [58]; ▲: [138].

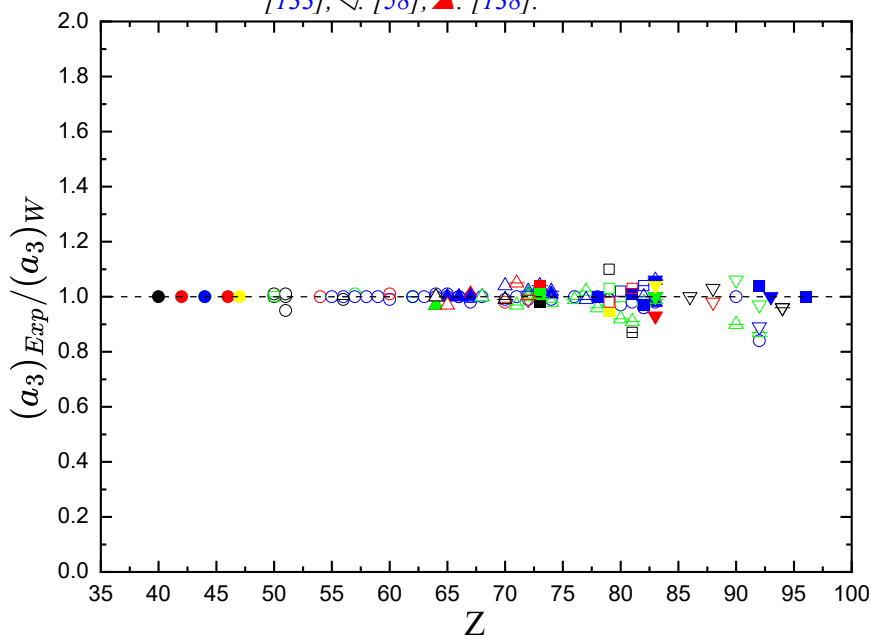


Figure 2-12: La distribution de $T_3 = \frac{(a_3)_{Exp}}{(a_3)_W}$ pour chaque référence dont sont extraites les bases de données selon le numéro atomique Z (de 1955 à 2024). ●: [65]; ●: [54]; ●: [66]; ●: [67]; ●: [47]; ○: [70]; ○: [71]; ○: [103]; ○: [11]; ⊖: [74]; ⊖: [105]; ⊖: [76]; ⊖: [3]; ▲: [38]; ▲: [79]; ▲: [7]; ▲: [81]; △: [82]; △: [83]; △: [133]; △: [135]; △: [86]; △: [149]; △: [150]; △: [55]; ■: [115]; ■: [123]; ■: [90]; ■: [117]; ■: [61]; □: [48]; □: [56]; □: [112]; □: [64]; ⊞: [147]; ⊞: [95]; ⊞: [81]; ⊞: [46]; ▼: [43]; ▼: [97]; ▼: [151]; ▼: [30]; ▼: [121]; ▼: [122]; ▼: [123]; ▼: [62]; ▼: [126]; ▼: [100]; ▲: [138].

Le tracé de l'écart signé en multiples de l'écart type combiné a été calculé à l'aide de la formule (12-13), qui correspond à la divergence des points expérimentaux individuels par rapport à la moyenne pondérée associée à l'élément. La distribution des équations (1-12) et (1-15) en fonction du z le nombre atomique Z est représentée dans les figures (2-13) à (2-20). Les valeurs de $z_{i,ISD}$ et la moyenne \bar{z}_{ISD} dans les huit bases de données sont également indiquées. Sur la base de l'incertitude expérimentale publiée pour certains éléments atomiques, l'analyse de ces figures montre une dispersion beaucoup plus importante que prévu.

- Par exemple, si l'on examine la figure (2-13) pour f_{12} , où les valeurs de $z_{i,ISD}$ varient de -5.89 [58] à 5.72 [59], Il est important de noter que certaines valeurs $z_{i,ISD}$ semblent être significativement différentes des autres et se situent en dehors de la plage.
- Ensuite, en passant à la figure (2-14) pour f_{23} , nous remarquons que les valeurs de l'écart type interne $z_{i,ISD}$ varient de -6,27 pour l'élément ${}_{66}\text{Dy}$ [49] à 7.16 pour l'élément ${}_{82}\text{Pb}$ [60], et que la majorité des valeurs $z_{i,ISD}$ se situent dans la plage $[-3, 3.5]$, où les valeurs \bar{z}_{ISD} varient entre $[-0.83$ et $3.4]$.
- Après analyse de la figure (2-15) pour f_{13} , il apparaît clairement que les valeurs varient entre -0.48 et 0.54, et pour l'écart type interne combiné, la plupart des valeurs se situent dans la fourchette $[-2.4, 2]$. Certaines valeurs semblent différer significativement des autres se situent en dehors de cette plage. Ensuite, en se concentrant sur F_{123} , et F_1 , nous remarquons que la valeur de $z_{i,ISD}$, pour ${}_{73}\text{Ta}$ [55] est très éloignée de la plage $[-5.3, 3.7]$.
- Pour a_1, a_2 , et a_3 , les valeurs moyennes de z semblent varier entre -1.62 et 3.05, d'après l'incertitude expérimentale publiée pour certains éléments atomiques.
- Une analyse de ces chiffres montre une certaine dispersion, et pour l'écart type interne regroupé, la majorité des valeurs pour a_1 se situent dans la plage $[-5.52, 4.74]$, à l'exception des données de [55] pour ${}_{74}\text{W}$, ${}_{78}\text{Pt}$ et ${}_{79}\text{Au}$, et de [7] pour ${}_{83}\text{Bi}$ et ${}_{74}\text{W}$.
- Presque toutes les valeurs de l'écart type $z_{i,ISD}$ pour a_2 se situent dans la plage $[-5, 3.34]$, à l'exception des données de [7] pour ${}_{79}\text{Au}$, [43] pour ${}_{83}\text{Bi}$ [44,49] pour ${}_{50}\text{Sn}$. De même,
- Pour a_3 dans la plage $[-2.06, 3.25]$, à l'exception des données de [38] pour ${}_{64}\text{Gd}$, [11] pour ${}_{92}\text{U}$ et [61] pour l'élément ${}_{79}\text{Au}$, où les valeurs de \bar{z}_{ISD} varient de -2.47 à 3.05. Les figures (2-21) à (2-28) présentent la distribution des équations (2-13) et (2-16) en fonction du numéro atomique Z , avec les valeurs $z_{i,ESD}$ et \bar{z}_{ESD} également incluses.

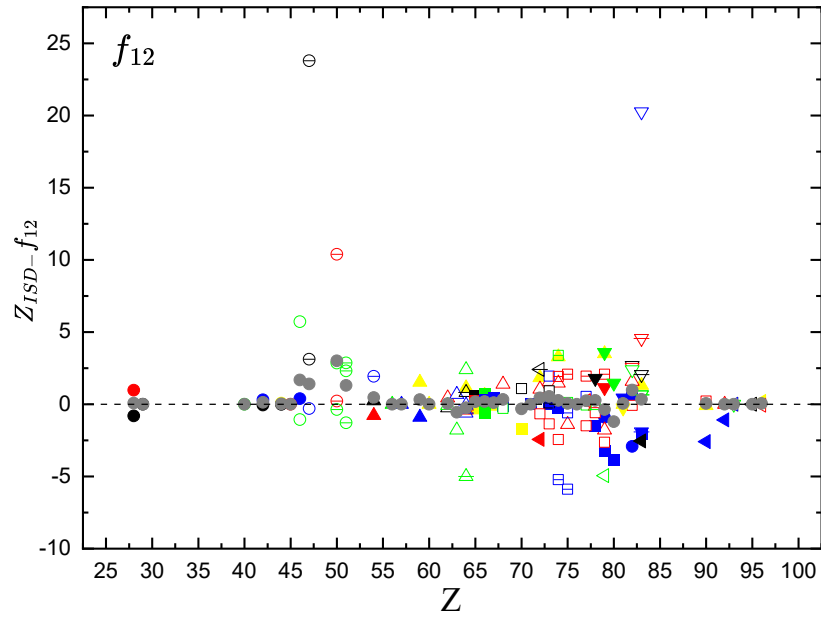


Figure 2-13: Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour f_{12} en fonction du numéro atomique Z .

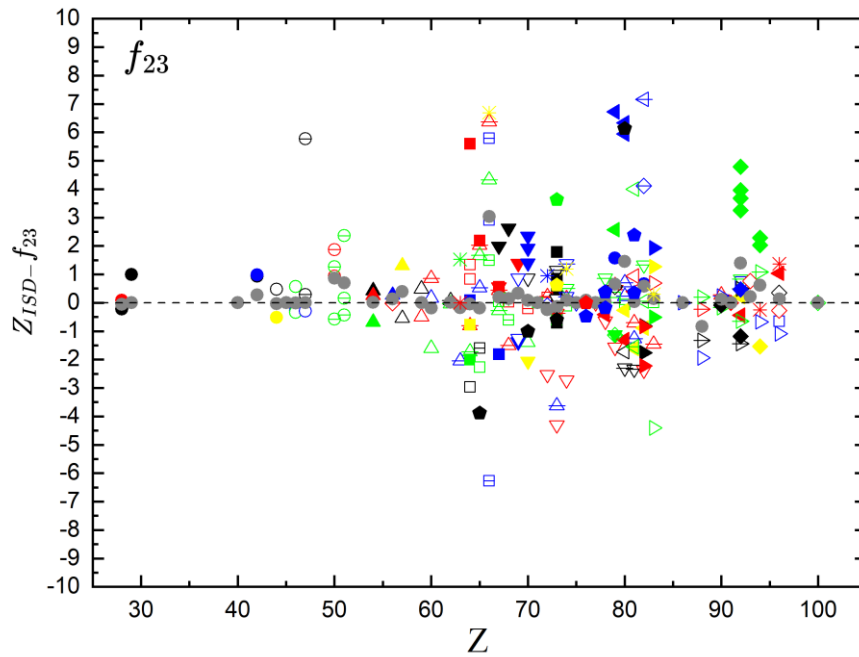


Figure 2-14: Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour f_{23} en fonction du numéro atomique Z .

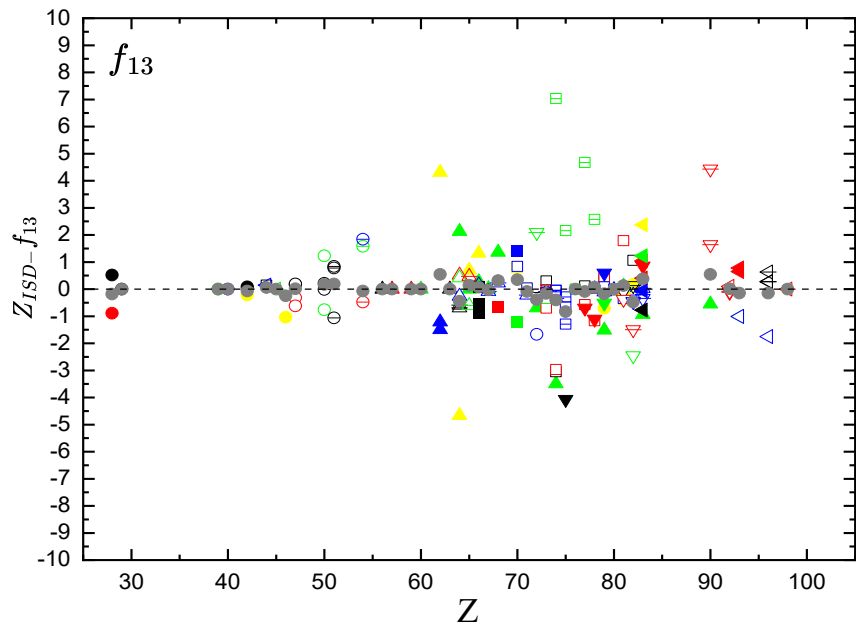


Figure 2-15: Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour f_{13} en fonction du numéro atomique Z

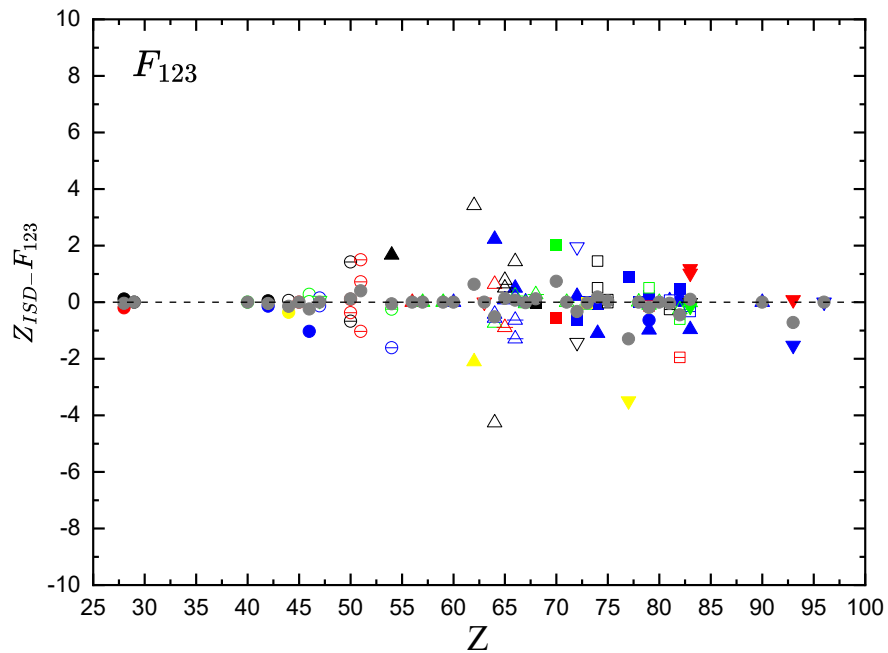


Figure 2-16: Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour F_{123} en fonction du numéro atomique Z

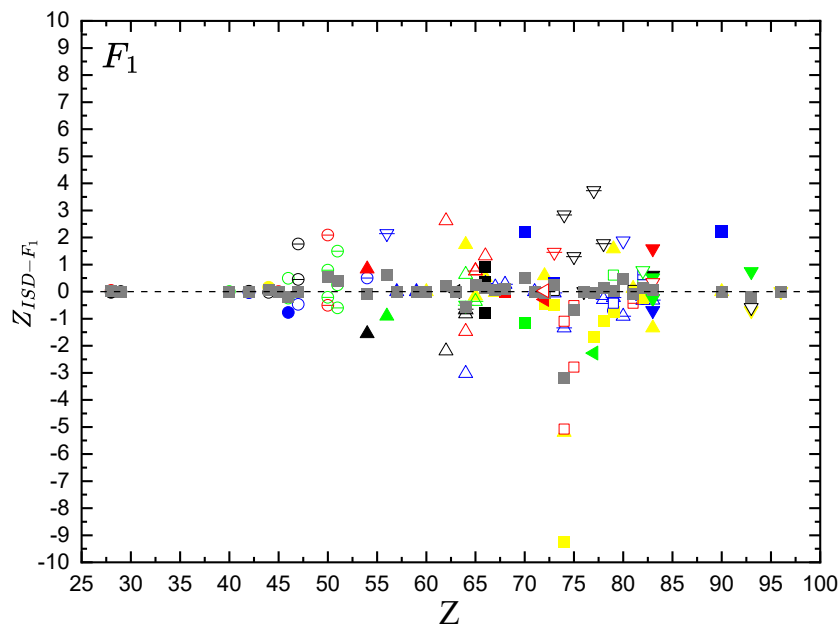


Figure 2-17: Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour F_1 en fonction du numéro atomique Z

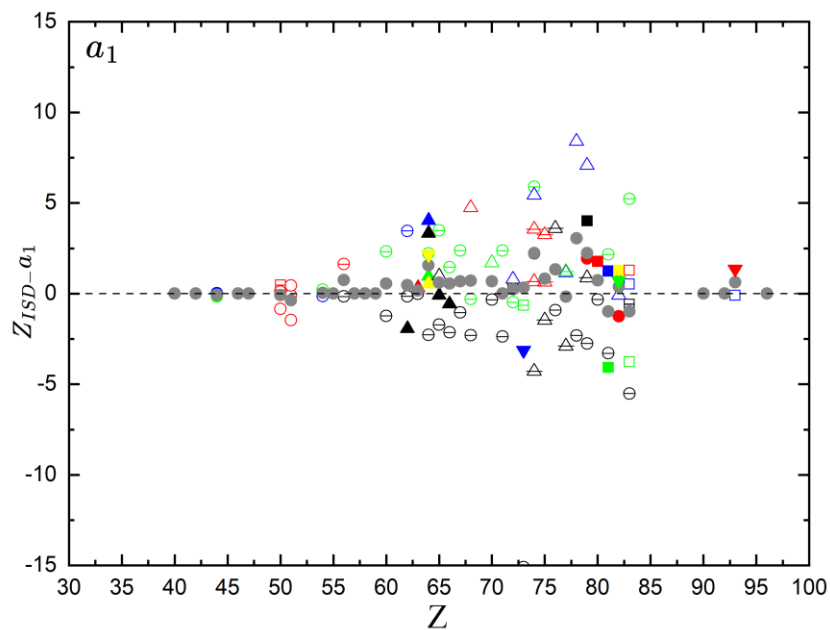


Figure 2-18: Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour a_1 en fonction du numéro atomique Z

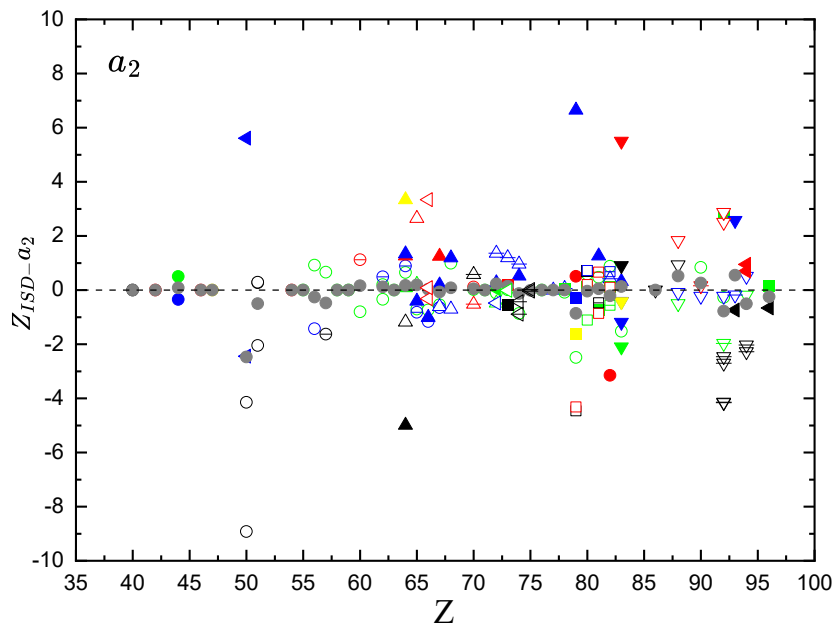


Figure 2-19: Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour a_2 en fonction du numéro atomique Z

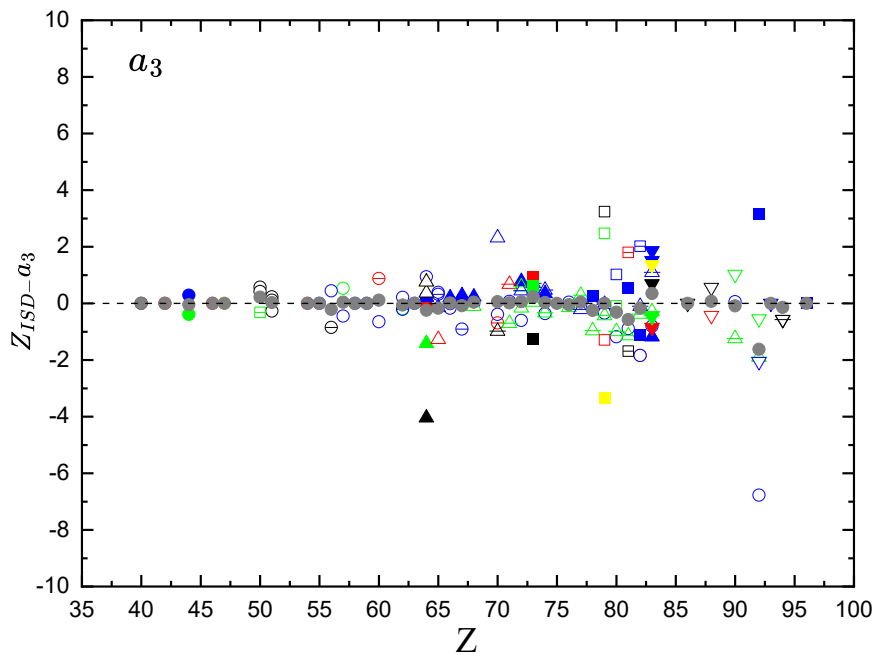


Figure 2-20: Distribution des équations (2-12) et (2-15) pour a_3 en fonction du numéro atomique Z .

Après l'analyse des figures (2-21) à (2-28) nous remarquons que :

- Pour f_{12} , certaines valeurs semblent diverger considérablement en se situant dans l'intervalle $[-4.86, 2.6]$, telles que ${}_{90}\text{Th}$ [62], ${}_{47}\text{Ag}$ [47], ${}_{50}\text{Sn}$ [44], ${}_{82}\text{Pb}$ [45], ${}_{83}\text{Bi}$ [57], ${}_{51}\text{Sb}$ [63].
- Pour f_{23} , les valeurs de l'écart type externe $z_{i,\text{ESD}}$ varient de -4.24 pour l'élément ${}_{73}\text{Ta}$ [55] à 6.17 pour l'élément ${}_{79}\text{Au}$ [64], presque toutes les valeurs se situent dans la plage $[-2, 2]$, et pour \bar{z}_{ESD} la plage est comprise entre 0 et 0.2.
- Nous pouvons voir que la plupart des valeurs $z_{i,\text{ESD}}$ pour f_{13} se situent dans la plage $[-4, 4]$. Les valeurs $z_{i,\text{ESD}}$ pour F_{123} et F_1 varient entre -3.88 et 2.09. Après avoir analysé ces figures ((2-26)-(2-28)), nous remarquons que pour a_1 les valeurs de l'écart type externe $z_{i,\text{ESD}}$ varient entre -3.5 pour l'élément ${}_{81}\text{Tl}$ [57] et 4,42 pour ${}_{74}\text{W}$ [55].
- Pour a_2 , il est clair que la majorité des valeurs de $z_{i,\text{ESD}}$ se situent dans la plage $[-4.6, 4.46]$. Ensuite, si l'on se penche sur a_3 , on remarque que les valeurs de $z_{i,\text{ESD}}$ sont étroitement liées et sont dans la plage $[-3.8, 3.01]$ et que pour \bar{z}_{ESD} , elles couvrent la plage de 0 à 0.12.

Les expérimentateurs signalent des incertitudes qui peuvent ne pas être évaluées de manière exhaustive ou efficace. Les données tirées de la littérature peuvent contenir des contributions sujettes à des erreurs non reconnues à une ou plusieurs énergies d'excitation. La dispersion plus importante que prévu révélée par la présente enquête à grande échelle, qui est quantifiée par des valeurs standard supérieures à deux ou trois, indique que cette incertitude est probablement présente. Sur la base des données présentées dans les figures (2-13) à (2-28), il semble que pour aider à résoudre les incohérences et améliorer la qualité des orientations expérimentales, il sera nécessaire de disposer de nouvelles données expérimentales de haute qualité, en plus d'évaluations des incertitudes mieux décrites et plus précises. D'autre part, l'incertitude déclarée pourrait ne pas être évaluée de manière cohérente; elle pourrait également être sous-estimée et inclure une contribution erronée qui n'est pas reconnue. Pour résoudre cette question, il est nécessaire de collecter des données expérimentales nouvelles et améliorées afin d'étudier cette option.

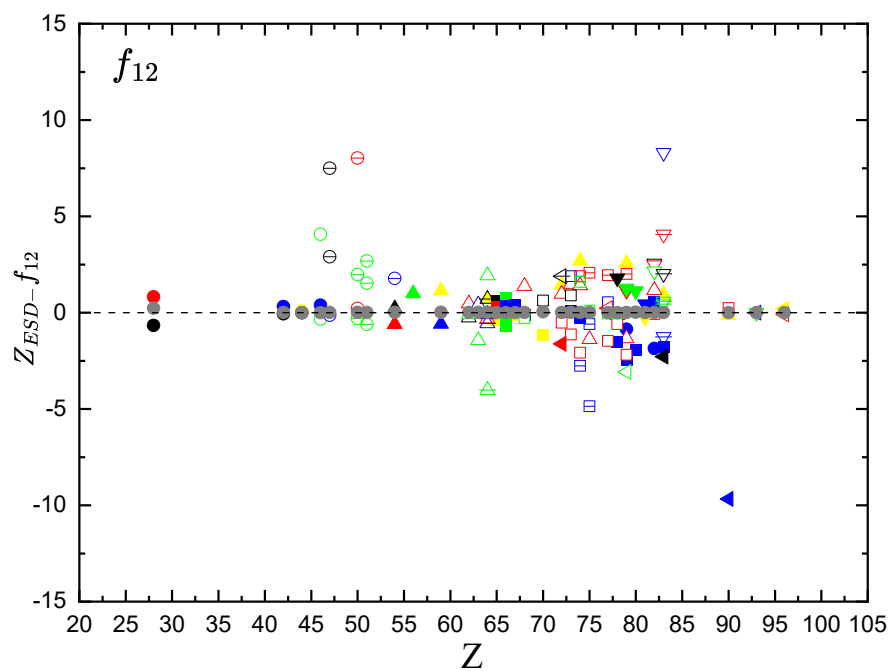


Figure 2-21: Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour f_{12} en fonction du numéro atomique Z .

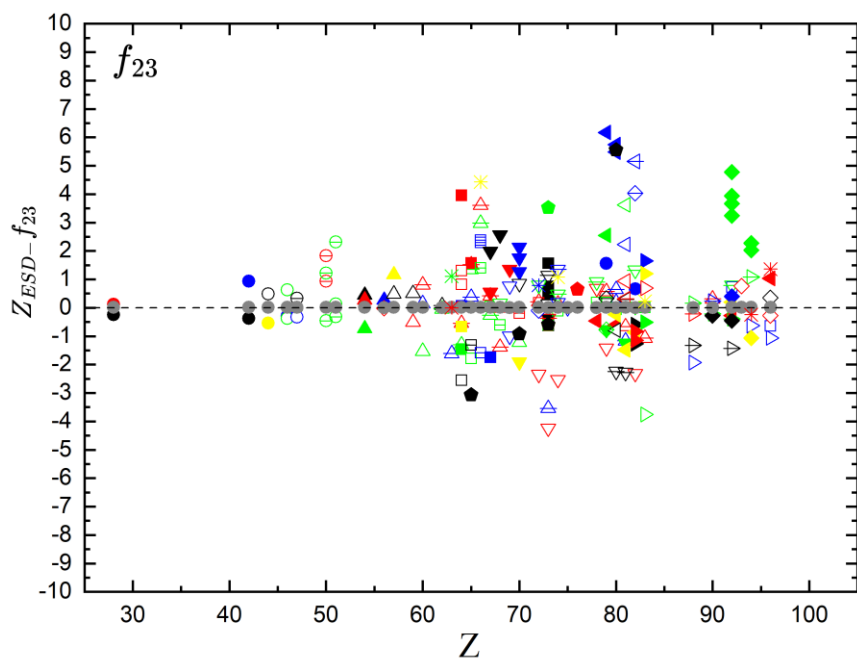


Figure 2-22: Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour f_{23} en fonction du numéro atomique Z .

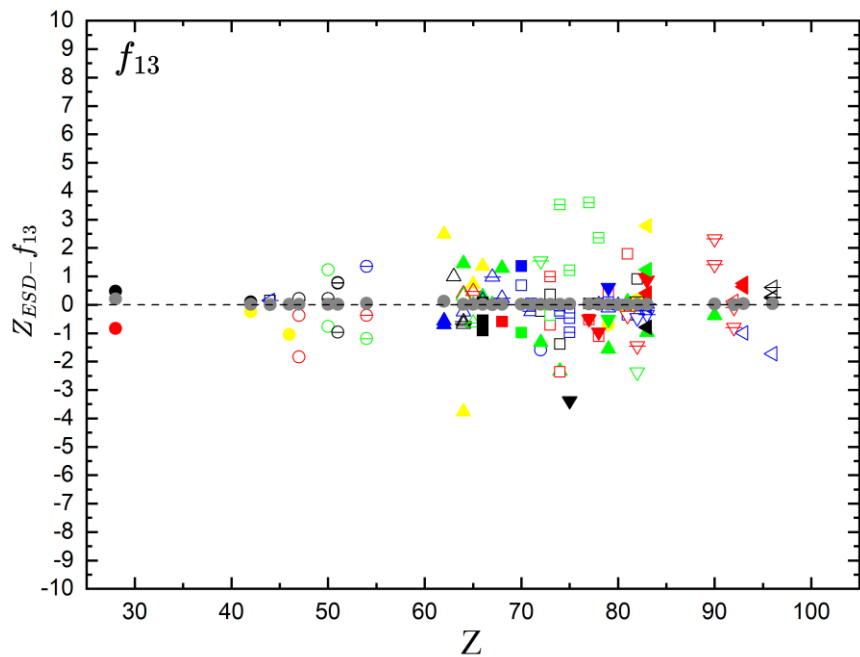


Figure 2-23: Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour f_{13} en fonction du numéro atomique Z .

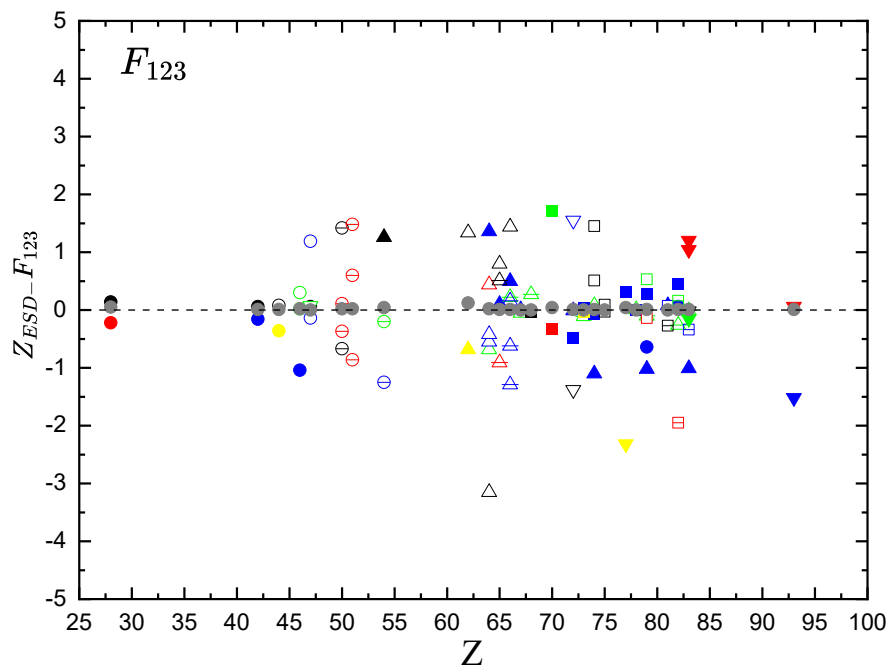


Figure 2- 24: Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour F_{123} en fonction du numéro atomique Z .

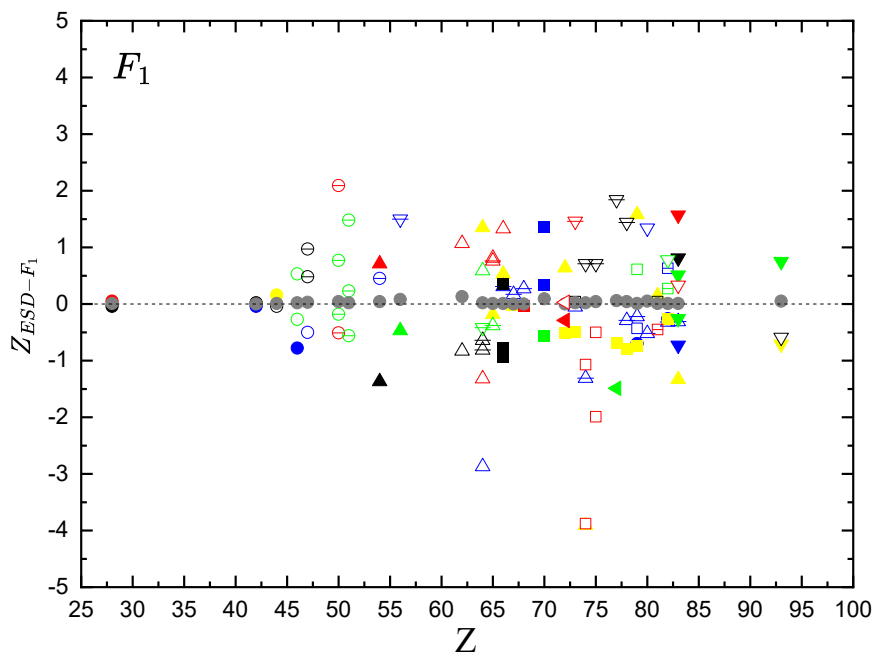


Figure 2-25: Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour F_1 en fonction du numéro atomique Z .

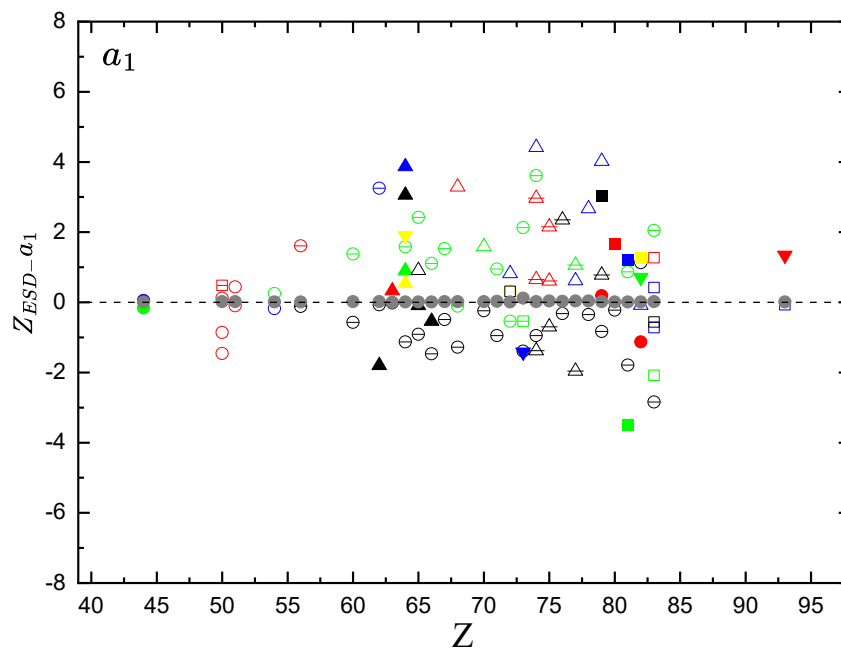


Figure 2-26: Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour a_1 en fonction du numéro atomique Z .

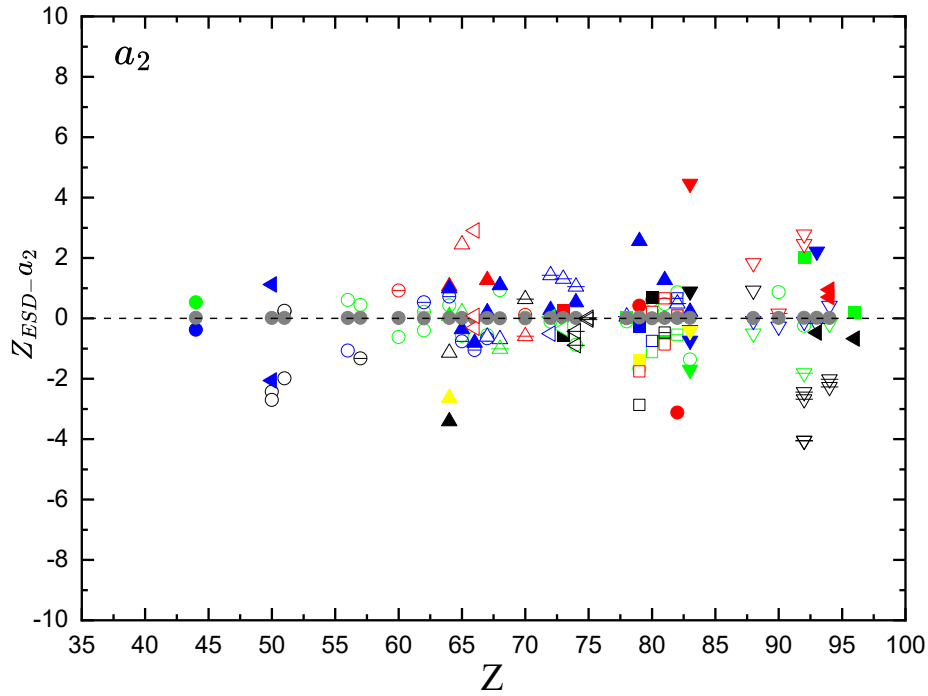


Figure 2-27: Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour a_2 en fonction du numéro atomique Z .

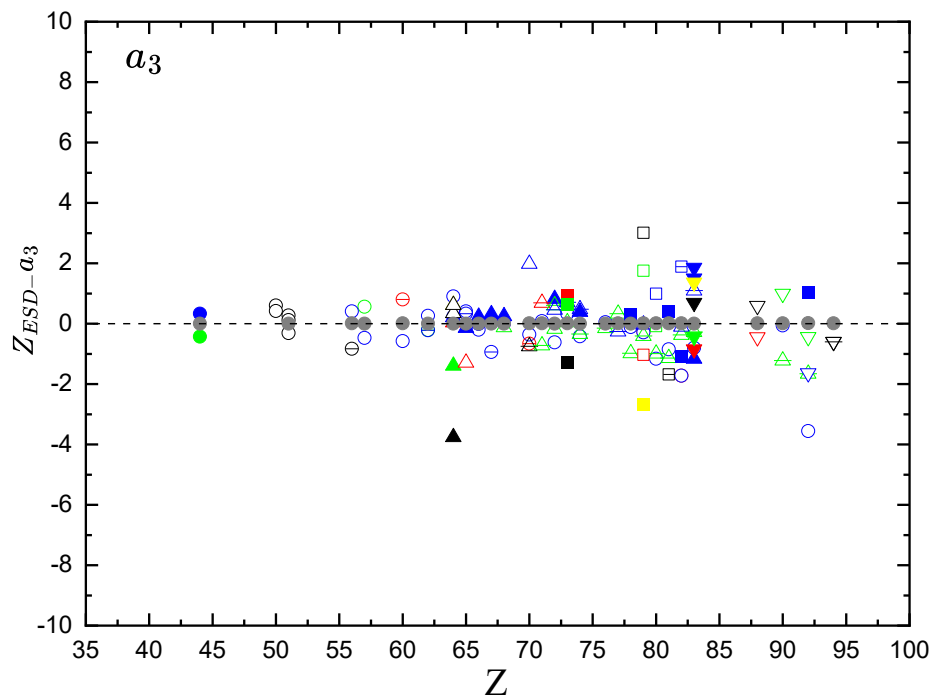


Figure 2-28: Distribution des équations (2-13) et (2-16) pour a_3 en fonction du numéro atomique Z .

2.3 Références

- [1] Chen, M. H., Crasemann, B., & Mark, H. (1981). *Phys. Rev. A*, 24(1), 177–182.
- [2] Fink, R. W., Jopson, R. C., Mark, H., & Swift, C. D. (1966). *Rev. Mod. Phys.* 38, 513–540.
- [3] Bansal, H., Tiwari, M. K., & Mittal, R. (2017). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 199, 93–102.
- [4] Bambynek, W., Crasemann, B., Fink, R. W., Freund, H.-U., Mark, H., Swift, C. D., & Rao, P. V. (1972). *Rev. Mod. Phys.* 44, 716–813.
- [5] Chattarji, D. (1976). *Academic Press*, London, New York, San Francisco, 12.
- [6] Krause, M. O. (1979). *J. Phys. Chem. Ref. Data* 8, 307–327.
- [7] Öz, E., Özdemir, Y., Ekinci, N., Ertuğrul, M., Şahin, Y., & Erdoğan, H. (2000). *Spectrochim. Acta B*. 55, 1869–1877.
- [8] Öz, E., Ekinci, N., Özdemir, Y., Ertuğrul, M., Şahin, Y., & Erdoğan, H. (2001). *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 34, 631–638.
- [9] Campbell, J. L. (2003a). *At. Data Nucl. Data Tables* 85, 291–315.
- [10] Campbell, J. L. (2009). *At. Data Nucl. Data Tables* 95, 115–124.
- [11] Özdemir, Y. (2003). *Radiat. Phys. Chem.* 66, 317–322.
- [12] Kahoul, A., Abassi, A., Deghfel, B., Nekkab, M. (2011). *Radiat. Phys. Chem.* 80, 369–377.
- [13] Kahoul, A., Aylikci, V., Deghfel, B., Aylikci, N. K., & Nekkab, M. (2014). *J. Quant. Spectr. Rad. Transf.* 145, 205–213.
- [14] Aylikçi, V., Kahoul, A., Aylikçi, N. Kup, Tıraşoğlu, E., & Karahan, Đ. H. (2015). *Spectrosc. Lett.* 48, 331–342.
- [15] Daoudi, S., Kahoul, A., Sahnoune, Y., Deghfel, B., Kasri, Y., Khalfallah, F., Aylikci, V., Aylikci, N. Kup, Medjadi, D. E., & Nekkab, M. (2015). *J. Korean Phys. Soc.* 67, 1537–1543.
- [16] Sahnoune, Y., Kahoul, A., Kasri, Y., Deghfel, B., Medjadi, D. E., Khalfallah, F., Daoudi, S., Aylikçi, V., Aylikçi, N. K., & Nekkab, M. (2016). *Radiat. Phys. Chem.* 125, 227–251.
- [17] Sahnoune, Y., Kahoul, A., Daoudi, S., Sampaio, J. M., Aylikci, N. K., Aylikci, V., Aylikci, V., Kasri, Y., Deghfel, B., Marques, J. P., & Medjadi, D. E. (2020). *Radiat. Phys. Chem.* 166, 108495.
- [18] Daoudi, S., Kahoul, A., Aylikci, N. K., Sampaio, J. M., Marques, J. P., Aylikci, V., Deghfel, B. (2020). *At. Data Nucl. Data Tables* 132, 101308–40.
- [19] Hamidani, A., Daoudi, S., Kahoul, A., Sampaio, J. M., Marques, J. P., Parente, F., Croft, S., Favalli, A., Aylikci, N. Kup, Aylikci, V., Kasri, Y., & Meddough, K. (2023). *At. Data Nucl. Data Tables* 149, 101549–58.
- [20] Meddough, K., Daoudi, S., Kahoul, A., Sampaio, J. M., Marques, J. P., Parente, F., Aylikci, N. Kup, Aylikci, V., Kasri, Y., & Hamidani, A. (2023). *Radiat. Phys. Chem.* 202, 110481.
- [21] Amari, K., Kahoul, A., Sampaio, J. M., Daoudi, S., Marques, J. P., Parente, F., Hamidani, A., Croft, S., Favalli, A., Kasri, Y., Zidi, A., & Berkani, B. (2024). *At. Data Nucl. Data Tables* 159, 101662.
- [22] Zidi, A., Kahoul, A., Marques, J. P., Daoudi, S., Sampaio, J. M., Parente, F., Hamidani, A., Croft, S., Favalli, A., Kasri, Y., Amari, K., & Berkani, B. (2024). *At. Data Nucl. Data Tables* 157, 101645.
- [23] Berkani, B., Kahoul, A., Sampaio, J. M., Daoudi, S., Marques, J. P., Parente, F., Hamidani, A., Croft, S., Favalli, A., Kasri, Y., Zidi, A., & Amari, K. (2024). *Radiat. Phys. Chem.* 225, 112106.
- [24] Kahoul, A., Aylikci, V., Aylikci, N. K., Cengiz, E., & Apaydın, G. (2012). *Radiation Physics and Chemistry*, 81(4), 713–727.
- [25] Bé, M. M., Chechev, V. P., & Pearce, A. (2015). *Metrologia* 52, S66–S72.
- [26] Campbell, J. L., McGhee, P. L., Gingerich, R. R., Ollerhead, R. W., & Maxwell, J. A. (1984). *Phys. Rev. A* 30, 161–169.
- [27] Burford, A. O., & Haynes, S. K. (1958). *Bull. Am. Phys. Soc.* 3, 208.

- [28] Price, R. E., Mark, H., & Swift, C. D. (1968). *Phys. Rev.* 176, 3–10.
- [29] Karttunen, E. I. (1971). *Doctoral Dissertation, Georgia Institute of Technology.*
- [30] Weksler, M., & De Pinho, A. G. (1973). *Phys. Rev. A* 8, 303–309.
- [31] Byrne, J., Gelletly, W., Ross, M. A., & Shaikh, F. (1968). *Phys. Rev.* 170, 81–88.
- [32] Salgueiro, L., Ferreira, J. G., Park, J. J. H., & Ross, M. A. S. (1961). *Proc. Phys. Soc.* 77, 657.
- [33] Sykowski, Z., & Melin, O. (1961). *Ark. Fys.* 20, 193.
- [34] Veluri, V. R., Wood, R. E., Palms, J. M., & Rao, P. V. (1974). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 7, 1486.
- [35] Holmes, C. P., & Kostroun, V. O. (1970). *Bull. Am. Phys. Soc.* 15, 561.
- [36] Burhop, E. H. S., & Asaad, W. N. (1972). *Adv. At. Mol. Phys.* 8, 163–278.
- [37] Mohan, S. (1970c). *PhD thesis, Georgia Institute of Technology.*
- [38] Douglas, D. G. (1972). *Can. J. Phys.* 50, 1697–1704.
- [39] Nix, D. W., & Fink, R. W. (1975). *Z. Phys. A* 273, 305–311.
- [40] Persson, L., & Sujkowski, Z. (1961). *Ark. Fys.* 19, 309.
- [41] Akalaev, G. G., Vatanov, N. A., & Samoilov, P. S. (1964). *Bull. Acad. Sci. USSR, Phys. Ser.* 28, 1158.
- [42] McGeorge, J. C., & Fink, R. W. (1971a). *Bull. Am. Phys. Soc.* 16, 847.
- [43] Freund, H. U., & Fink, R. W. (1969). *Phys. Rev.* 178, 1952–1960.
- [44] Ménesguen, Y., Lépy, M.-C., Sampaio, J. M., Marques, J. P., Parente, F., Guerra, M., & Beckhoff, B. (2017). *X-Ray Spectrom.* 47, 341–351.
- [45] Tousset, J., & Moussa, A. (1958). *At. Data Nucl. Data Tables* 19, 39–40.
- [46] Rao, P. V., Wood, R. E., Palms, J. M., & Fink, R. W. (1969). *Phys. Rev.* 178, 1997–2005.
- [47] Jitschin, W., Stötzel, R., Papp, T., & Sarkar, M. (1999). *Phys. Rev. A* 59, 3408–3414.
- [48] Päsche, R. (1963). *Z. Phys.* 176, 143–154.
- [49] Kaur, R., Kumar, A., Czyżycki, M., Migliori, A., Karydas, A. G., & Puri, S. (2017). *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 407, 210–216.
- [50] Şimşek, Ö. (2000). *Phys. Rev. A* 62, 052517.
- [51] Gil, F. B., Barroso, A., Soares, J. C., & Ferreira, J. G. (1972). *Phys. Rev. A* 5, 536–541.
- [52] Sorensen, S. L., Schaphorst, S. J., Whitfield, S. B., Crasemann, B., & Carr, R. (1991). *Phys. Rev. A* 44, 350–357.
- [53] Guerra, M., Sampaio, J. M., Parente, F., Indelicato, P., Hönicke, P., Müller, M., Beckhoff, B., Marques, J. P., & Santos, J. P. (2018). *Phys. Rev. A* 97, 042501.
- [54] Kolbe, M., Hönicke, P., Müller, M., & Beckhoff, B. (2012). *Phys. Rev. A* 86, 042512.
- [55] Werner, U., & Jitschin, W. (1988). *Phys. Rev. A* 38, 4009–4018.
- [56] Jitschin, W., Materlik, G., Werner, U., & Funke, P. (1985). *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 18, 1139.
- [57] Risch, K. (1958). *Z. Phys.* 150, 87–98.
- [58] Ayri, V., Kaur, S., Kumar, A., Czyżycki, M., Karydas, A. G., & Puri, S. (2021). *J. Anal. At. Spectrom.* 36, 380–389.
- [59] Cao, W., Hoszowska, J., Dousse, J.-Cl., Kayser, Y., Kavčič, M., Žitnik, M., & Słabkowska, K. (2009). *Phys. Rev. A* 80, 012512.
- [60] Tan, M., Braga, R. A., Fink, R. W., & Rao, P. V. (1982). *Phys. Scr.* 25, 539–544.
- [61] Haynes, S. K., & Achor, W. T. (1955). *J. Phys. Radium* 16, 635–637.
- [62] Kumar, A., Puri, S., Mehta, D., Garg, M. L., & Singh, N. (2002a). *X-Ray Spectrom.* 31, 103–108.
- [63] Kaur, S., Ayri, V., Kumar, A., Czyżycki, M., Karydas, A. G., & Puri, S. (2021). *X-Ray Spectrom.* 51, 15–25.
- [64] Palms, J. M., Wood, R. E., Rao, P. V., & Kostroun, V. O. (1970). *Phys. Rev. C* 2, 592–594.

- [65] Kolbe, M., & Hönicke, P. (2015). *X-Ray Spectrom.* 44, 217–220.
- [66] Wauschkuhn, N., Frenzel, K., Beckhoff, B., & Hönicke, P. (2023). *J. Anal. At. Spectrom.* 38, 1301–1306.
- [67] Hönicke, P. (2023). *New J. Phys.* 25, 073012.
- [68] Markevich, D., & Budick, B. (1981). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 14, 1553–1563.
- [69] Sorensen, S. L., Carr, R., Schaphorst, S. J., Whitfield, S. B., & Crasemann, B. (1989). *Phys. Rev. A* 39, 6241–6246.
- [70] Kaur, S., Ayri, V., Kumar, A., Czyzycki, M., Karydas, A. G., & Puri, S. (2021). *Metrologia* 58, 035002.
- [71] Hippler, R., McGregor, I., Aydinol, M., & Kleinpoppen, H. (1981). *Phys. Rev. A* 23, 1730–1736.
- [72] Jitschin, W., Stötzel, R., Papp, T., Sarkar, M., & Doolen, G. D. (1995). *Phys. Rev. A* 52, 977–983.
- [73] Cao, W., Dousse, J.-Cl., Hoszowska, J., Žitnik, M., Kavčič, M., & Bučar, K. (2010). *Phys. Rev. A* 81, 012501.
- [74] Barrea, R. A., Pérez, C. A., & Sánchez, H. J. (2004). *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 215, 308–316.
- [75] Barrea, R. A., Pérez, C. A., & Sánchez, H. J. (2003). *Spectrochim. Acta B* 58, 51–62.
- [76] Stötzel, R., Werner, U., Sarkar, M., & Jitschin, W. (1992). *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 25, 2295–2307.
- [77] Sögüt, Ö. (2003). *Instrum. Sci. Technol.* 31, 85–92.
- [78] Veluri, V. R., & Rao, P. Venugopala. (1977). *Z. Phys. A* 280, 317–319.
- [79] Dincklage, R.-D., & Hay, H. J. (1985). *Z. Phys. A: At. Nuclei* 321, 375–380.
- [80] Papp, T., Campbell, J. L., & Raman, S. (1998). *Phys. Rev. A* 58, 3537–3543.
- [81] Ménesguen, Y., & Lépy, M. (2020). *X-Ray Spectrom.* 49, 596–602.
- [82] Kayser, Y., Hönicke, P., Wansleben, M., Wählich, A., & Beckhoff, B. (2022). *X-Ray Spectrom.* 52, 235–246.
- [83] McGeorge, J. C., Freund, H. U., & Fink, R. W. (1970). *Nucl. Phys. A* 154, 526–538.
- [84] Sanchez, H. J., Perez, R. D., Rubio, M., & Castellano, G. (1995). *X-Ray Spectrom.* 24, 221–225.
- [85] Kaur, G., Bansal, H., Tiwari, M. K., & Mittal, R. (2016). *Pramana – J. Phys.* 87, 33.
- [86] McNelles, L. A., Campbell, J. L., Geiger, J. S., Graham, R. L., & Merritt, J. S. (1975). *Can. J. Phys.* 53, 1349–1359.
- [87] Sanchez, H. J., Perez, R. D., Rubio, M., & Castellano, G. (1996). *Radiat. Phys. Chem.* 48, 701–706.
- [88] Barrea, R. A., Pérez, C. A., & Sánchez, H. J. (2002a). *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 35, 3167.
- [89] Indira, P. A., Palms, J. M., & Rao, P. Venugopala. (1978). *Z. Phys. A* 284, 33–37.
- [90] Wauschkuhn, N., Frenzel, K., Beckhoff, B., & Hönicke, P. (2022). *J. Anal. At. Spectrom.* 38, 197–203.
- [91] Salgueiro, L., Ramos, M. T., Escrivao, M. L., Martins, M. C., & Ferreira, J. G. (1974). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 7, 342–348.
- [92] Borovoi, N. A., Ishchenko, R. N., & Shiyanovskii, V. I. (2003). *Opt. Spectrosc.* 95, 525–528.
- [93] Marques, M. I., Martins, M. C., & Ferreira, J. G. (1985). *Phys. Scr.* 32, 107–110.
- [94] Ertuğrul, M. (2002b). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 72, 567–574.
- [95] Wood, R. E., Palms, J. M., & Rao, P. V. (1969). *Phys. Rev.* 187, 1497–1503.
- [96] Rao, P. V., Palms, J. M., & Wood, R. E. (1971). *Phys. Rev. A* 3, 1568–1575.
- [97] Ross, M. A. S., Cochran, A. J., Hughes, J., & Feather, N. (1955). *Proc. Phys. Soc. A* 68, 612.
- [98] Campbell, J. L. (2003b). *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 36, 3219–3231.

- [99] Ménesguen, Y., Lépy, M.-C., Sampaio, J. M., Marques, J. P., Parente, F., Guerra, M., & Santos, J. P. (2018). *Metrologia* 55, 15.
- [100] Wauschkuhn, N., Gundlach, H., & Hönicke, P. (2024). *New J. Phys.* 26, 0330.
- [101] Lindner, M., Gunnink, R., & Nagle, R. J. (1987). *Phys. Rev. C* 36, 1132–1137.
- [102] Semmes, P. B., Braga, R. A., Griffin, J. C., & Fink, R. W. (1987). *Phys. Rev. C* 35, 749.
- [103] Douglas, D. G. (1973). *Can. J. Phys.* 51, 1519–1523.
- [104] Ertuğrul, M. (2002a). *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 125, 69–73.
- [105] Tan, M., Braga, R. A., Fink, R. W., & Rao, P. V. (1988). *Phys. Scr.* 37, 62–65.
- [106] Catz, A. L., & Meyers, M. F. (1990). *Phys. Rev. A* 41, 271–276.
- [107] Zalutsky, M. R., & Macias, E. S. (1975b). *Phys. Rev. A* 11, 71–74.
- [108] Gnade, B. E., Braga, R. A., & Fink, R. W. (1981). *Phys. Rev. C* 23, 580.
- [109] McGeorge, J. C., Mohan, S., & Fink, R. W. (1971b). *Phys. Rev. A* 4, 1317–1318.
- [110] Simsek, Ö. (2000b). *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 33, 3773–3778.
- [111] Douglas, D. G. (1976). *Can. J. Phys.* 54, 1124–1128.
- [112] Campbell, J. L., & McGhee, P. L. (1987). *J. Phys. Colloques* 48, C9-597.
- [113] Mohan, S., Freund, H. U., Fink, R. W., & Rao, P. V. (1970b). *Phys. Rev. C* 1, 254–259.
- [114] Catz, A. L. (1989). *Phys. Rev. A* 40, 4977–4982.
- [115] Rao, P. V., & Crasemann, B. (1965). *Phys. Rev.* 139, A1926–A1929.
- [116] Gupta, S., Mittal, V.K., & Mittal, R. (2010). *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 43, 235002.
- [117] McGhee, P. L., & Campbell, J. L. (1988). *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 21, 2295.
- [118] Tolea, F. (1974). *PhD thesis, Georgia Institute of Technology.*
- [119] Catz, A. L. (1987). *Phys. Rev. A* 36, 3156.
- [120] Fink, R. W., & Freund, H. U. (1971). *Phys. Rev. C* 3, 1701.
- [121] Maio, A., Ribeiro, J.P., Barroso, A., & Gil, F.B. (1975). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 8, 1216–1218.
- [122] McGeorge, J. C., Nix, D. W., & Fink, R. W. (1973). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 6, 573.
- [123] Campbell, J. L., McNelles, L. A., Geiger, J. S., Graham, R. L., & Merritt, J. S. (1973). *Can. J. Phys.* 52, 488–498.
- [124] Johnston, P. N. (1991). *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 56, 70–73.
- [125] Ferreira, J. G., Soares, J. C., Barroso, A., & Gil, F. B. (1971). *J. Phys. A: Gen. Phys.* 4, 679.
- [126] McGeorge, J. C., Nix, D. W., Fink, R. W., & Landrum, J. H. (1972b). *Z. Phys. A* 255, 335–347.
- [127] Nix, D. W., & Fink, R. W. (1976). *Z. Phys. A* 278, 239–240.
- [128] Santra, S., Mitra, D., Sarkar, M., Bhattacharya, D., Sen, P., & Mandal, A. C. (2004). *Phys. Rev. A* 69, 024701.
- [129] Dunford, R. W., Kanter, E. P., Krässig, B., Southworth, S. H., Young, L., Mokler, P. H., & Petrov, I. D. (2006). *Phys. Rev. A* 74, 062502.
- [130] Wood, R. E., Palms, J. M., & Rao, P. V. (1972). *Phys. Rev. A* 5, 11–13.
- [131] Zalutsky, M. R., & Macias, E. S. (1975a). *Phys. Rev. A* 11, 1093–1096.
- [132] Zalutsky, M. R., & Macias, E. C. (1973). *Bull. Am. Phys. Soc.* 18, 635.
- [133] Barrea, R. A., Pérez, C. A., & Sánchez, H. J. (2002b). *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 57, 999–1008.
- [134] Şimşek, Ö. (2001). *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 173, 269–274.
- [135] Mohan, S., Fink, R. W., Wood, R. E., Palms, J. M., & Rao, P. V. (1970a). *Z. Phys.* 239, 423–428.
- [136] Mohan, S., Fink, R. W., Wood, R. E., Palms, J. M., & Rao, P. V. (1970). *Z. Phys.* 239, 423.
- [137] McGeorge, J. C., Mohan, S., & Fink, R. W. (1971b). *Phys. Rev. A* 4, 1317–1318.
- [138] Gnade, B. E., Braga, R. A., & Fink, R. W. (1980). *Phys. Rev. A* 21, 2025–2032.

- [139] Jitschin, W., Grosse, G., & Röhl, P. (1989). *Phys. Rev. A* 39, 103–109.
- [140] Sharma, M., Singh, P., Puri, S., Mehta, D., & Singh, N. (2004). *Phys. Rev. A* 69, 032501.
- [141] Ferreira, J. G., Costa, M. O., Gonçalves, M. I., & Salgueiro, L. (1965). *J. Phys.* 26, 5–8.
- [142] Indira, P. A., Unus, I. J., Lee, R. S., & Rao, P. Venugopala. (1979). *Z. Phys. A* 290, 245–249.
- [143] Salgueiro, M. A., Campos, M. A., & Ferreira, J. G. (1965). *Portugal Phys.* 4, 131.
- [144] Singh, P., Kumar, A., Mehta, D., Singh, K. P., & Singh, N. (2002). *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 196, 261–267.
- [145] Kumar, A., Puri, S., Mehta, D., Garg, M. L., & Singh, N. (2002b). *X-Ray Spectrom.* 31, 103–108.
- [146] McGeorge, J. C., & Fink, R. W. (1972a). *Z. Phys. A* 250, 293–299.
- [147] Nall, B., Baird, M., & Haynes, R. (1960). *Phys. Rev.* 119, 1281.
- [148] Rao, P. Venugopala. (1968). In: Berényi, D. (Ed.), *Proceedings of the Conference on Inner-Shell Ionization Phenomena*, p. 222.
- [149] Gizon, J., Gizon, A., & Valentin, J. (1968). *Nucl. Phys. A* 120, 321–328.
- [150] Price, R. E., Mark, H., & Swift, C. D. (1968). *Phys. Rev.* 176, 3–10.
- [151] K. Risch, Das Auger-Spektrum der LIII-Schale von Wismut, *Z. Phys.* 159 (1960) 89–100.
- [152] Byrne, J., Beattie, R. J. D., Benda, S., & Collingwood, I. (1970). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 3, 1166.
- [153] Freedman, M. S., & Porter, F. T. (1973). *Atlanta Conf. Proc.*, 680.

Chapitre 3

Calcul empirique et relativiste des transitions de Coster-Kronig et Auger

Ces calculs améliorent notre compréhension des transitions non radiatives dans la couche L . Ils valident nos méthodes et affinent les modèles existants, en fournissant des valeurs pour des transitions de Coster-Kronig et Auger dans les éléments difficiles à mesurer expérimentalement. Cette recherche est la première à obtenir ces transitions par des méthodes empiriques. En parallèle, de nouvelles valeurs théoriques ont été calculées pour certains éléments à l'aide de la méthode Multi configuration Dirac-Fock (MCDF), en intégrant les effets relativistes et de électrodynamique quantique (QED). Les études ont montré que les modèles non relativistes, comme le modèle de Hartree-Fock, manquent de précision pour les éléments à numéro atomique élevé, rendant ainsi l'approche relativiste essentielle pour améliorer le calcul et mieux correspondre aux résultats expérimentaux.

3.1. Calcul empirique

3.1.1. Procédure de calcul empiriques des transitions de Coster-Kronig

La base de données des valeurs expérimentales utilisées dans ce travail provient d'une compilation exhaustive récemment publiée par notre groupe, comme décrit dans le chapitre précédent. Dans cette étude, nous avons obtenu les valeurs empiriques des transitions de Coster-Kronig de la couche L , f_{ij} ($ij = 12, 13$, et 23), F_{123} , et F_1 , en fonction du numéro atomique Z , par interpolation directe des données expérimentales, représentées sur la figure 3-1 (a, b, c, d et e).

Dans un premier temps, une valeur empirique du coefficient f_{12} a été déterminée à partir d'un ensemble de données représentant 678 points. De même, le coefficient empirique f_{23} a été calculé pour la première fois à partir de 696 points de données, tandis que 585 points ont été utilisés pour le premier calcul du coefficient empirique f_{13} . En outre, l'ensemble de données expérimentales pour le coefficient F_{123} comprenait 114 points de données, et pour la transition F_1 , 101 points de données ont été utilisés.

Afin de garantir la fiabilité des valeurs empiriques du coefficient Coster-Kronig, nous avons classé l'intervalle des données atomiques pour le coefficient f_{12} en deux groupes selon le numéro atomique Z : la région de faible Z dans l'intervalle $40 \leq Z \leq 47$, et la région de Z moyen et élevé dans l'intervalle $50 \leq Z \leq 96$. De même, pour f_{23} , nous avons divisé l'intervalle en deux groupes de données en fonction du numéro atomique Z : dans le cas $40 \leq Z \leq 90$ et dans le cas $91 \leq Z \leq 96$. Pour f_{13} , F_{123} et F_1 , l'intervalle de données atomiques a été divisée en trois groupes Z , la région à faible $39 \leq Z \leq 47$ pour f_{13} , et $40 \leq Z \leq 47$ pour F_{123} et F_1 , la région Z moyenne $50 \leq Z \leq 74$, et la région Z élevée comprenant $75 \leq Z \leq 98$ pour f_{13} , et $75 \leq Z \leq 93$ pour F_{123} et F_1 . Ce choix a été motivé par la tendance observée de ces valeurs de transition de Krause [1], Puri et al. [2] et McGuire [3].

Nous avons notamment constaté des valeurs manquantes dans l'intervalle $30 \leq Z \leq 40$, ce qui nous a amenés à choisir l'intervalle compris entre ${}_{40}\text{Zr}$ et ${}_{98}\text{Cf}$ pour ces calculs. De plus, nous avons effectué des calculs théoriques couvrant l'intervalle plus large $28 \leq Z \leq 98$. Nous n'avons pas utilisé les valeurs indiquées dans la référence [4] pour l'étain ($Z=50$), car l'une des valeurs était nettement trop élevée par rapport aux autres.

Bien que cela donne lieu à une représentation discontinue, la tendance générale est raisonnablement bien représentée dans la dispersion des données expérimentales, ce qui indique que la structure sous-jacente est authentique.

Notre méthodologie permet donc de saisir les caractéristiques essentielles des données tout en garantissant une description raisonnable et simple sur toute la gamme des numéros atomiques. Les fonctions polynomiales utilisées dans le processus d'ajustement sont les suivantes :

$$(f_{ij}, F_1, F_{123})_{\text{emp}} = \sum_{i=0}^n a_i Z^i = f(Z). \quad (3 - 1)$$

Les modèles ajustés sont représentés par des lignes pleines dans les figures 3-1.

Les coefficients d'ajustement a_i sont résumés dans le tableau 1. L'écart global entre les valeurs empiriques calculées f_{12} , f_{23} , f_{13} , F_{123} , et F_1 et leurs valeurs expérimentales correspondantes est quantifié à l'aide de l'erreur quadratique moyenne (ε_{RMS}), qui est calculée à l'aide de l'expression suivante Kahoul et al. [5] :

$$\varepsilon_{\text{RMS}} = \left[\sum_{j=1}^N \frac{1}{N} \left(\frac{\chi_{j\text{exp}} - \chi_{j\text{calc}}}{\chi_{j\text{calc}}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3 - 2)$$

Dans ce contexte, N désigne le nombre total de points de données expérimentales, χ_{exp} fait référence aux valeurs Coster-Kronig et Auger expérimentales, et χ_{calc} désigne les valeurs Coster-Kronig et Auger calculées. Pour chaque transition, l'erreur quadratique moyenne pour les résultats empiriques est indiquée dans le tableau (3-1). Il s'agit d'un indicateur clé pour évaluer la précision des valeurs Coster-Kronig et Auger dans la prédiction des données expérimentales. Une valeur d'erreur quadratique moyenne plus faible signifie une corrélation plus étroite entre les résultats obtenus et les résultats expérimentaux, ce qui augmente la fiabilité des résultats empiriques et renforce la validité des modèles utilisés.

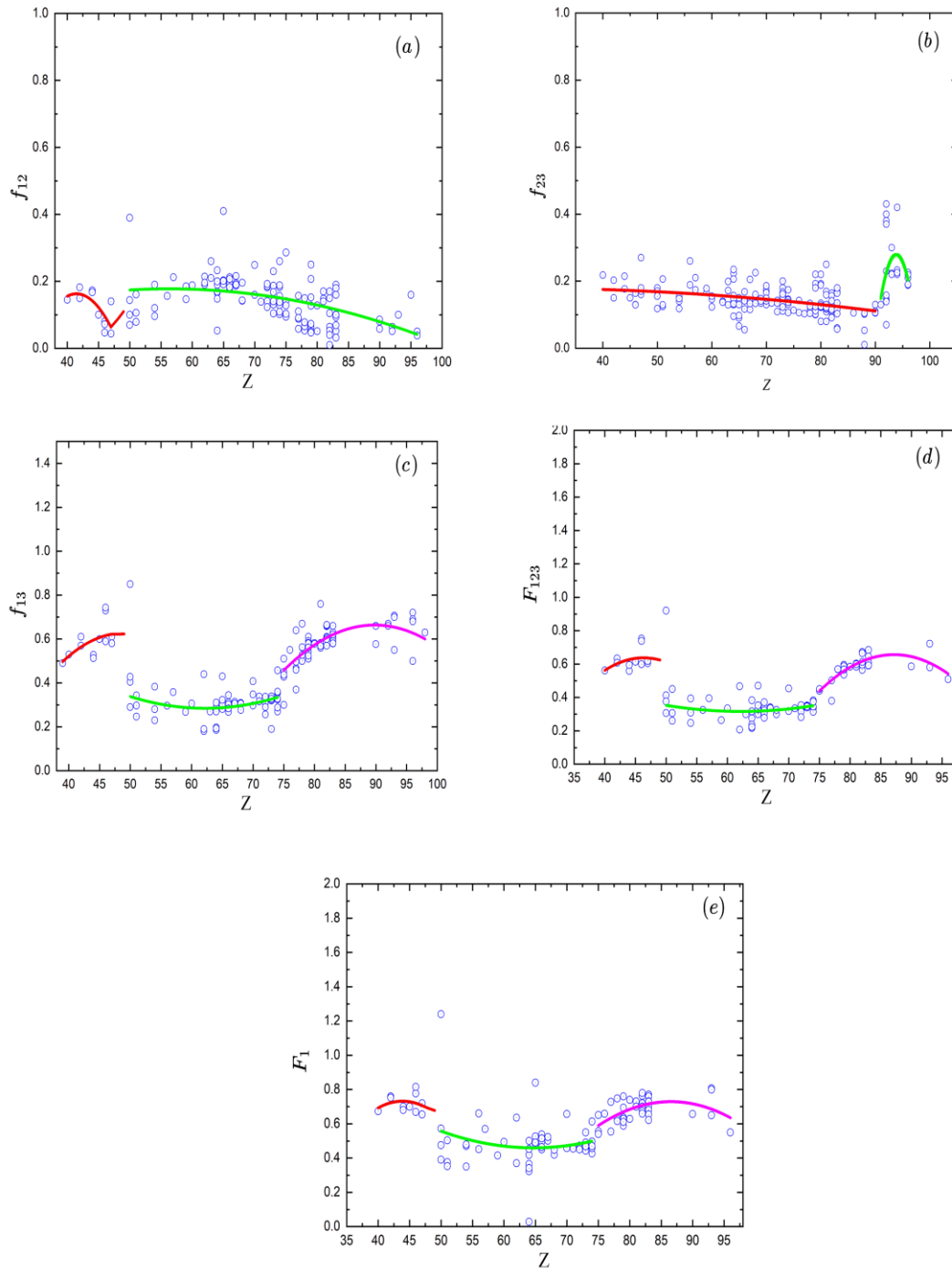


Figure 3-1: Distribution des valeurs expérimentales (a): $(f_{12})_{exp}$, (b): $(f_{23})_{exp}$, (c): $(f_{13})_{exp}$, (d): $(F_{123})_{exp}$, and (e): $(F_1)_{exp}$ en fonction du numéro atomique Z . La courbe est l'interpolation, selon l'équation (3-1).

Tableau 3-1: Coefficients d'ajustement selon la formule (3-1).

coefficient de Coster-Kronig	Group Z	Paramètres	Valeurs
f_{12}	$40 \leq Z \leq 47$	a_0	-5.445000
		a_1	0.270450
		a_2	-0.003260
		$\epsilon_{\text{RMS}}(\%)=52.26$	
	$50 \leq Z \leq 96$	a_0	-0.095530
		a_1	0.009710
a_2		-0.000086	
	$\epsilon_{\text{RMS}}(\%)=34.22$		
f_{13}	$39 \leq Z \leq 47$	a_0	-2.547060
		a_1	0.129870
		a_2	-0.001330
		$\epsilon_{\text{RMS}}(\%)=9.59$	
	$50 \leq Z \leq 74$	a_0	1.674730
		a_1	-0.044700
		a_2	0.000359
		$\epsilon_{\text{RMS}}(\%)=26.6$	
	$75 \leq Z \leq 98$	a_0	-6.94263
a_1		0.16941	
a_2		-0.000943	
	$\epsilon_{\text{RMS}}(\%)=10.62$		
f_{23}	$40 \leq Z \leq 90$	a_0	0.170680
		a_1	0.000720
		a_2	-0.000015
		$\epsilon_{\text{RMS}}(\%)=9.1$	
	$91 \leq Z \leq 96$	a_0	142.459390
		a_1	3.042200
a_2		-0.016210	
	$\epsilon_{\text{RMS}}(\%)=39.38$		
F_{123}	$40 \leq Z \leq 47$	a_0	-3.398110
		a_1	0.174230
		a_2	0.001880
		$\epsilon_{\text{RMS}}(\%)=7.96$	
	$50 \leq Z \leq 74$	a_0	1.273780
		a_1	0.030790
		a_2	0.000247
		$\epsilon_{\text{RMS}}(\%)=27.99$	
	$75 \leq Z \leq 93$	a_0	-10.550620
a_1		0.257150	
a_2		-0.001480	
	$\epsilon_{\text{RMS}}(\%)=9.72$		

F_1	$40 \leq Z \leq 47$	a_0	-4.332810	
		a_1	0.230910	
		a_2	-0.002630	
	$\varepsilon_{\text{RMS}}(\%)=6.5$			
	$50 \leq Z \leq 74$	a_0	-1.397380	
		a_1	0.090420	
		a_2	-0.001470	
		a_3	0.000008	
	$\varepsilon_{\text{RMS}}(\%)=30.3$			
	$75 \leq Z \leq 98$	a_0	-7.132140	
		a_1	0.181690	
		a_2	-0.001050	
$\varepsilon_{\text{RMS}}(\%)=9.05$				

3.1.2. Procédure de calcul empirique des transitions Auger

La base de données utilisée comme point de départ dans ce travail est décrite dans notre compilation expérimentale (chapitre 02). Dans cette étude, nous avons dérivé les paramètres empiriques de désintégration Auger en interpolant directement les données expérimentales. Les valeurs expérimentales a_1 , a_2 , and a_3 sont représentées en fonction du nombre atomique Z , comme le montrent respectivement les figures (3-2), (3-3) et (3-4).

La forme générale des fonctions polynomiales utilisées pour le processus d'ajustement est la suivante:

$$(a_1, a_2, a_3)_{\text{emp}} = \sum_{i=0}^n b_i Z^i = f(Z) \quad (3-3)$$

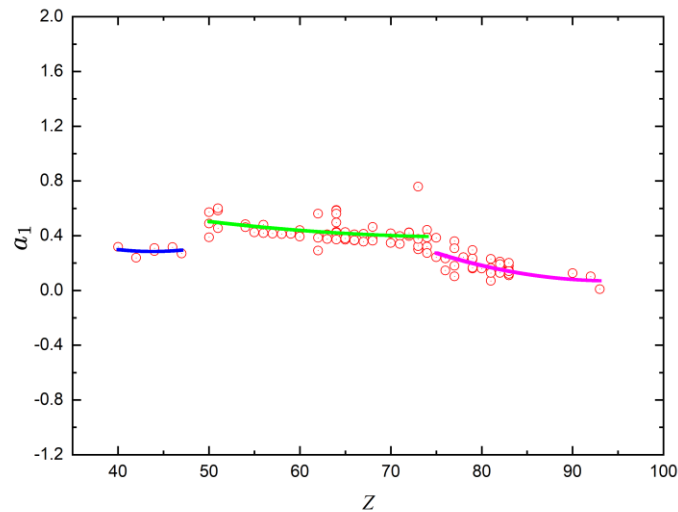


Figure 3- 2: Distribution des valeurs expérimentales $a_{1-\text{exp}}$ en fonction du numéro atomique Z . La courbe correspond à l'interpolation selon l'équation (3-3).

Extraites de la base de données du Chapitre 02. La valeur empirique de a_1 a été calculée pour la première fois à partir de 105 points de données, ce qui représente une utilisation pionnière d'un ensemble de données aussi complet. De même, a_2 a été déterminée à partir de 146 points de données, et a_3 a été calculé à partir de 131 points de données.

Afin de garantir la fiabilité des valeurs empiriques de transition Auger, la plage des numéros atomiques pour a_1 a été divisée en trois groupes Z :

Région à Z faible ($40 \leq Z \leq 47$), région à Z moyenne ($50 \leq Z \leq 74$) et région à Z élevé ($75 \leq Z \leq 93$). pour a_2 et a_3 , une seule plage de numéros atomiques a été utilisée ($40 \leq Z \leq 96$). Cette approche de regroupement est inspirée des tendances observées dans les valeurs de transition Auger rapportées par Krause [1] et Özdemir [6].

Dans les figures (3-2) à (3-4), les modèles ajustés sont représentés par des lignes pleines. Les coefficients d'ajustement correspondants b_i sont résumés dans le tableau (3-1), et les valeurs empiriques dérivées sont répertoriées dans les tableaux (3-2) à (3-4). L'écart global entre les valeurs empiriques calculées de a_1 , a_2 , et a_3 et les données expérimentales correspondantes est quantifié à l'aide de l'erreur quadratique moyenne (ϵ_{RMS}),

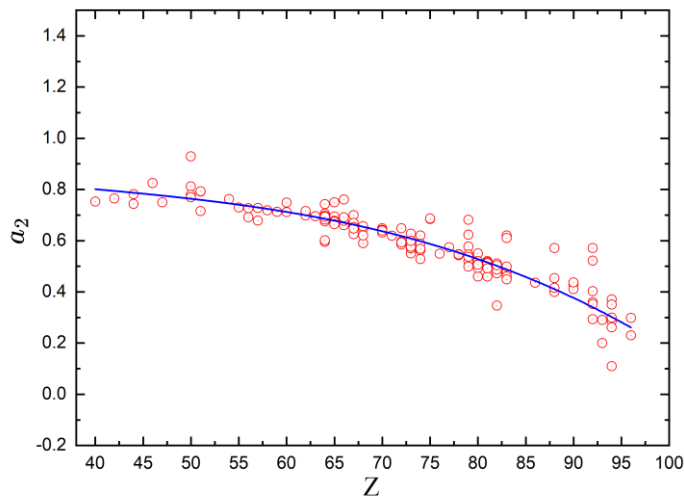


Figure 3-3: Distribution des valeurs expérimentales $a_{2\text{-exp}}$ en fonction du numéro atomique Z . La courbe correspond à l'interpolation selon l'équation (3-3).

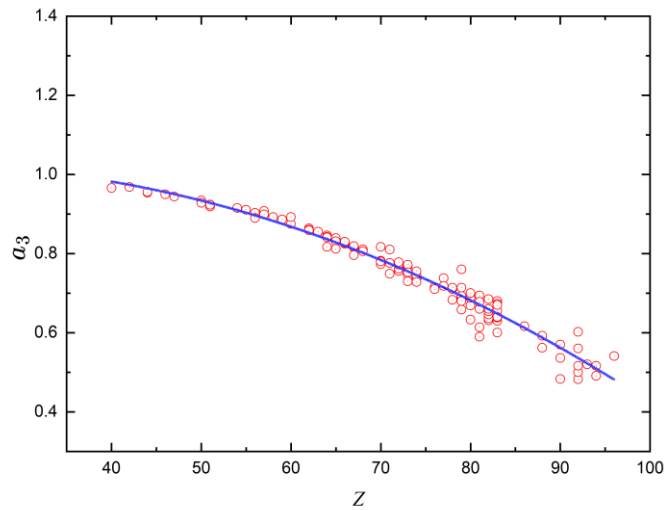


Figure 3-4: Distribution des valeurs expérimentales $a_{3\text{-exp}}$ en fonction du numéro atomique Z . La courbe correspond à l'interpolation selon l'équation (3-3).

Tableau 3-2: Résumé des coefficients d'ajustement selon l'équation (3-3).

Coefficient de Auger	Group Z	Paramètres d'ajustement	Valeurs
a_1	$40 \leq Z \leq 49$	b_0	2.149520
		b_1	-0.085150
		b_2	0.000972
		$\varepsilon_{\text{RMS}}(\%)=9.64$	
	$50 \leq Z \leq 74$	b_0	1.17501
		b_1	-0.01825
		b_2	9.96022E-5
		$\varepsilon_{\text{RMS}}(\%)=15.21$	
	$75 \leq Z \leq 93$	b_0	37.2375
b_1		-1.23499	
b_2		0.0137	
b_3		-5.0623E-5	
	$\varepsilon_{\text{RMS}}(\%)=25.46$		
a_2	$40 \leq Z \leq 96$	b_0	0.996950
		b_1	-0.009010
		b_2	1.6633E-4
		b_3	-1.58659E-6
	$\varepsilon_{\text{RMS}}(\%)=2.87$		
a_3	$40 \leq Z \leq 96$	b_0	0.993700
		b_1	0.003300
		b_2	-8.99703E-5
		$\varepsilon_{\text{RMS}}(\%)=0.60$	

Lorsqu'on étudie le processus Auger de la couche L , il faut tenir compte de la présence des transitions de Coster-Kronig. Par exemple, une lacune peut être déplacée de la sous-couche L_1 vers les sous-couches L_2 ou L_3 ou de manière équivalente, un électron peut être déplacé des sous-couches L_2 ou L_3 vers la sous-couche L_1 . Le rendement de Coster-Kronig f_{ij} , où i et j désignent les sous-couches impliquées dans le déplacement, quantifie la probabilité que ce processus se produise. Ainsi, f_{12} est la probabilité qu'une lacune se déplace de L_1 vers L_2 et qu'un électron soit éjecté d'une couche supérieure. De même, f_{13} est la probabilité qu'une lacune se déplace de L_1 vers L_3 , et f_{23} est la probabilité qu'une lacune se déplace de L_2 vers L_3 . Krause et al. [1], ce qui entraîne un écart moyen RMS dans la valeur de a_1 en raison des effets combinés des transitions f_{12} et f_{13} . Pour a_2 , un écart relativement faible ε_{RMS} a été observé, ce qui peut être attribué à l'influence d'une seule transition de Coster-Kronig, f_{23} . En revanche, a_3 a montré une excellente cohérence, probablement due à l'absence de transitions de Coster-Kronig.

En raison de l'absence de données expérimentales pour les éléments ^{48}Cd et ^{49}In , la méthode d'extrapolation a été utilisée pour déterminer les valeurs empiriques de f_{23} , f_{13} , F_{123} , F_1 , a_1 , a_2 , et a_3 . En revanche, comme la valeur f_{12} pour l'élément ^{49}In s'est avérée négative, la méthode de Puri a été utilisée pour estimer les valeurs des deux éléments ^{48}Cd et ^{49}In , en supposant une dépendance de la forme aZ^b (où Z désigne le numéro atomique) à l'aide des relations (Puri, [7]):

$$(C - K)(Z) = (C - K)(Z_2) \times (Z/Z_2)^b \quad (3 - 4)$$

avec:

$$b = \frac{\log(C-K(Z_2)) - \log(C-K(Z_1))}{\log Z_2 - \log Z_1}; \quad Z_1 \leq Z \leq Z_2.$$

Ici, Z_1 et Z_2 désignent, respectivement, les numéros atomiques inférieur et supérieur des éléments pour lesquels les valeurs de transition C-K sont disponibles. Une extrapolation a été utilisée pour estimer les valeurs a_i . De plus, nous avons exclu les valeurs a_1 rapportées par Öz et al. [8] pour ^{73}Ta , Borovoï et al. [9] pour ^{77}Ir , Risch [10] pour ^{81}Tl , et Weksler et Pinho [11] ainsi que Karttunen [12] pour ^{93}Np et ^{96}Cm , car ces valeurs étaient nettement supérieures au reste de l'ensemble de données. De même, pour a_2 , la valeur fournie par Byrne et al. [13] pour le ^{92}U a été exclue en raison d'un écart important par rapport aux tendances attendues.

3.2 Calcul relativiste

3.2.1 Méthodes de calcul atomique

Le code MCDFGME (*Multi Configuration Dirac Fock and General Matrix Elements*) utilise la méthode MCDF pour les calculs de structure atomique qui, comme son nom l'indique, est basée sur l'équation de Dirac et est donc une méthode relativiste. Tout au long de cette section, la méthode de Dirac-Fock est expliquée, car sa compréhension fournit un aperçu essentiel du raisonnement qui sous-tend le code MCDFGME. Cependant, en raison de la grande complexité de ce code et des limites intrinsèques imposées par cette thèse, les explications plus détaillées sur l'aspect computationnel ainsi que certaines méthodes mathématiques avancées seront laissées de côté, et seule une description du raisonnement physique derrière cette méthode sera fournie. Pour comprendre certaines notions de base derrière la méthode MCDF, il est important d'examiner d'abord le développement de son analogue non relativiste, la méthode Hartree-Fock.

3.2.2 Méthodes Hartree et Hartree-Fock - notions de base

Peu après la découverte de l'équation de Schrödinger, Douglas Hartree, qui travaillait auparavant au développement de méthodes de calcul atomique semi-empiriques basées sur l'ancienne théorie quantique de Bohr, a proposé une méthode de champ auto-cohérent qui permet de calculer des fonctions d'onde et des énergies approximatives pour les atomes. Pour que l'équation de Schrödinger ait des solutions analytiques pour un système quantique à N corps, les variables - qui dans ce cas sont les coordonnées des électrons doivent être séparables [14,15]. Un problème qui découle de cette procédure est que l'interaction électron-électron dépend des coordonnées. Par l'approximation de Hartree, on peut considérer un Hamiltonien dans lequel le potentiel est donné par l'interaction moyenne entre les électrons. Les fonctions propres exactes d'un électron peuvent alors être calculées en résolvant l'équation de Schrödinger avec cet Hamiltonien approximatif.

Ces fonctions sont les meilleures fonctions possibles pour un électron dans le contexte de l'approximation des particules indépendantes. Cette méthode, connue sous le nom de méthode de Hartree, commence alors par introduire une hypothèse initiale selon laquelle la fonction d'onde multi-électrons peut être développée comme un produit de fonctions d'onde d'un électron :

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_n) \approx \psi_1(r_1)\psi_2(r_2) \dots \psi_n(r_n) \quad (3 - 5)$$

Comme dans cette approximation chaque électron se déplace indépendamment dans le champ électromagnétique moyen généré par tous les autres électrons, nous avons N équations de Schrödinger découplées données par :

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2\psi_i(r) + V_i(r_i)\psi_i(r) = \varepsilon_i\psi_i(r) \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (3-6)$$

où ε_i est la contribution énergétique de l'électron i et le potentiel $V_i(r_i)$ inclut à la fois les interactions noyau-électron et électron-électron.

Quelque temps après la publication de Hartree, John Slater et John Gaunt ont démontré indépendamment que l'idée générale de la méthode Hartree pouvait être améliorée en utilisant le principe variationnel. De plus, Slater et Vladimir Fock ont également souligné indépendamment que la méthode ne tenait pas compte la propriété antisymétrique de la fonction d'onde fermionique [16,17].

Ces deux arguments ont finalement conduit au développement de la méthode Hartree-Fock.

Une solution élégante au problème d'antisymétrie de la fonction d'onde a été l'introduction du déterminant de Slater, car il satisfait à l'exigence d'antisymétrie de la solution et constitue également une approche appropriée pour le principe variationnel. Nous imposons d'abord l'antisymétrie des fonctions d'onde électroniques. Par exemple, dans un système simple à deux électrons à l'état fondamental, on peut écrire deux produits différents :

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_i(r_1)\psi_j(r_2), \quad \psi(r_2, r_1) = \psi_i(r_2)\psi_j(r_1) \quad (3-7)$$

Comme aucun de ces produits n'est antisymétrique, nous obtenons la fonction d'onde antisymétrique comme une combinaison linéaire de ceux-ci avec un facteur de normalisation qui est, dans ce cas, $\frac{1}{\sqrt{2}}$:

$$\psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) - \psi_1(r_2)\psi_2(r_1)] \quad (3-8)$$

Dans une forme analogue, on peut également écrire cette fonction d'onde comme le déterminant d'une matrice 2×2 , connu sous le nom de déterminant de Slater:

$$\psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1) & \psi_2(r_1) \\ \psi_1(r_2) & \psi_2(r_2) \end{vmatrix} \quad (3-9)$$

Il est facile de généraliser cette expression à un système de n électrons :

$$\psi(r_1, \dots, r_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1) & \dots & \psi_n(r_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(r_n) & \dots & \psi_n(r_n) \end{vmatrix} \quad (3-10)$$

dans laquelle chaque ligne et chaque colonne représentent respectivement un électron et une orbitale de spin.

Il est maintenant important de se rappeler que si deux lignes d'un déterminant sont identiques, alors le déterminant est égal à zéro. Cela implique nécessairement que les électrons ayant le même spin ne peuvent pas se trouver dans les mêmes orbitales, car dans ce cas, deux lignes du déterminant de Slater seraient identiques. En gardant cela à l'esprit, il est désormais possible de voir que non seulement la

méthode Hartree-Fock prend en compte la propriété antisymétrique de la fonction d'onde fermionique, mais qu'elle prend également en compte un type de corrélation entre les électrons ayant le même spin, l'échange-corrélation. Une caractéristique importante prise en compte par des méthodes plus avancées, mais qui n'est pas présente dans cette méthode, est la corrélation électronique. Ainsi, même si cette méthode tient compte de l'échange-corrélation, elle est généralement qualifiée de méthode non corrélée.

3.2.3 Méthode de multi-configuration de Dirac-Fock

Comme nous l'avons vu au début de ce chapitre, les effets relativistes doivent être pris en compte dans les calculs atomiques. Pour ces calculs, il faut considérer l'analogie relativiste de la méthode Hartree-Fock, la méthode Dirac-Fock. Dans cette méthode, la fonction d'onde d'un système quantique à N électrons est donnée par la combinaison linéaire des fonctions d'état de configuration CSF (Configuration State Functions). Une fonction d'état de configuration (CSF) est une combinaison linéaire adaptée à la symétrie de déterminants de Slater. Si l'on ne considère qu'une seule CSF, on obtient l'approximation des particules indépendantes. Pour prendre en compte la corrélation électronique, il faut donc additionner toutes les CSF possibles de même parité. La CSF du système peut alors être considérée comme une combinaison linéaire des déterminants de Slater pour N configurations possibles :

$$\Psi(r_1, \dots, r_N) = \sum_i^{Nc} c_i \psi_i(r_1, \dots, r_N) = \sum_i^{Nc} \frac{c_i}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Phi_{n_i \kappa_i m_i}^1(r_1) & \dots & \Phi_{n_i \kappa_i m_i}^N(r_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_{n_i \kappa_i m_i}^1(r_N) & \dots & \Phi_{n_i \kappa_i m_i}^N(r_N) \end{vmatrix} \quad (3 - 11)$$

où c_i sont les coefficients de mélange et imposent au CSF d'être un état propre du moment cinétique total, J^2 , et sa projection, J_z . n , κ et m sont respectivement les nombres quantiques principaux et relativistes, N est le nombre d'électrons dans le système et $\Phi_{n_i \kappa_i m_i}^j$ est le spineur de Dirac pour l'électron j .

Dans le scénario relativiste, les spineurs de Dirac peuvent être considérés comme les orbitales d'un électron du champ central dans lesquelles leurs fonctions radiales peuvent être divisées en une composante grande ($P_{n\kappa}$) et une composante petite ($Q_{n\kappa}$):

$$\Phi_{n_i \kappa_i m_i}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{n\kappa}(r) \chi_{\kappa m}(\theta, \phi) \\ i Q_{n\kappa}(r) \chi_{-\kappa m}(\theta, \phi) \end{bmatrix} \quad (3 - 12)$$

où $\chi_{\kappa m}$ est une fonction vectorielle couplée d'une harmonique sphérique et d'une fonction de spin et la condition d'orthonormalisation suivante est respectée :

$$\int_0^{\infty} [P_{n'\kappa'}(r)P_{n\kappa}(r) + Q_{n'\kappa'}(r)Q_{n\kappa}(r)]dr = \delta_{nn'} \delta_{\kappa\kappa'} \quad (3-13)$$

Les spineurs sont des fonctions propres simultanées de l'opérateur de parité, du carré de l'opérateur de moment angulaire total $j = l + s$ et de sa composante j_z . Les nombres quantiques n , κ et m sont respectivement le nombre quantique principal, le nombre quantique relativiste «kappa» qui inclut à la fois la parité et le moment angulaire total j , et m est la valeur propre de j_z . Les nombres quantiques j , κ et l sont liés par :

$$\kappa = \begin{cases} -l - 1, & j = l + 1/2 \\ l, & j = l - 1/2 \end{cases} \quad (3-14)$$

$$j = |\kappa| - 1/2. \quad (3-15)$$

Comme $\Phi_{n_i\kappa_i m_i}(r, \theta, \phi)$ est une fonction propre de la parité Π , j^2 et j_z , elle doit satisfaire les équations:

$$j^2 \Phi_{n_i\kappa_i m_i}(r, \theta, \phi) = j(j+1)\hbar^2 \Phi_{n_i\kappa_i m_i}(r, \theta, \phi) \quad (3-16)$$

$$j_z \Phi_{n_i\kappa_i m_i}(r, \theta, \phi) = m\hbar \Phi_{n_i\kappa_i m_i}(r, \theta, \phi) \quad (3-17)$$

$$\Pi \Phi_{n_i\kappa_i m_i}(r, \theta, \phi) = \varepsilon \Phi_{n_i\kappa_i m_i}(r, \theta, \phi) \quad (3-18)$$

dans lesquelles $\varepsilon = \pm 1$ selon la parité du système.

Dans l'équation (3-12), on peut voir que $\chi_{\kappa m}$ est la partie angulaire des spineurs de Dirac. Cela est dû à sa dépendance vis-à-vis des harmoniques sphériques, $Y_{l, m_l}(\theta, \phi)$. Cependant, non seulement $\chi_{\kappa m}$ représente la partie angulaire mais comprend également la composante de spin, $\xi_{\frac{1}{2}, m_s}$, sous la forme :

$$\begin{aligned} \chi_{\kappa m}(\theta, \phi, \sigma) &= \sum_{m_s} \left\langle l, m - m_s, \frac{1}{2}, m_s \middle| j, m \right\rangle Y_{l, m - m_s}(\theta, \phi) \xi_{\frac{1}{2}, m_s} \\ &= \left(\left\langle l, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| j, m \right\rangle Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \phi) \right) + \left(\left\langle l, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| j, m \right\rangle Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \phi) \right) \\ &= \left(\left\langle l, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| j, m \right\rangle Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \phi) \right) \\ &= \left(\left\langle l, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| j, m \right\rangle Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \phi) \right) \end{aligned} \quad (3-19)$$

dans laquelle $\langle l, m - m_s, s, m_s | j, m \rangle$ sont les coefficients de Clebsch-Gordon.

Considérant $m = m_l + m_s, \Leftrightarrow m_l = m - m_s$, et les composantes de spin sont données par:

$$\xi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \xi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3-20)$$

Dans la méthode MCDF, les fonctions d'onde du système sont calculées à l'aide de la méthode

variationnelle afin d'obtenir l'énergie totale :

$$E = \frac{\langle \Psi | H_{\text{DCB}} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \sum_i I_i + \sum_{i < j} [J_{ij} - K_{ij}] \quad (3 - 21)$$

où H_{DCB} est l'Hamiltonien de Dirac-Coulomb-Breit.

Pour bien comprendre l'équation (3-21), il faut examiner individuellement ses composantes. Tout d'abord, l'intégrale des interactions à un électron, I_i , qui tient compte de l'énergie cinétique et de l'interaction avec le noyau, dépend de l'Hamiltonien de Dirac à un électron, $hD(r)$:

$$I = \langle n\kappa m | \sum_i hD(r_i) | n'\kappa'm' \rangle \quad (3 - 22)$$

D'autre part, J_{ij} et K_{ij} sont respectivement les éléments de matrice électrostatique directe et d'échange. Comme la répulsion de Coulomb entre les électrons est impliquée, il n'est pas surprenant que dépendance par rapport à la distance $r_{ij} = |r_i - r_j|$ entre eux :

$$J_{ij} = \left\langle \psi^a(r_i)\psi^b(r_j) \left| \frac{e^2}{r_{ij}} \right| \psi^a(r_i)\psi^b(r_j) \right\rangle, K_{ij} = \left\langle \psi^a(r_i)\psi^b(r_j) \left| \frac{e^2}{r_{ij}} \right| \psi^a(r_j)\psi^b(r_i) \right\rangle \quad (3 - 23)$$

En poursuivant avec la méthode variationnelle, l'étape suivante consiste à minimiser l'Hamiltonien par rapport aux coefficients de mélange, c_i , car cela permettra de calculer les équations variationnelles :

$$\frac{\partial E}{\partial c_i} = \frac{\partial \langle \Psi | H_{\text{DCB}} | \Psi \rangle}{\partial c_i} = 0 \quad (3 - 24)$$

Pour obtenir les équations radiales, le même raisonnement doit être appliqué aux grandes et petites composantes de la fonction radiale :

$$\begin{cases} \frac{\partial (\langle \psi | H_{\text{DCB}} | \psi \rangle - \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} \langle \psi_i | \psi_j \rangle)}{\partial P_{nk}(r)} = 0 \\ \frac{\partial (\langle \psi | H_{\text{DCB}} | \psi \rangle - \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} \langle \psi_i | \psi_j \rangle)}{\partial Q_{nk}(r)} = 0 \end{cases} \quad (3 - 25)$$

Dans lesquelles les multiplicateurs de Lagrange, ε_{ij} , sont introduits pour garantir que la condition d'orthonormalisation (3-13) est satisfaite.

Sans démonstration explicite, qui implique des étapes algébriques complexes dépassant le cadre de cette thèse et très bien décrites dans [14,18], il est possible d'utiliser l'équation (3-25) pour arriver à un système de deux équations connu sous le nom d'équations de Dirac-Fock :

$$\frac{d}{dr} \begin{pmatrix} P_i(r) \\ Q_i(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\kappa}{r} & 2c + \frac{\varepsilon_{ii} - V_i(r)}{c} \\ -\frac{\varepsilon_{ii} - V_i(r)}{c} & \frac{\kappa}{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_i(r) \\ Q_i(r) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} X_i^Q(r) \\ X_i^P(r) \end{pmatrix} \quad (3 - 26)$$

où c représente la vitesse de la lumière, $V(r)$ représente à la fois les potentiels nucléaires et les potentiels de Coulomb directs, et $X^Q(r)$ et $X^P(r)$ représentent les potentiels d'échange généralisés qui

incluent tous les deux électrons sauf la répulsion coulombienne instantanée directe (puisque celle-ci est déjà incluse dans $V(r)$).

Comme nous l'avons déjà vu plus haut dans ce chapitre, des méthodes de calcul sont nécessaires pour obtenir des solutions pour les systèmes à plusieurs électrons. Dans le cas de la méthode MCDF, cela se produit car le système d'équations couplées décrit dans l'équation (3-26) ne présente aucune solution analytique. Pour cela, ce système d'équations est résolu dans un processus auto-cohérent jusqu'à ce que les différences entre les itérations soient telles que la convergence soit considérée comme atteinte.

La méthode MCDF commence par utiliser une fonction d'essai, généralement hydrogénée ou orbitale, calculée en tenant compte du modèle de Thomas-Fermi [14,19]. Cela permet la diagonalisation de l'Hamiltonien en résolvant l'équation (3-24), et ainsi, un ensemble initial de valeurs pour les coefficients de mélange des CSF peut être obtenu. À partir de là, il est possible de calculer l'équation (3-26). Étant donné que la fonction d'essai initiale ne décrit pas correctement notre système, à la fin de la première itération de la méthode, nous nous retrouvons toujours avec une solution inexacte. Cependant, maintenant que nous avons résolu l'équation (3-26), nous disposons d'une nouvelle fonction d'onde pour notre système qui peut être comparée à la précédente. Si la variation entre les fonctions d'onde est supérieure à la précision initialement définie, les paramètres calculés lors de l'itération précédente seront utilisés pour résoudre à nouveau l'équation (3-26), le processus étant répété jusqu'à ce que la précision soit atteinte. Enfin, les coefficients de mélange sont à nouveau calculés avec la nouvelle fonction d'onde, le processus étant répété jusqu'à ce que les coefficients de mélange et les fonctions d'onde atteignent la précision souhaitée.

3.2.4 Hamiltonien de Dirac-Coulomb-Breit

Afin de décrire un système quantique donné, il est essentiel de définir son Hamiltonien. Cela permettra de calculer les états énergétiques et les fonctions d'onde en résolvant l'équation des valeurs propres de l'Hamiltonien:

$$H\psi = E\psi \quad (3 - 27)$$

Un Hamiltonien relativiste à un électron où l'électron est dans un état lié à un noyau peut, selon le formalisme de Dirac, s'écrire comme suit :

$$h_D(r) = c\alpha \cdot p + \beta c^2 + V_C(r) \quad (3 - 28)$$

où p est la quantité de mouvement linéaire, $V_C(r)$ le potentiel nucléaire et α et β les matrices de Dirac 4×4 telles qu'elles sont habituellement définies pour les particules à spin $\frac{1}{2}$ es dans la base de Dirac :

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3 - 29)$$

où 1 est la matrice identité 2×2 et σ est composée par les trois matrices de Pauli 2×2 qui décrivent le spin dans l'espace euclidien tridimensionnel :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3 - 30)$$

Dans notre cas, comme nous essayons de décrire l'atome d'or et donc un système à plusieurs électrons, il faut considérer la somme des Hamiltoniens à un électron, un pour chaque électron. Cependant, le système ne dépend pas exclusivement des Hamiltoniens individuels, car les électrons interagissent également entre eux. Sous une forme généralisée, un système à plusieurs électrons lié à un noyau est décrit comme la somme de N Hamiltoniens de Dirac à un électron, $h_D(r)$, et les interactions entre eux données par l'opérateur de Coulomb-Breit, $g(r_i, r_j)$. C'est ce qu'on appelle l'Hamiltonien de Dirac-Coulomb-Breit :

$$H_{\text{DCB}} = \sum_{i=1}^N h_D(r_i) + \sum_{i<j}^N g(r_i, r_j) \quad (3 - 31)$$

dans laquelle $i < j$ doit être utilisé dans la somme des interactions afin d'éviter de comptabiliser deux fois la même interaction électron-électron.

En première approximation, l'interaction électron-électron peut être décrite par la répulsion coulombienne instantanée entre les électrons en interaction, $g^C(r_i, r_j)$, telle qu'elle est observée en électrostatique.

Cependant, pour décrire pleinement cette interaction dans le cadre relativiste, il est nécessaire de prendre en considération les corrections relativistes à cette approximation. Celle-ci est représentée sous la forme de l'opérateur de Breit, $B(r_i, r_j)$:

$$g(r_i, r_j) = g^C(r_i, r_j) + B(r_i, r_j) = \frac{1}{r_{ij}} + B(r_i, r_j) \quad (3 - 32)$$

L'interaction électron-électron consiste en l'échange d'un photon virtuel entre les électrons en interaction. En tant que tel, l'opérateur de Breit dépend du propagateur de photon, et donc également de la jauge, étant généralement représenté soit dans la jauge de Lorentz, soit dans celle de Coulomb. Étant donné qu'il faut fixer une jauge pour définir l'opérateur de Breit, le choix se portera sur celle qui favorise les calculs. Dans la littérature, on trouve de nombreux exemples de calculs théoriques [20,22] et même de résultats expérimentaux. Dans la référence [23], les auteurs montrent que la jauge de Coulomb est la plus adaptée aux méthodes numériques itératives telles que la méthode MCDF. Cela

s'explique par le fait que les potentiels d'interaction dans les deux jauges conduisent à des résultats très différents. Contrairement à la jauge de Coulomb, une utilisation non perturbative des potentiels dans la jauge de Lorentz conduit à des niveaux d'énergie qui sont déjà incorrects de l'ordre de $(\alpha^4 mc^2)$ où $\alpha \approx \frac{1}{137}$ est la constante de structure fine. Cela fournit un argument quantitatif convaincant en faveur du choix de la jauge de Coulomb plutôt que celle de Lorentz. En fixant la jauge de Coulomb, nous obtenons que la divergence du potentiel vectoriel magnétique est nulle :

$$\nabla \cdot A = 0 \quad (3 - 33)$$

Sous cette jauge, l'opérateur de Breit peut être écrit comme la somme de deux opérateurs différents, chacun représentant un effet qui doit être pris en compte pour une description précise des interactions entre les électrons :

$$B(r_i, r_j) = g^G(r_i, r_j) + g^R(r_i, r_j) \quad (3 - 34)$$

Ici, $g^G(r_i, r_j)$ est l'opérateur de Gaunt qui représente l'interaction magnétique entre les électrons, sous la forme :

$$g^G(r_i, r_j) = -\frac{\alpha_i \cdot \alpha_j}{r_{ij}} \quad (3 - 35)$$

tandis que $g^R(r_i, r_j)$ tient compte du retard dans les interactions coulombiennes et magnétiques dû au fait que la vitesse de la lumière n'est pas infinie et que, par conséquent, les interactions ne sont pas instantanées :

$$g^R(r_i, r_j) = -\frac{\alpha_i \cdot \alpha_j}{r_{ij}} \left[\cos\left(\frac{\omega_{ij} r_{ij}}{c}\right) - 1 \right] + c^2 (\alpha_i \cdot \nabla_i) (\alpha_j \cdot \nabla_j) \frac{\cos\left(\frac{\omega_{ij} r_{ij}}{c}\right) - 1}{\omega_{ij}^2 r_{ij}} \quad (3 - 36)$$

avec ω_{ij} ; étant la fréquence du photon virtuel échangé, qui dépend des énergies des électrons, ε :

$$\omega_{ij} = \frac{|\varepsilon_i - \varepsilon_j|}{\hbar} \quad (3 - 37)$$

Il est désormais possible d'écrire l'expression complète de l'opérateur de Coulomb-Breit à l'aide des équations (3-32) et (3-34) :

$$g(r_i, r_j) = \frac{1}{r_{ij}} - \frac{\alpha_i \cdot \alpha_j}{r_{ij}} \cos\left(\frac{\omega_{ij} r_{ij}}{c}\right) + c^2 (\alpha_i \cdot \nabla_i) (\alpha_j \cdot \nabla_j) \frac{\cos\left(\frac{\omega_{ij} r_{ij}}{c}\right) - 1}{\omega_{ij}^2 r_{ij}} \quad (3 - 38)$$

Un autre terme important à prendre en compte est l'approximation du premier ordre de l'équation (3-36). Grâce à une expansion en série du cosinus, il est possible de ne considérer que les termes de $g^R(r_i, r_j)$ ayant l'ordre le plus bas (a^2). C'est ce qu'on appelle le terme de retard de Breit [14,24] :

$$g^R(r_i, r_j) = \frac{\alpha_i \alpha_j}{2r_{ij}} - \frac{(\alpha_i r_{ij})(\alpha_j r_{ij})}{2r_{ij}^3} . \quad (3 - 39)$$

Outre l'ensemble du cadre théorique de l'opérateur de Coulomb-Breit, il convient également de mentionner l'approche MCDFGME pour calculer les interactions électron-électron. Alors que le calcul complet du terme de Gaunt, équation (3-35), est pris en compte dans la méthode variationnelle, seule l'approximation du premier ordre de $g^R(r_i, r_j)$, comme le montre l'équation (3-39), est prise en compte. Les termes restants sont calculés ultérieurement à l'aide d'une méthodologie perturbative

3.2.5 Corrections de l'électrodynamique quantique (QED)

Après avoir décrit l'Hamiltonien, et donc également les corrections relativistes correspondantes qui doivent être prises en compte, il ne reste plus qu'à aborder les corrections de l'électrodynamique quantique (QED) pour notre système. En effet, comme l'Hamiltonien de Dirac-Coulomb-Breit contient une somme d'Hamiltoniens de Dirac à un électron, il est facile de comprendre pourquoi les corrections QED sont nécessaires dans ce cas, puisque la théorie de Dirac ne prédit pas le décalage de Lamb.

En 1947, Willis Lamb et Robert Retherford ont mené une expérience visant à mesurer la structure fine des spectres atomiques. Ils ont notamment réussi à stimuler les transitions entre les niveaux d'énergie $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ de l'atome d'hydrogène. Alors que l'équation de Dirac prédit que les deux niveaux possèdent la même énergie, étant des niveaux d'énergie dégénérés, l'expérience a mesuré une différence de décalage $\lambda_{\text{shift}} = 0.03 \text{ cm}^{-1}$ entre eux [14,25]. Cette longueur d'onde micro-onde qui a induit les transitions est connue sous le nom de décalage de Lamb.

Plus tard dans la même année, Hans Bethe a pu fournir une explication à ce phénomène en utilisant la mécanique quantique non relativiste, dans laquelle il a pris en compte une renormalisation de la masse de l'électron. Cependant, la mécanique quantique non relativiste ne pouvait aller plus loin, car un traitement relativiste des champs électroniques et photoniques était nécessaire pour expliquer avec précision le décalage de Lamb. Cela a permis de comprendre que ce décalage trouvait son origine dans deux effets distincts de la QED : la polarisation du vide et l'énergie propre de l'électron.

a. Polarisation du vide

Le vide dans notre univers n'est pas « vide » au sens le plus fondamental du terme, car il contient des paires de particules-antiparticules virtuelles à courte durée de vie. Lorsqu'on considère une interaction entre des particules, ces paires virtuelles ne contribuent finalement pas à l'amplitude de transition, car leur représentation dans le diagramme de Feynmann ne contient pas de lignes externes.

Cependant, lorsqu'un photon se propage, les paires de particules-antiparticules virtuelles peuvent être créées et, contrairement au cas précédent, leur effet sur d'autres processus est mesurable. La polarisation du vide à une boucle à partir d'une paire électron-positon dans le champ nucléaire est représentée dans la figure 3-5. Dans le contexte de l'atome, qui est notre centre d'intérêt dans l'étude de cet effet, la création d'une paire électron-positon dans le champ du noyau suivi de son annihilation implique la création d'un photon virtuel dans cette région. Comme nous l'avons vu précédemment, l'interaction électron-électron consiste en un échange de photons virtuels entre eux. Dans ce cas, le photon virtuel n'est pas émis par un électron, mais il sera tout de même absorbé par un électron, provoquant ainsi un changement dans son niveau d'énergie.

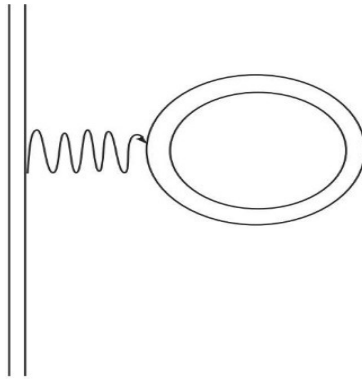


Figure 3-5: Diagramme de Feynman du premier ordre pour la contribution d'une paire électron-positon à une boucle à la polarisation du vide en QED [14,26]. Une paire électron-positon virtuelle est créée dans le champ nucléaire, le photon virtuel étant absorbé par les électrons.

Eyvind Wichmann et Norman Kroll ont démontré que cette interaction pouvait être calculée à l'aide du potentiel effectif défini comme suit [27] :

$$V_{VP}(r) = \sum_{i=1, j=0}^{\infty} V_{i,2j+1}(r) \quad (3 - 40)$$

avec $V_{i,2j+1}(r)$ représentant des termes de l'ordre de $\alpha^i (Z\alpha)^{2j+1}$.

Comme on peut s'y attendre, avec des ordres plus élevés du potentiel, la contribution à l'interaction diminue. Nous négligeons donc les termes d'ordre supérieur et ne considérons que l'ordre le plus bas, avec $i = 1$ et $j = 0$. En considérant que la distribution de la charge nucléaire est sphériquement symétrique, ce terme est donné par la valeur attendue pour le potentiel de Uehling $U(r)$ [28].

La polarisation du vide peut alors être calculée par :

$$V_{1,1}(r) = U(r) = -\frac{2\lambda_e}{3cr} \int_0^\infty u \rho_N \left[K_0 \left(\frac{2|r-u|}{\lambda_e} \right) - K_0 \left(\frac{2|r+u|}{\lambda_e} \right) \right] du \quad (3-41)$$

où la variable d'intégration est $u = 2_j + 1$, ρ_N est la distribution de charge nucléaire, λ_e est la longueur d'onde Compton de l'électron et K_0 est donné par :

$$K_0(r) = \int_1^\infty \left(\frac{1}{t^3} + \frac{1}{t^5} \right) \sqrt{(t^2 - 1)} e^{-rt} \quad (3-42)$$

b. Énergie propre

Nous avons précédemment détaillé le cas dans lequel une paire virtuelle particule-antiparticule est créée lorsqu'un photon se propage dans le vide. Il n'est donc pas surprenant qu'un effet similaire puisse se produire avec d'autres particules. En fait, la polarisation du vide peut être considérée comme l'énergie propre du photon. Pour les autres particules, cependant, au lieu d'une paire particule-antiparticule, la particule virtuelle est dans ce cas un photon qui est ensuite réabsorbé par la particule émettrice. Ce processus est illustré dans la figure (3-6).

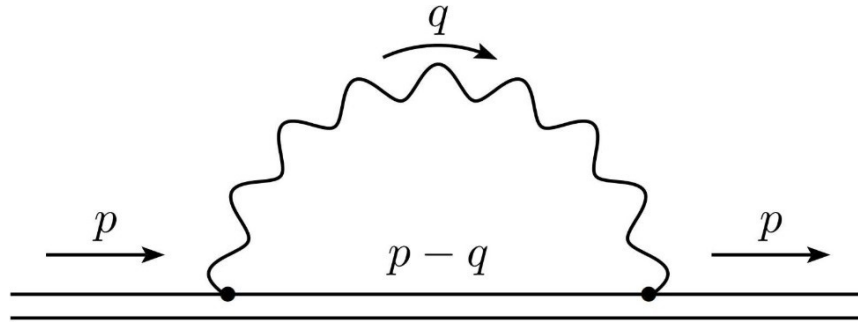


Figure 3-6 : Diagramme de Feynman pour l'énergie propre à une boucle dans la QED [14]. Une particule avec un moment $4p$ émet un photon virtuel avec un moment $4q$ qui est ensuite réabsorbé.

Lorsqu'un électron est lié à un noyau, l'effet d'auto-énergie contribue au décalage de Lamb, constituant en fait sa plus grande contribution [29]. Pour un atome hydrogéné, la contribution de ce processus est très bien étudiée et peut être exprimée, pour un électron avec des nombres quantiques n et κ , comme suit [30]:

$$\Delta E_{SE,H}^{n\kappa} = \frac{m_e c^2}{\pi n^3} \alpha (\alpha Z)^4 F_{n\kappa}(\alpha Z) \quad (3-43)$$

dans laquelle $F_{n\kappa}(\alpha Z)$ est une fonction sans dimension qui augmente lentement avec Z et diminue avec l , avec un maximum pour l'orbitale s .

Pour les atomes à plusieurs électrons, comme c'est le cas ici, ce processus n'est pas facile à calculer. Néanmoins, un modèle semi-classique développé par Theodore Welton [31] permet d'obtenir une très

bonne estimation. Ce modèle suppose que l'auto-énergie de l'électron est causée par une perturbation de la trajectoire classique de l'électron autour du champ nucléaire. Grâce à cela, le modèle peut fournir une très bonne approximation de l'effet de blindage mutuel entre les électrons liés, qui pour l'orbitale S est donné par [32] :

$$\delta E_{SE}^{n,l=0} = \frac{\langle n, l=0 | \nabla^2 V_N(r) | n, l=0 \rangle_{DF}}{\langle n, l=0 | \nabla^2 V_N(r) | n, l=0 \rangle_H} \delta E_{SE,H}^{n,l=0} \quad (3-44)$$

où $V_N(r)$ est le potentiel nucléaire, $|n, l=0\rangle_{DF/H}$ sont respectivement les fonctions d'onde radiales $l=0$ de Dirac-Fock et hydrogénoïdes, et l'énergie propre hydrogénoïdes corrigée, $\delta E_{SE,H}^{l=0}$, tient compte de la taille non infinie du noyau.

Une approche similaire pour $l > 0$, en considérant E_N comme le champ électrique du noyau, conduit à :

$$\delta E_{SE}^{n,l} = \frac{\langle n, l | \beta \alpha \cdot E_N | n, l \rangle_{DF}}{\langle n, l | \beta \alpha \cdot E_N | n, l \rangle_H} \delta E_{SE,H}^{n,l} \quad (3-45)$$

Expérimentalement, il a été démontré que cette méthode correspond très bien aux données relatives aux ions ayant de différents nombres d'électrons [33,34]. Bien qu'il existe d'autres méthodes de correction de l'énergie propre dans les codes MCDF, telles que les méthodes (r et p), la méthode de Welton reste l'une des plus précises lorsque l'on compare les calculs aux résultats expérimentaux et elle est encore utilisée aujourd'hui dans les codes de calcul atomique les plus récents [35].

3.2.5 Relaxation atomique

Comme nous l'avons vu précédemment, il existe deux mécanismes distincts et concurrents pour la relaxation atomique d'un atome excité : les transitions radiatives et non radiatives (Auger). Malgré l'importance déjà évoquée des transitions non radiatives dans ce travail, les transitions radiatives doivent également être prises en compte, car elles contribuent également aux cascades. Ainsi, les deux types de transitions doivent être calculés à l'aide du code MCDFGME afin de simuler, dans une étape suivante, les cascades et d'obtenir le spectre de l'atome d'or.

Les calculs réalisés par Scofield [36,37] et Chen et al. [38,42] à l'aide de la méthode Dirac-Hartree-Slater sont encore utilisés aujourd'hui dans de nombreux travaux et sont répertoriés dans des bases de données. Outre le fait que nos calculs sont plus précis que ceux de ces travaux grâce à l'utilisation du code MCDFGME et à d'autres contributions tenant compte de la corrélation électronique, nous serons également en mesure de calculer des transitions qui n'étaient pas prises en compte auparavant. En effet, ces travaux plus anciens fixaient un seuil pour prendre en compte ou rejeter une transition, les transitions à faible taux n'étant pas prises en compte. Il est donc important de comprendre les deux types

de transitions et de fournir un cadre théorique pour leurs calculs.

a. Transitions radiatives

Le processus le plus simple de relaxation atomique passe par une transition radiative. Dans ce processus, afin de combler une lacune interne dans l'atome, qui se trouve dans un état excité, un électron de la couche supérieure comble la lacune tout en émettant un photon. Cette transition est représentée dans la figure 3-7.

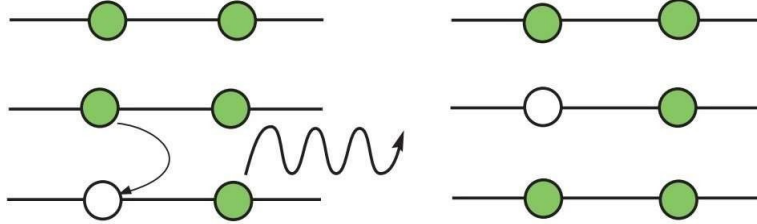


Figure 3-7: Représentation d'une transition radiative [14,26]. Dans un état initial (à gauche), l'atome présente une lacune interne, tandis que dans l'état final (à droite), la lacune est comblée par un électron de la couche supérieure et un photon est émis. Dans cet état final, on constate que la lacune s'est déplacée vers une couche supérieure.

D'un point de vue théorique, cette transition est considérée comme une émission spontanée d'un photon dont l'énergie est égale à la différence d'énergie entre les états initial et final de l'électron intermédiaire, $E_{if} = E_i - E_f$. Pour décrire ce processus, il est important de considérer d'abord une perturbation paramagnétique dépendante du temps dans l'Hamiltonien afin de décrire le couplage de l'atome au champ électromagnétique. Pour un système à un électron, cela est donné par :

$$H_{\text{para}}(t) = \frac{e}{m_e} \hat{A}(t) \cdot \hat{p} \quad (3 - 46)$$

où $\hat{A}(t)$ représente le potentiel vecteur, \hat{p} est l'opérateur de quantité de mouvement et m_e est la masse de l'électron.

Comme l'Hamiltonien contient un vecteur dépendant du temps, il est avantageux de travailler dans la représentation de Heisenberg. Avec celle-ci, le potentiel vecteur prend la forme suivante :

$$\hat{A}(r, t) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_{\mathbf{k}}}} (\hat{\varepsilon}_{\mathbf{k}, \lambda} a_{\mathbf{k}, \lambda} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} + \hat{\varepsilon}_{\mathbf{k}, \lambda}^* a_{\mathbf{k}, \lambda}^+ e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)}) \quad (3 - 47)$$

où ε_0 est la permittivité du vide, V est une constante sans dimension, $\hat{\varepsilon}_{\mathbf{k}, \lambda}$ sont les projections du vecteur de polarisation et $a_{\mathbf{k}, \lambda}^+$ et $a_{\mathbf{k}, \lambda}$ sont, respectivement, les opérateurs de création et d'annihilation ayant les propriétés suivantes :

$$a_{k,\lambda}|n_{k,\lambda}\rangle = \sqrt{n_{k,\lambda}}|n_{k,\lambda} - 1\rangle \Rightarrow a_{k,\lambda}|0\rangle = 0 \quad (3 - 48)$$

$$a_{k,\lambda}^+|n_{k,\lambda} + 1\rangle = \sqrt{n_{k,\lambda} + 1}|n_{k,\lambda} + 1\rangle \Rightarrow a_{k,\lambda}^+|0\rangle = |k, \lambda\rangle \quad (3 - 49)$$

L'utilisation de la règle d'or de Fermi permet de calculer le taux de transition radiative pour un électron à partir d'un état initial $|i\rangle = |J_i\rangle$ à un état final $|f\rangle = |J_f\rangle$.

Le champ de rayonnement, quant à lui, a un état initial donné par le vide, $|0\rangle$, et un état final dans lequel nous avons un photon, $|k, \lambda\rangle$ [14,43] :

$$\Gamma_{i \rightarrow f}(t) = \frac{2\pi}{\hbar^2} |\langle J_f | \otimes \langle k, \lambda | H_{para} | J_i \rangle \otimes |0\rangle|^2 \delta(\omega_{if} - \omega_k) \quad (3 - 50)$$

avec la fréquence du photon émis donnée par $\omega_{if} = \frac{E_i - E_f}{\hbar}$.

En utilisant maintenant l'expression du potentiel vecteur, équation (3-46), seul le deuxième terme contribuera au taux de transition :

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{k,\lambda}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle J_f | \otimes \langle k, \lambda | \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_k V}} \hat{\varepsilon}_{k,\lambda}^* a_{k,\lambda}^+ e^{-ik \cdot r} \cdot \hat{p} | J_i \rangle \otimes |0\rangle \right|^2 \delta(\omega_{if} - \omega_k) \quad (3 - 51)$$

Il est maintenant utile d'utiliser les propriétés de l'opérateur d'annihilation, qui agit en fait comme un opérateur de création à gauche, $\langle k, \lambda | = \langle 0 | a_{k,\lambda}$. Avec cela et en tenant également compte de la relation de commutation,

$$[a_{k,\lambda}, a_{k',\lambda'}^+] = a_{k,\lambda} a_{k',\lambda'}^+ - a_{k',\lambda'}^+ a_{k,\lambda} = \delta_{kk'} \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (3 - 52)$$

nous arrivons à notre expression finale :

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{k,\lambda}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle J_f | \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_k V}} \hat{\varepsilon}_{k,\lambda}^* e^{-ik \cdot r} \cdot \hat{p} | J_i \rangle \right|^2 \delta(E_{if} - \hbar\omega_k) \quad (3 - 53)$$

Il est important de noter que, selon le nombre d'électrons du système, certaines approximations peuvent être faites pour évaluer le taux de transition. Un exemple en est l'approximation du dipôle électrique si $\alpha Z \ll 1$. Comme indiqué précédemment, les résultats ne sont valables que pour un système simple à un seul électron. Comme nous considérons dans ce travail un système à plusieurs électrons, les calculs, bien que non démontrés, seront beaucoup plus complexes car il faudra tenir compte de toutes les configurations possibles.

b. Transitions non radiatives

L'autre mécanisme qui rivalise avec le processus radiatif pour la relaxation atomique d'un atome excité est la transition non radiative. Comme dans le processus précédent, un électron comblera le vide laissé dans l'atome. La différence réside toutefois dans le fait que l'énergie n'est pas libérée sous forme de photon, mais par l'émission d'un électron de la couche externe, l'électron Auger. Alors que dans le processus radiatif, l'atome se retrouve dans un état final avec une lacune, l'effet Auger laisse l'atome dans un état final avec deux lacunes. Ce mécanisme est représenté dans la figure 3-8.

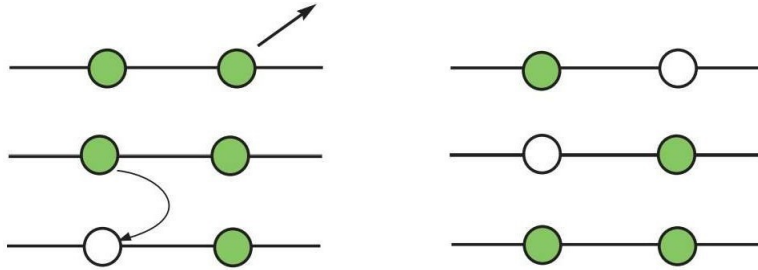


Figure 3-8: Représentation d'une transition non radiative (Auger) [14,26]. Dans un état initial (à gauche), l'atome présente une lacune interne, tandis que dans l'état final (à droite), la lacune est comblée par un électron, accompagné de l'émission d'un électron de la couche externe (électron Auger), laissant l'atome dans un état final avec deux lacunes.

D'un point de vue non relativiste, les transitions non radiatives peuvent être considérées comme le produit de l'interaction coulombienne entre deux électrons participant à la transition :

$$V = \sum_{p \neq q} \frac{e^2}{r_{pq}} \quad (3 - 54)$$

Comme pour la transition radiative, il est possible d'utiliser la règle d'or de Fermi pour obtenir le taux de transition par unité de temps. Dans ce cas, celui-ci est donné par :

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle|^2 \rho(E_f) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \Psi_f | \sum_{p \neq q} \frac{e^2}{r_{pq}} | \Psi_i \rangle \right|^2 \rho(E_f) \quad (3 - 55)$$

dans laquelle Ψ_f et Ψ_i sont respectivement les fonctions d'onde des états final et initial de l'atome, et $\rho(E_f)$ est la densité des états finaux ayant une énergie E_f .

On peut considérer, à titre d'approximation, que les états initiaux et finaux peuvent être donnés par des configurations de deux électrons corrélés avec deux états de vacance. Initialement, l'une des vacances est située à l'intérieur de l'atome et l'autre dans le vide, tandis que dans l'état final, les deux vacances sont situées à l'intérieur de l'atome.

Avec cela, il est possible d'écrire :

$$\Gamma_{i \rightarrow f} \approx \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \phi_{n_f k_f j_f}^c(r_1) \phi_{n'_f k'_f j'_f}^d(r_2) \left| \frac{e^2}{r^{12}} \right| \phi_{n_i k_i j_i}^a(r_1) \gamma_{n'_i k'_i j'_i}^b(r_2) \right\rangle - \left\langle \phi_{n_f k_f j_f}^c(r_1) \phi_{n'_f k'_f j'_f}^d(r_2) \left| \frac{e^2}{r^{12}} \right| \phi_{n_i k_i j_i}^a(r_2) \gamma_{n'_i k'_i j'_i}^b(r_1) \right\rangle \right|^2 \quad (3-56)$$

Dans cette expression, ϕ représente la fonction d'onde d'un électron lié, tandis que γ est la fonction d'onde continue normalisée pour un électron par unité de temps.

On peut également noter que les termes entre crochets sont les éléments de matrice électrostatique directe et d'échange, J_{12} et k_{12} , déjà vus dans l'équation (3-23).

3.2.6 Paramètres atomiques fondamentaux

Dans l'étude des transitions atomiques, il est important de définir la probabilité totale de transition à partir d'un niveau initial donné. En considérant i comme le niveau initial, il peut y avoir des transitions vers plusieurs niveaux finaux possibles, comme le montre la figure 3-9.

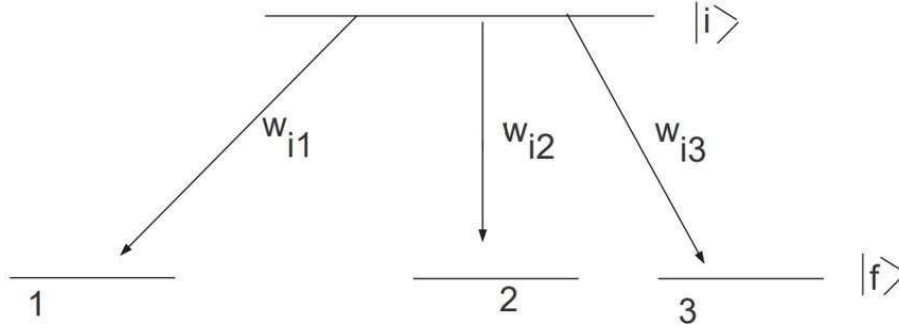


Figure 3-9: Transitions possibles d'un niveau initial i vers des niveaux finaux f [14,26]. Dans ce schéma, il existe trois canaux de désintégration différents pour le niveau initial i , chacun ayant sa propre probabilité (w_{i1} , w_{i2} et w_{i3}).

La probabilité de transition est donc donnée par la somme de toutes les probabilités de transition du niveau initial i vers les niveaux finaux f :

$$W_i = \sum_f w_{if} \quad (3-57)$$

Étant donné que la largeur de transition, Γ , et la durée de vie moyenne d'un niveau atomique, τ , doivent respecter le principe d'incertitude de Heisenberg, leur relation est donnée par :

$$\Gamma_i = \frac{\hbar}{\tau_i} = \hbar W_i = \hbar \sum_f w_{if} = \hbar \left(\sum_f w_{if}^R + \sum_f w_{if}^{NR} \right) \quad (3-58)$$

w_{if}^R et w_{if}^{NR} sont respectivement les probabilités de transition pour les transitions radiatives et non radiatives. Si l'on considère maintenant la largeur totale de transition pour une configuration de sous-

couche donnée X , il faut également tenir compte de tous les états initiaux possibles. Comme les niveaux atomiques peuvent être caractérisés par leur moment cinétique total, J , la largeur de transition doit être pondérée par le nombre de valeurs m possibles du niveau initial, $2J_i + 1$:

$$\Gamma_X = \frac{\sum_{i \in X} (2J_i + 1) \Gamma_i}{\sum_{i \in X} (2J_i + 1)} = \frac{\hbar \sum_{i \in X} (2J_i + 1) \sum_f w_{if}}{\sum_{i \in X} (2J_i + 1)} \quad (3 - 59)$$

Cela permet de définir la probabilité qu'une lacune initiale dans une sous-couche X donne lieu à une transition radiative ou non radiative. Ces probabilités sont données respectivement par les rendements de fluorescence, le rendement d'Auger et le rendement de Coster-Kronig. Les lacunes de la couche L sont principalement comblées par des transitions sans rayonnement. Par conséquent, la durée de vie initiale des lacunes est généralement déterminée par les taux de transition Auger et Coster-Kronig.

Il a été constaté il y a longtemps déjà que les modèles atomiques relativistes sont nécessaires pour les calculs de transition Coster-Kronig. Les modèles non relativistes (tels que le modèle classique Hartree-Fock) présentaient un écart significatif par rapport aux valeurs mesurées expérimentalement, en particulier pour les éléments à numéro atomique élevé [42].

Dans ce travail, les coefficients Coster-Kronig f_{ij} ($ij=12, 13$, et 23), F_{123} , et F_1 sont calculés à l'aide du code de calcul relativiste MCDFGME (version 2019), développé par Indelicato et Desclaux [44,45], qui met en œuvre la méthode Dirac-Fock à configurations multiples (MCDF). Le code a été utilisé dans l'approche à configuration unique, avec l'interaction de Breit (parties magnétique et de retard) et le terme de polarisation du vide d'ordre principal (potentiel d'Uehling) inclus dans le calcul du champ auto-cohérent. D'autres contributions de la QED, telles que l'auto-énergie de l'électron et les termes de polarisation du vide d'ordre supérieur, sont incluses en tant que perturbations. Les fonctions d'onde et les énergies des niveaux concernés ont été optimisées en tenant compte de la relaxation complète des deux états initial et final, afin de fournir des énergies et des fonctions d'onde plus précises. Pour traiter la non-orthogonalité des fonctions d'onde, le code utilise le formalisme décrit par Löwdin [46]. Pour traiter les transitions non radiatives, nous avons supposé un processus en deux étapes dans lequel la désintégration est indépendante de l'ionisation, de sorte que l'électron éjecté lors de la création du trou initial n'interagit pas avec l'électron émis, et que l'état du trou central interagit très faiblement avec ce dernier électron, ce qui permet de calculer les taux de transition à partir de la théorie des perturbations. Les fonctions d'onde de l'état continu ont été obtenues en résolvant les équations de Dirac-Fock avec le même potentiel atomique que l'état initial, normalisé pour représenter un électron éjecté par unité d'énergie. Les fonctions d'onde multi-configuration au-delà du couplage intermédiaire n'ont pas été utilisées car l'approximation utilisée pour l'évaluation du

taux non radiatif ne peut pas être utilisée dans un calcul de niveau optimisé avec des orbitales de corrélation [47].

Pour faciliter les calculs, un logiciel spécial a été développé afin de traiter les énergies de niveau, les taux de transition et les sommes partielles nécessaires au calcul des coefficients de base. Dans ce logiciel, toutes les configurations à un et deux intervalles sont générées automatiquement à partir de la configuration de l'état fondamental calculée par la méthode de Dirac-Fock, comme décrit dans Rodrigues et al. [48].

En supposant que les niveaux initiaux dans la sous-couche à un trou S_n , avec un moment cinétique total j_i , sont statistiquement peuplés, la largeur radiative (R) de la sous-couche est obtenue en additionnant les largeurs radiatives partielles Γ_{ij}^R sur tous les niveaux initiaux i avec un trou dans la sous-couche, qui se désintègrent par rayonnement vers tous les niveaux finaux j dans les sous-couches de plus haute énergie,

$$\Gamma_{S_n}^R = \frac{\sum_{ij}(2j_i+1)\Gamma_{ij}^R}{\sum_i(2j_i+1)} \quad (3 - 60)$$

où la définition habituelle s'applique,

$$\Gamma_{ij}^R = \hbar W_{ij}^R \quad (3 - 61)$$

Ici, W_{ij}^R est la probabilité de transition radiative du niveau i au niveau j . De même, la largeur non radiative de la sous-couche S_n est définie par :

$$\Gamma_{S_n}^{NR} = \frac{\sum_{ik}(2j_i+1)\Gamma_{ik}^{NR}}{\sum_i(2j_i+1)}, \quad (3 - 62)$$

où

$$\Gamma_{ik}^{NR} = \hbar W_{ik}^{NR} \quad (3 - 63)$$

Ici, W_{ik}^{NR} désigne la probabilité d'une transition non radiative du niveau i au niveau k . Ainsi, Γ_{ik}^{NR} représente la largeur partielle associée à une transition non radiative depuis un état initial, contenant une seule lacune dans la sous-couche S_n , à un état final k caractérisé par deux lacunes situées dans la même couche ou dans des couches ou sous-couches de plus haute énergie. Ce processus implique l'émission d'un électron dans le continuum.

Le rendement de Coster-Kronig $f_{S_n, n'}$ pour la sous-couche ($S = L, M, \text{ or } N$) est donné par l'expression :

$$f_{S_n, n'} = \frac{\Gamma_{S_n}^{NRCK}}{\Gamma_{S_n}^R + \Gamma_{S_n}^{NR}} \quad (3 - 64)$$

Et pour le rendement Auger a_{S_n} :

$$a_{S_n} = \frac{\Gamma_{S_n}^{\text{NRA}}}{\Gamma_{S_n}^{\text{R}} + \Gamma_{S_n}^{\text{NR}}} \quad (3 - 65)$$

Mais, dans l'équation (3-64), seules les transitions de Coster-Kronig sont prises en compte dans la largeur $\Gamma_{S_n}^{\text{NRCK}}$, de même dans l'équation (3-65), seules les transitions d'Auger sont prises en compte dans la largeur $\Gamma_{S_n}^{\text{NRA}}$.

3.3. Références

- [1] Krause, M. O. (1979). *J. Phys. Chem. Ref. Data* 8, 307–327.
- [2] Puri, S., Mehta, D., Chand, B., Singh, N., & Trehan, P. N. (1993). *X Ray Spectrom.* 22, 358.
- [3] McGuire, E. J. (1971). *Phys. Rev. A* 3, 587–604.
- [4] Ménesguen, G., Cugier, P., Dumas, F., Guillaud, J.F., Lacroix, G., Lefebvre, A., Liorzou, B., & Thouvenin, B. (2017). *Cont. Shelf Res.* 141, 63–76.
- [5] Kahoul, A., Abassi, A., Deghfel, B., & Nekkab, M. (2011). *Radiat. Phys. Chem.* 80, 369–377.
- [6] Özdemir, Y. (2003). *Radiation Physics and Chemistry* 66, 317–322.
- [7] Puri, S. (2007). *At. Data Nucl. Data Tables* 93, 730–741.
- [8] Öz, E., Özdemir, Y., Ekinci, N., Ertuğrul, M., Şahin, Y., & Erdogan, H. (2000). *Spectrochim. Acta Part B* 55, 1869–1877.
- [9] Borovoï, N. A., Ishchenko, R. N., & Shiyanovskii, V. I. (2003). *Opt. Spectrosc.* 95, 525– 528.
- [10] Risch, K. (1958). *Z. Phys.* 150, 87–98.
- [11] Weksler, M., & de Pinho, A. G. (1973). *Phys. Rev. A* 8, 303–309.
- [12] Karttunen, E. I. (1971). *Doctoral Dissertation, Georgia Institute of Technology.*
- [13] Byrne, J., Gelletly, W., Ross, M. A., & Shaikh, F. (1968). *Phys. Rev.* 170, 81–88.
- [14] Gouveia do Carmo, F. J. (2023). *Master's dissertation, Departamento de Física, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa.*
- [15] Hartree, D. R. (1928). *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24(1), 111–132.
- [16] Slater, J. C. (1930). *Phys. Rev.*, 25, 210.
- [17] Fock, V. (1930). *Zeitschrift für Physik*, 61, 126–148.
- [18] Grant, I. P. (1970). *Adv. Phys.*, 19, 747.
- [19] Gong, X.-Q. (2014). *Advances in Chemical Engineering*, 44.
- [20] Sucher, J. (1988). *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 21, L585.
- [21] Lindgren, I. (1990). *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 23, 1085.
- [22] Gorceix, O. (1987). *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.*, 20, 639.
- [23] Indelicato, P. (1989). *J. Phys. (Paris) Colloq.*, 50, C-1, 239.
- [24] Koziół, K., Giménez, C. A., & Aucar, G. A. (2018). *J. Chem. Phys.*, 148(4).
- [25] Lamb, W. E., & Retherford, R. C. (1947). *Phys. Rev.*, 72(3), 241–243.
- [26] Catarina B. A. Casteleiro. (2008). *Master's dissertation, Departamento de Física, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa.*
- [27] Wichmann, E. H., & Kroll, N. M. (1956). *Phys. Rev.*, 101(2), 843.
- [28] Uehling, E. A. (1935). *Phys. Rev.*, 48, 55.
- [29] Johnson, W. R., Cheng, K. T., & Chen, M. H. (2004). *Theoretical and Computational Chemistry*, 14, 120-187.
- [30] Mohr, P. J. (1975). *Phys. Rev. Lett.*, 34, 1050.
- [31] Welton, T. A. (1948). *Phys. Rev.*, 74, 1157.
- [32] Kim, Y.-K. (1991). *Phys. Rev. A*, 44, 148.
- [33] Indelicato, P., & Desclaux, J. P. (1990). *Phys. Rev. A*, 42, 5139.
- [34] Sugar, J., Kaufman, V., Indelicato, P., & Rowan, W. L. (1989). *Journal of the Optical Society of America B*, 6(8), 1437-1443.
- [35] Nguyen, T. V. B. (2023). *Rad. Phys. and Chem.*, 204, March.
- [36] Scofield, J. H. (1969). *Phys. Rev.*, 179(1), 9–16.
- [37] Scofield, J. H. (1975). *Atomic Inner-Shell Processes*, 265–292. Elsevier.
- [38] Chen, M. H., Crasemann, B., & Mark, H. (1979). *Atom Data Nucl. Data*, 24(1), 13–37.
- [39] Chen, M. H., Crasemann, B., & Mark, H. (1980). *Phys. Rev. A*, 21(2), 449–453.

- [40] Chen, M. H., Crasemann, B., & Mark, H. (1983). *Phys. Rev. A*, 27(6), 2989–2994.
- [41] Chen, M. H., et al. (1979). *Phys. Rev. A*, 19(6), 2253–2259.
- [42] Chen, M. H., Crasemann, B., & Mark, H. (1981). *Phys. Rev. A*, 24(1), 177–182.
- [43] Simons, B. (n.d.). *Lecture notes for "Part II: Advanced Quantum Mechanics" class, University of Cambridge, Lec. 19*. Accessible.
- [44] Desclaux, J. P. (1975). *Comput. Phys. Commun.* 9, 31–45.
- [45] Indelicato, P., & Desclaux, J. P. (2007). *arXiv:physics/0701239*.
- [46] Löwdin, P.-O. (1955). *Phys. Rev.*, 97, 1474–1489.
- [47] Guerra, M., Sampaio, J. M., Parente, F., Indelicato, P., Hönicke, P., Müller, M., Beckhoff, B., Marques, J. P., & Santos, J. P. (2018). *Phys. Rev. A*, 97, 042501.
- [48] Rodrigues, G. C., Indelicato, P., Santos, J. P., Patté, P., & Parente, F. (2004). *At. Data Nucl. Data Tables*, 86, 117–233.

Chapitre 4

Résultats et discussion

Nous reconnaissons que plusieurs compilations et évaluations théoriques des rendements Coster-Kronig et Auger et de la couche L existent déjà dans la littérature. Bien que plusieurs études se soient concentrées sur la détermination expérimentale et théorique des rendements Coster-Kronig de la couche L , il existe toujours un besoin de données empiriques, cohérentes récentes et fiables. De nombreux ensembles de données expérimentales antérieurs souffrent d'une résolution énergétique limitée, d'une couverture élémentaire restreinte ou d'incohérences dues à des différences dans les sources d'excitation et les systèmes de détection. De même, les modèles théoriques, bien que certainement utiles, dépendent souvent d'approximations spécifiques qui peuvent ne pas refléter pleinement les réalités expérimentales. Cela crée un déficit de connaissances où les approches empiriques peuvent offrir une synthèse cruciale des mesures expérimentales et des tendances théoriques jusqu'à ce que de nouveaux ensembles de données expérimentales de haute qualité soient générés.

4.1 Objectifs et contribution du travail

Notre objectif n'était pas de dupliquer et de reproduire des travaux antérieurs, mais de fournir un cadre empirique entièrement mis à jour, unifié et simplifié qui les complète et répond aux besoins actuels tant dans les applications que dans les études futures.

La nouveauté et la contribution de nos travaux peuvent être résumées comme suit :

Intégration des données récentes et continuité avec notre premier article. Précédemment [1], nous avons compilé et examiné (au deuxième chapitre) de manière critique tous les résultats expérimentaux disponibles sur les rendements Coster-Kronig et Auger de la couche L couvrant les sept dernières décennies. À notre connaissance, notre travail représente la première compilation complète et systématique de telles données sur une période aussi longue.

La présente étude s'appuie directement sur cette base solide : après avoir assemblé l'ensemble complet des données, nous l'avons utilisé ici pour développer des ajustements empiriques simplifiés et des comparaisons, assurant ainsi la continuité entre les deux travaux. En outre, nous avons calculé la combinaison des coefficients F_1 , et F_{123} , qui, à notre connaissance, n'avaient pas été évalués auparavant.

Ces quantités sont importantes car F_{123} est nécessaire pour exprimer la distribution finale des lacunes (V_3) en termes de distribution primaire des lacunes (N_1, N_2, N_3) en utilisant les rendements Coster-Kronig appropriés (f_{ij}). De plus, F_{123} est également utilisé pour déduire des paramètres atomiques clés tels que les rendements moyens de fluorescence de la sous-couche L et les sections efficaces de production des rayons X de la couche L . De même, F_1 représente la probabilité totale L_1 des rendement de Coster-Kronig, fournissant ainsi un paramètre essentiel pour la modélisation précise des processus de désexcitation des sous-couches.

- Nouveaux calculs théoriques : en plus des ajustements empiriques, nous avons effectué des calculs théoriques à l'aide du code MCDFGME [2,3] pour un ensemble d'éléments. Pour certains de ces éléments, les rendements Coster-Kronig et Auger sont calculés ici pour la première fois. Ces nouvelles valeurs théoriques élargissent la base de données disponible et fournissent des repères supplémentaires pour la comparaison non seulement avec les compilations plus anciennes mais aussi avec nos résultats empiriques et semi-empiriques.
- Approche d'ajustement unifiée et pratique : alors que les compilations antérieures combinaient souvent des données hétérogènes sans schéma d'interpolation commun, notre approche applique une méthode d'ajustement polynomial cohérente à l'ensemble des données.

Cela garantit une transition en douceur et une représentation continue facile à mettre en œuvre dans des contextes pratiques tels que les simulations Monte Carlo, les études XRF/PIXE et les codes de transport du rayonnement.

- Comblent les lacunes et mettent en évidence les faiblesses : dans les régions de Z où les données restent rares ou incertaines, nos fonctions ajustées servent d'outils d'interpolation, fournissant des valeurs approximatives tout en mettant en évidence les domaines dans lesquels des efforts expérimentaux supplémentaires sont les plus urgents. L'objectif est de fournir à la fois des orientations et une motivation pour relancer des programmes d'étude de suivi à l'échelle mondiale.
- Complémentarité avec les modèles théoriques : les approches théoriques (AHS, DHS, MCDF, etc.) fournissent des principes fondamentaux ou des connaissances basées sur la physique. Notre cadre empirique ne remplace pas ces approches, mais sert plutôt de ressource complémentaire et pratique, en particulier lorsque les calculs théoriques ne sont pas encore disponibles ou restent exigeants sur le plan informatique.
- Dans le prolongement de nos travaux systématiques antérieurs sur le calcul empirique des paramètres atomiques fondamentaux tels que les rendements de fluorescence [4-14], la présente étude consiste à déterminer les valeurs empiriques des rendements de transition Coster-Kronig f_{12} , f_{13} , f_{23} , F_{123} , et F_1 et Auger a_1 , a_2 , a_3 à l'aide des données expérimentales fournies dans nos travaux précédents (Chapitre 02), et de nouveaux calculs théoriques pour certains éléments sélectionnés, effectués à l'aide de la méthode multiconfiguration de Dirac-Fock (MCDF).

4.2 Résultats et discussion

4.2.1 Transitions de Coster-Kronig

Dans les tableaux (4-1), (4-2), (4-3), (4-4) et (4-5), nous présentons respectivement nos valeurs calculées des coefficients Coster-Kronig empiriques $(f_{12})_{\text{emp}}$, $(f_{23})_{\text{emp}}$, $(f_{13})_{\text{emp}}$, $(F_{123})_{\text{emp}}$, et $(F_1)_{\text{emp}}$ pour tous les éléments compris dans l'intervalle $40 \leq Z \leq 98$, ainsi que les valeurs théoriques, pour les éléments ${}_{28}\text{Ni}$, ${}_{29}\text{Cu}$, ${}_{30}\text{Zn}$, ${}_{32}\text{Ge}$, ${}_{33}\text{As}$, ${}_{34}\text{Se}$, ${}_{36}\text{Kr}$, ${}_{48}\text{Cd}$, ${}_{50}\text{Sn}$, ${}_{52}\text{Te}$, ${}_{80}\text{Hg}$, ${}_{83}\text{Bi}$, et ${}_{86}\text{R}$. Afin de comparer efficacement nos résultats empiriques et théoriques avec ceux d'autres auteurs, y compris les valeurs expérimentales, théoriques et ajustées, les résultats actuels sont représentés graphiquement dans la figure (4-1), en fonction du numéro atomique Z .

Nous avons noté les observations suivantes :

- Pour les valeurs empiriques de $(f_{12})_{\text{emp}}$ représentées dans la figure (4-1-a) et calculées à l'aide de l'équation (3-1) (voir le chapitre 03), la comparaison révèle une concordance satisfaisante entre nos résultats et ceux obtenus expérimentalement [15-17], théoriquement [18,19] et par des méthodes d'ajustement [20-24], pour tous les éléments allant de ${}_{40}\text{Zr}$ à ${}_{96}\text{Cm}$. Les résultats de cette étude montrent une excellente concordance avec certaines références expérimentales, principalement Öz et al. [15], avec de faibles différences en pourcentage $\text{RD}(\%) = \left| \frac{((f_{ij})_{\text{exp}} - (f_{ij})_{\text{emp}})}{(f_{ij})_{\text{emp}}} \right| \times 100$ pour certains éléments, tels que 0 % dans $({}_{86}\text{Rn})$ et 3.93 % dans $({}_{57}\text{La})$ bien que nous observions des différences importantes pour d'autres, telles que ~33 % dans le cas de $({}_{84}\text{Po})$ et ~31 % pour le $({}_{93}\text{Np})$. Les données de Bansal et al. [17] montrent également une concordance remarquable, en particulier pour les éléments lourds, où les différences de pourcentage variaient entre ~11 % et ~19 %. À l'exception du ${}_{62}\text{Sm}$ (~33 %), les différences entre nos résultats et ceux de Söğüt et al. [16] variaient entre ~17 % et ~41%. Les valeurs pour les éléments dans la plage $40 \leq Z \leq 50$ diffèrent considérablement de nos résultats, dépassant 50 %.

Cependant, pour certains éléments, l'écart relatif $\text{RD}\%$ varie d'environ 2 % à 9 %. Lorsque nous comparons nos valeurs à celles de Krause [20], nous observons une excellente concordance, en particulier pour des éléments tels que le ${}_{82}\text{Pb}$ (0.83%), ${}_{80}\text{Hg}$ (0.78%), ${}_{84}\text{Po}$ (0.90%), et ${}_{86}\text{Rn}$ (0.99%). En revanche, certaines références ont montré une variabilité modérée, parmi lesquelles Puri et al. [21], avec des différences allant de 2.1 % à 66 %, et Chen et al. [18], avec une variabilité relative allant de 4.6 % à 30 %. Une variation notable a été observée pour certains éléments, par exemple ${}_{40}\text{Zr}$, ${}_{45}\text{Rh}$, ${}_{83}\text{Bi}$, et ${}_{80}\text{Hg}$.

Une bonne concordance avec Öz et al. [15], qui ont également utilisé une technique d'ajustement pour dériver les valeurs, allant de 3.4 % à 16 % pour plusieurs éléments, a été notée. McGuire [22], Campbell [23] et Campbell [24] ont montré des différences modérées pour certains éléments, expliquées par les différents modèles théoriques adoptés.

- L'examen de la figure (4-1-b) a simplifié le processus de comparaison des valeurs de Crasemann et al. [19] et celles obtenues par des méthodes d'ajustement [20-23] avec nos valeurs empiriques du $(f_{13})_{\text{emp}}$ du coefficient Coster-Kronig calculé à l'aide de la formule (3-1) pour les éléments de ${}_{39}\text{Y}$ à ${}_{98}\text{Cf}$. Les calculs concordent étroitement, jusqu'à 7.2 %, avec

ceux rapportés par Kaur et al. [25]. De plus, nos données concordent étroitement, entre 1.5 % et 14 %, avec les mesures d'Öz et al. [15]. En outre, les valeurs théoriques montrent une concordance acceptable, entre 1.1 % et 17 %, avec Chen et al. [18], et entre 0.38 % et 16 % avec Crasemann et al. [19]. Cependant, des divergences notables sont observées pour certains éléments, en particulier le $_{50}\text{Sn}$, avec Crasemann et al. [19], et le $_{39}\text{Y}$ avec Chen et al. [18]. Les calculs actuels correspondent étroitement à ceux rapportés par Campbell [23], avec des valeurs RD% comprises entre 0 % et 11 %. Nos résultats montrent une forte concordance avec Campbell [23], en particulier dans la région des numéros atomiques élevés ($Z \geq 77$), où les différences relatives varient de 0 % à 8.5 %, par exemple $_{83}\text{Bi}$ (0 %), $_{82}\text{Pb}$ (0.66 %) et $_{80}\text{Hg}$ (4.7 %).

Cela reflète la précision du modèle utilisé pour représenter les éléments lourds. Par rapport aux résultats de Puri et al. [21], la concordance semblait plus diversifiée, en particulier dans la région atomique intermédiaire ($Z = 50 - 71$), avec des différences allant de 1.5 % à 20 %, par exemple $_{52}\text{Te}$ (1.9 %), $_{60}\text{Nd}$ (16 %) et $_{68}\text{Er}$ (20 %). Ces écarts sont relativement élevés, mais restent dans les limites acceptables dans cette gamme, compte tenu des incertitudes globales.

Pour les éléments avec $Z = 39 - 49$, les différences les plus importantes ont été observées dans la comparaison avec les données de Puri et al [21], avec des écarts allant de ~ 20 % à ~ 51 %. Lorsque l'on compare nos résultats avec les valeurs de Krause [20], on observe une bonne concordance dans la plupart des cas, avec des différences relatives comprises entre 0 % et 20 %, à l'exception de l'élément $_{75}\text{Re}$. En revanche, la comparaison de nos résultats avec ceux de McGuire [22] a montré une plus grande variabilité. Alors que certains éléments, tels que le $_{74}\text{W}$ (0.60 %) et le $_{60}\text{Nd}$ (5.9 %), ont montré une bonne concordance, d'autres, tels que le $_{50}\text{Sn}$ et le $_{44}\text{Ru}$ (32 %), ont présenté un écart important.

- En ce qui concerne le coefficient Coster-Kronig $(f_{23})_{\text{emp}}$, la figure (4-1-c) illustre la progression de notre modèle empirique. résultats en fonction du numéro atomique Z , calculés à l'aide de la formule (3-1) (Chapitre 03) pour les éléments allant de $_{40}\text{Zr}$ à $_{96}\text{Cm}$. La comparaison englobe les résultats théoriques [18,26], les résultats ajustés [15,20-23] et les données expérimentales [15,27]. Les résultats de notre étude concordent bien avec les valeurs théoriques publiées par Chen et al. [18], avec des différences relatives allant de 0.71 % à 12 %, sauf pour $_{40}\text{Zr}$, $_{92}\text{U}$ et $_{94}\text{Pu}$. Par rapport aux données théoriques de Chen et al. [26], les

écarts relatifs variaient généralement de 7.4 % à 30 %. Cependant, cette divergence a diminué progressivement à partir de $Z = 50$, atteignant des valeurs faibles dans la série des lanthanides (57 – 71), où les différences vont de 0 % dans Yb à 9.2 % dans La, avec une correspondance presque parfaite (0%) dans ${}_{69}\text{Tm}$ et ${}_{74}\text{W}$. En revanche, la comparaison avec les données de Campbell [23] a révélé un écart de 43 % dans ${}_{40}\text{Zr}$, qui a progressivement diminué pour atteindre 12 % dans le Ce. Dans la plage $Z = 51 - 91$, il est resté compris entre 0 % et 10%. Il convient toutefois de noter que certains actinides ont présenté à nouveau des écarts élevés, en particulier ${}_{92}\text{U}$ (37%) et ${}_{93}\text{Np}$ (49%). Pour McGuire [22], les écarts varient généralement entre 0.67 % et 19 %, mais dépassent 20 % pour certains éléments. Nos résultats concordent avec ceux d'Öz et al. [15]. La comparaison des résultats de Krause [20] avec les calculs actuels a montré que la plupart des différences relatives se concentrent dans une fourchette étroite de valeurs faibles comprises entre 2.7 % et 9.8 %, mais des écarts supérieurs à 20 % ont été enregistrés pour le ${}_{40}\text{Zr}$ (25 %), ${}_{92}\text{U}$ (25 %), ${}_{93}\text{Np}$ (28 %), ${}_{94}\text{Pu}$ (28 %) et ${}_{95}\text{Am}$ (20 %). Enfin, les résultats expérimentaux obtenus par Öz et al. [15] et Gupta et al. [27] concordent bien avec les calculs actuels. La plupart des différences se situent entre 0.90 % et 5.3 %, à l'exception d'écarts légèrement plus élevés pour le ${}_{81}\text{Tl}$ (7.8 %) et le ${}_{83}\text{Bi}$ (7.3 %). De même, les données ont montré une excellente concordance pour le ${}_{78}\text{Pt}$ (0 %) et le ${}_{74}\text{W}$ (2.9 %), dans la même plage de référence (0 %-5 %), tandis que des écarts élevés ont été signalés pour le ${}_{82}\text{Pb}$ (7.9 %) et le ${}_{92}\text{U}$ (29 %).

- Pour les valeurs empiriques de $(F_{123})_{\text{emp}}$ et $(F_1)_{\text{emp}}$ représentées dans les figures (4-1-d) et (4-1-e), la comparaison révèle une concordance entre nos résultats et ceux obtenus expérimentalement [15,25], théoriquement [18,19] et par des méthodes d'ajustement [15,20-23], pour tous les éléments allant du ${}_{40}\text{Zr}$ au ${}_{96}\text{Cm}$.

En général, les résultats empiriques $(F_{123})_{\text{emp}}$ concordent avec les résultats de la comparaison entre les calculs actuels et d'autres références. McGuire [22] présente un écart de plus de 20 % par rapport à un minimum d'environ 1.4 %, les données de Krause [20] se caractérisent par des écarts compris entre 0 % et 8.7 %, à l'exception de certains éléments. On constate une concordance acceptable avec les valeurs de Chen et al. [18], la plupart des différences se situant entre 5.0 % et 17 %, avec une concordance pratiquement parfaite pour ${}_{50}\text{Sn}$ (0 %), tandis que des écarts importants sont observés pour ${}_{80}\text{Hg}$ (30 %) et ${}_{96}\text{Cm}$ (25 %).

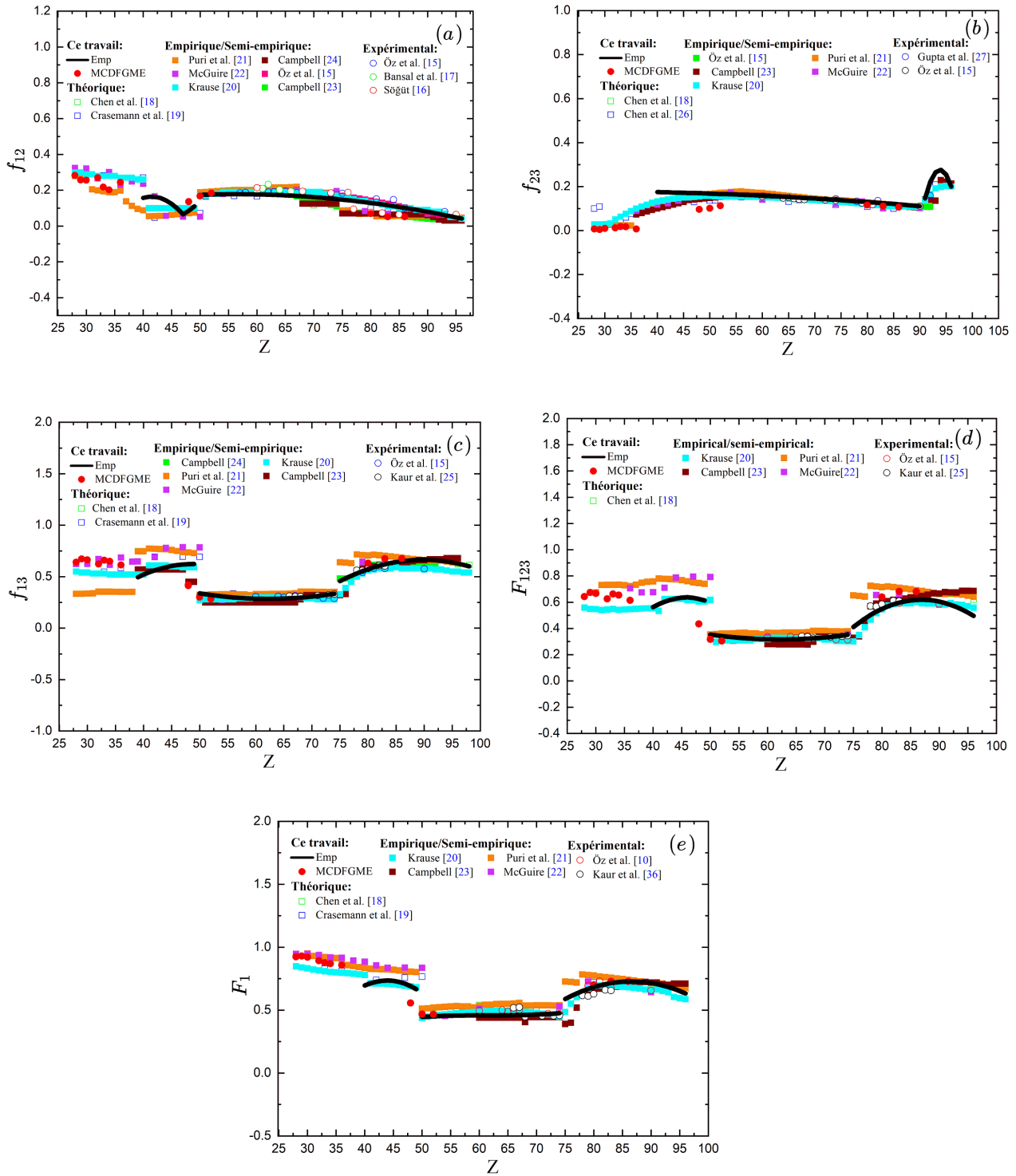


Figure 4-1 : Comparaison des valeurs empiriques et théoriques actuelles de Coster Kronig avec les valeurs théoriques et expérimentales pour f_{12} , f_{23} , f_{13} , F_{123} , et F_1 en fonction du nombre atomique Z .

Certaines des valeurs de Puri et al. [21] dépassaient un écart de 30 %. Les données de Campbell [23] montrent des écarts compris entre 0.60 % et 14 %. Pour Öz et al. [15], la plupart des différences se situent entre 0.48 % et 10 %, à l'exception de trois écarts élevés de 16 %, 41 % et 75 %. En revanche, les résultats de Kaur et al. [25] ont montré une bonne concordance, et la plupart des différences se situaient entre 0.6 % et 6.6 %. Il y avait quelques valeurs extrêmes de 12.5 %, mais dans l'ensemble, la concordance est acceptable.

Pour $(F_1)_{\text{emp}}$ il existe des variations dans l'amplitude des écarts observés entre les valeurs expérimentales et semi-empiriques rapportées dans les données de cette étude et celles présentées dans les travaux de Chen et al. [18], Krause [20] et Campbell [23] pour certains éléments. Les valeurs RD% varient de 0 % à 13%, en particulier dans la série des lanthanides et des éléments lourds, dans la gamme atomique $Z = 60$ à $Z = 96$. Les données présentent globalement une bonne concordance, avec des éléments tels que ${}_{60}\text{Nd}$, ${}_{62}\text{Sm}$, ${}_{63}\text{Eu}$, ${}_{66}\text{Dy}$ et ${}_{64}\text{Gd}$ présentent des écarts acceptables compte tenu de la qualité des données expérimentales disponibles. Ces résultats confirment la fiabilité des travaux antérieurs, en particulier ceux de McGuire [22] pour les éléments de numéro atomique intermédiaire. Cependant, les valeurs pour ${}_{50}\text{Sn}$ sont particulièrement extrêmes : 72 % pour Crasemann et al. [19] et 87 % pour Puri et al. [21].

Les éléments lourds tels que le ${}_{75}\text{Re}$ et le ${}_{76}\text{Os}$ présentent également des valeurs élevées, respectivement de 34 % et 35 %, comme indiqué dans Puri et al. [21]. En général, la plupart des écarts se situent dans la fourchette scientifiquement acceptée d'environ 0.2 % à 15 %.

- Nos résultats de calcul théorique, obtenus à l'aide de la méthode de Dirac-Fock à configurations multiples des éléments sélectionnés dans la gamme $28 \leq Z \leq 98$ sont présentées dans les tableaux (4-1) à (4-5).

Une bonne concordance est observée entre nos résultats et ceux obtenus expérimentalement [15-17], théoriquement [18,19] et par des méthodes d'ajustement [15,20-24], pour tous les éléments dont le numéro atomique est compris entre ${}_{28}\text{Ni}$ et ${}_{96}\text{Cm}$.

Sur la figure (4-1), nous pouvons voir que nos nouvelles valeurs théoriques calculées concordent généralement bien avec celles d'autres travaux. Cependant, des divergences existent pour certains éléments spécifiques par rapport aux valeurs théoriques de Puri et al. [21], avec un écart RD% compris entre 0 % et 12 %. Un écart d'environ 9 % est observé pour l'élément ${}_{36}\text{Kr}$. De même, en comparant nos résultats théoriques avec les calculs de

Crasemann et al. [19] et Chen et al. [18], nous trouvons des valeurs RD% comprises entre 4 % et 8 %, avec des écarts significatifs pour les éléments ^{33}As , ^{50}Sn et ^{56}Ba . Les résultats ajustés de Campbell [23,24] montrent généralement une bonne concordance, dans une fourchette de 1.5 % à 25 %. Les résultats de Krause [20] présentent également une bonne concordance. Cependant, des écarts plus importants apparaissent pour les éléments ^{80}Hg , ^{83}Bi et ^{86}Rn observés par Puri et al. [21], et les calculs ajustés par Öz et al. [15] révèlent également des divergences entre certaines plages de numéros atomiques. Bien que nos calculs théoriques concordent généralement fortement avec les valeurs empiriques, il existe des disparités notables pour certains éléments spécifiques dans la plage $28 \leq Z \leq 40$ par rapport aux valeurs théoriques de Krause [20], aux calculs ajustés de Puri et al. [21] et à ceux de Campbell [23].

En ce qui concerne les coefficients Coster-Kronig f_{23} , des divergences apparaissent pour $Z < 40$, lorsque l'on compare les valeurs empiriques à des valeurs théoriques et ajustées spécifiques, comme, par exemple, par rapport aux valeurs théoriques de Chen et al. [26] et Chen et al. [18]. Cependant, dans la même plage Z , il existe un alignement général avec les valeurs de Puri et al. [21] et Krause [20]. D'autre part, pour les valeurs Z supérieures à 40, nous constatons généralement une bonne concordance, à 1.3 %, avec les valeurs précédentes. En outre, un consensus est trouvé avec les valeurs de Campbell [23], Puri et al. [21], Öz et al. [15] et McGuire [22]. En ce qui concerne les valeurs théoriques actuellement calculées, elles concordent largement, mais des variations apparaissent notamment pour ^{50}Sn et ^{51}Sb .

Table 4-1: Calculs empiriques, théoriques, (ce travail), utilisant la méthode multiconfiguration Dirac-Fock (MCDFGME), de la transition Coster-Kronig f_{12} de ${}_{28}\text{Ni}$ to ${}_{96}\text{Cm}$.

Élément	Ce travail		Autres travaux								
	Emp	MCDFGME	Chen et al. [18]	Crasemann et al. [19]	Campbell [24]	Puri et al. [21]	Campbell [23]	McGuire [22]	Öz et al. [15]	Krause [20]	Exp ^k (Öz et al., [15]) ^m (Bansal et al., [17]) ^s (Soga, [16])
${}_{28}\text{Ni}$	-	0.283	-	-	-	0.279	-	0.325	-	0.3	-
${}_{29}\text{Cu}$	-	0.257	-	-	-	0.282	-	-	-	0.3	-
${}_{30}\text{Zn}$	-	0.256	0.284	-	-	0.284	-	0.322	-	0.29	-
${}_{31}\text{Ga}$	-	-	-	-	-	0.205	-	-	-	0.29	-
${}_{32}\text{Ge}$	-	0.270	-	-	-	0.199	-	0.266	-	0.28	-
${}_{33}\text{As}$	-	0.218	-	0.282	-	0.194	-	-	-	0.28	-
${}_{34}\text{Se}$	-	0.219	-	-	-	0.189	-	0.302	-	0.28	-
${}_{35}\text{Br}$	-	-	0.190	-	-	0.189	-	-	-	0.28	-
${}_{36}\text{Kr}$	-	0.244	0.198	0.225	-	0.198	-	-	-	0.27	-
${}_{37}\text{Rb}$	-	-	-	-	-	0.138	-	0.23	-	0.27	-
${}_{38}\text{Sr}$	-	-	-	-	-	0.113	-	0.249	-	0.27	-
${}_{39}\text{Y}$	-	-	-	-	-	0.096	-	-	-	0.26	-
${}_{40}\text{Zr}$	0.157	-	0.088	0.271	-	0.088	-	0.236	-	0.26	-
${}_{41}\text{Nb}$	0.163	-	-	-	-	0.055	-	-	-	0.1	-
${}_{42}\text{Mo}$	0.163	-	-	0.047	-	0.056	-	0.166	-	0.1	-
${}_{43}\text{Tc}$	0.157	-	-	-	-	0.057	-	-	-	0.1	-
${}_{44}\text{Ru}$	0.143	-	-	-	-	0.057	-	0.057	-	0.1	-
${}_{45}\text{Rh}$	0.124	-	0.062	-	-	0.062	-	-	-	0.1	-
${}_{46}\text{Pd}$	0.098	-	-	-	-	0.065	-	-	-	0.1	-
${}_{47}\text{Ag}$	0.065	-	0.068	0.063	-	0.068	-	0.052	-	0.1	-
${}_{48}\text{Cd}$	0.085	0.136	-	-	-	0.071	-	-	-	0.1	-
${}_{49}\text{In}$	0.11	-	-	-	-	0.074	-	-	-	0.1	-
${}_{50}\text{Sn}$	0.174	0.168	0.188	0.072	-	0.188	-	0.052	-	0.17	-
${}_{51}\text{Sb}$	0.175	-	-	0.164	-	0.190	-	-	-	0.17	-
${}_{52}\text{Te}$	0.176	0.184	0.192	-	-	0.193	-	-	-	0.18	-
${}_{53}\text{I}$	0.177	-	-	-	-	0.195	-	-	-	0.18	-
${}_{54}\text{Xe}$	0.177	-	0.196	-	-	0.197	-	0.179	-	0.19	-
${}_{55}\text{Cs}$	0.178	-	-	-	-	0.199	-	-	-	0.19	-
${}_{56}\text{Ba}$	0.178	-	0.200	0.168	-	0.201	-	-	-	0.19	-
${}_{57}\text{La}$	0.178	-	-	-	-	0.201	-	-	-	0.19	-
${}_{58}\text{Ce}$	0.177	-	-	-	-	0.201	-	-	-	0.19	-
${}_{59}\text{Pr}$	0.177	-	-	-	-	0.201	-	-	0.183	0.19	0.185 ^k
${}_{60}\text{Nd}$	0.176	-	0.209	0.165	-	0.210	0.19	0.207	0.186	0.19	0.188 ^k
${}_{61}\text{Pm}$	0.176	-	-	-	-	0.211	0.19	-	0.189	0.19	-
${}_{62}\text{Sm}$	0.175	-	-	-	-	0.212	0.19	-	0.191	0.19	0.196 ^m , 0.214 ^s
${}_{63}\text{Eu}$	0.174	-	0.214	-	-	0.215	0.19	-	0.193	0.19	0.21 ^m
${}_{64}\text{Gd}$	0.173	-	-	-	0.190	0.216	0.19	-	0.194	0.19	0.190 ^k , 0.233 ^m
${}_{65}\text{Tb}$	0.171	-	-	-	0.182	0.216	0.19	-	0.194	0.19	0.191 ^k , 0.203 ^m
${}_{66}\text{Dy}$	0.17	-	-	-	0.174	0.217	0.19	-	0.194	0.19	0.195 ^k , 0.194 ^m
${}_{67}\text{Ho}$	0.168	-	0.218	0.178	0.166	0.219	0.19	0.202	0.193	0.19	0.187 ^k , 0.19 ^m , 0.194 ^s
${}_{68}\text{Er}$	0.166	-	-	-	0.158	0.182	0.125	-	0.192	0.19	-
${}_{69}\text{Tm}$	0.164	-	-	-	0.150	0.183	0.125	-	0.190	0.19	-
${}_{70}\text{Yb}$	0.161	-	0.116	0.180	0.142	0.184	0.125	-	0.187	0.19	-
${}_{71}\text{Lu}$	0.159	-	-	-	0.134	0.185	0.125	-	0.185	0.19	-
${}_{72}\text{Hf}$	0.156	-	-	-	0.126	0.186	0.125	-	0.181	0.18	0.182 ^k , 0.185 ^s
${}_{73}\text{Ta}$	0.154	-	-	-	0.118	0.186	0.125	-	0.178	0.18	-
${}_{74}\text{W}$	0.151	-	0.185	0.160	0.110	0.186	0.125	0.195	0.174	0.17	0.183 ^k , 0.188 ^s
${}_{75}\text{Re}$	0.147	-	-	-	-	0.087	0.07	-	0.169	0.16	0.094 ^s
${}_{76}\text{Os}$	0.144	-	-	-	-	0.088	0.07	-	0.164	0.16	-
${}_{77}\text{Ir}$	0.141	-	-	-	0.076	0.088	0.07	-	0.159	0.15	-
${}_{78}\text{Pt}$	0.137	-	-	-	0.075	0.067	0.07	-	0.154	0.14	0.076 ^s
${}_{79}\text{Au}$	0.133	-	-	-	0.074	0.068	0.07	0.083	0.148	0.14	0.152 ^k , 0.073 ^s
${}_{80}\text{Hg}$	0.129	0.069	0.069	0.101	0.072	0.069	0.07	-	0.142	0.13	-
${}_{81}\text{Tl}$	0.125	-	-	-	0.069	0.054	0.07	-	0.136	0.13	0.148 ^k
${}_{82}\text{Pb}$	0.121	-	-	-	0.066	0.054	0.064	-	0.130	0.12	0.064 ^s
${}_{83}\text{Bi}$	0.116	0.051	0.0549	-	0.063	0.055	0.064	0.069	0.124	0.11	0.101 ^k
${}_{84}\text{Po}$	0.111	-	-	-	0.060	0.055	0.064	-	0.117	0.11	-
${}_{85}\text{At}$	0.106	-	-	0.082	0.057	0.056	0.064	-	0.110	0.1	-
${}_{86}\text{Rn}$	0.101	0.051	-	-	0.053	0.056	0.064	-	0.103	0.1	-
${}_{87}\text{Fr}$	0.096	-	-	-	0.050	0.056	0.064	-	0.097	0.1	-
${}_{88}\text{Ra}$	0.091	-	-	-	0.047	0.056	0.064	-	0.090	0.09	-
${}_{89}\text{Ac}$	0.085	-	-	-	0.044	0.057	0.064	-	0.083	0.09	-
${}_{90}\text{Th}$	0.08	-	0.0575	-	0.040	0.058	0.06	0.069	0.076	0.09	0.080 ^k
${}_{91}\text{Pa}$	0.074	-	-	-	0.038	0.053	0.05	-	0.069	0.08	-
${}_{92}\text{U}$	0.068	-	0.051	-	0.035	0.051	0.035	-	0.062	0.08	0.064 ^s
${}_{93}\text{Np}$	0.061	-	-	-	-	0.046	0.03	-	-	0.07	-
${}_{94}\text{Pu}$	0.055	-	-	-	-	0.046	0.03	-	-	0.05	-
${}_{95}\text{Am}$	0.048	-	-	-	-	0.047	0.03	-	-	0.05	-
${}_{96}\text{Cm}$	0.042	-	0.047	-	-	0.047	0.03	-	-	0.04	-

Table 4-2: Calcul empirique (ce travail), théoriques, utilisant la méthode multiconfiguration Dirac-Fock (MCDGME), de la transition Coster-Kronig f_{23} de ${}_{28}\text{Ni}$ to ${}_{96}\text{Cm}$.

Élément	Ce travail		Autres travaux						Expérimental *(Öz et al., [15]) †(Gupta et al., [27])	
	Emp	MCDGME	Chen et al. [18]	Chen et al. [26]	Öz et al. [15]	Puri et al. [21]	Campbell [23]	McGuire [22]		Krause [20]
${}_{28}\text{Ni}$	-	0.00685	-	0.0997	-	-	-	-	0.028	-
${}_{29}\text{Cu}$	-	0.00455	-	0.109	-	-	-	-	0.028	-
${}_{30}\text{Zn}$	-	0.00972	-	-	-	0.028	-	-	0.026	-
${}_{31}\text{Ga}$	-	-	-	-	-	0.026	-	-	0.032	-
${}_{32}\text{Ge}$	-	0.012	-	0.0249	-	0.025	-	-	0.05	-
${}_{33}\text{As}$	-	0.0179	-	0.0413	-	0.024	-	-	0.063	-
${}_{34}\text{Se}$	-	0.0165	-	0.0595	-	0.024	-	-	0.076	-
${}_{35}\text{Br}$	-	-	-	0.0764	-	0.023	-	-	0.088	-
${}_{36}\text{Kr}$	-	0.00671	0.095	0.0922	-	0.095	0.073	0.0897	0.1	-
${}_{37}\text{Rb}$	-	-	-	0.107	-	0.097	0.08	-	0.109	-
${}_{38}\text{Sr}$	-	-	-	-	-	0.099	0.087	0.115	0.117	-
${}_{39}\text{Y}$	-	-	-	-	-	0.101	0.094	-	0.126	-
${}_{40}\text{Zr}$	0.175	-	0.126	0.123	-	0.126	0.1	0.118	0.132	-
${}_{41}\text{Nb}$	0.174	-	-	-	-	0.129	0.106	-	0.137	-
${}_{42}\text{Mo}$	0.174	-	-	0.126	-	0.132	0.112	0.124	0.141	-
${}_{43}\text{Tc}$	0.173	-	-	-	-	0.136	0.118	-	0.144	-
${}_{44}\text{Ru}$	0.173	-	-	-	-	0.140	0.124	0.136	0.148	-
${}_{45}\text{Rh}$	0.172	-	0.152	-	-	0.153	0.13	-	0.15	-
${}_{46}\text{Pd}$	0.171	-	-	-	-	0.154	0.138	-	0.151	-
${}_{47}\text{Ag}$	0.171	-	0.155	0.130	-	0.156	0.141	0.152	0.153	-
${}_{48}\text{Cd}$	0.170	0.0960	-	-	-	0.159	0.143	-	0.155	-
${}_{49}\text{In}$	0.169	-	-	-	-	0.161	0.146	-	0.157	-
${}_{50}\text{Sn}$	0.168	0.1011	0.166	0.136	-	0.167	0.148	0.162	0.157	-
${}_{51}\text{Sb}$	0.167	-	-	0.138	-	0.169	0.151	-	0.156	-
${}_{52}\text{Te}$	0.166	0.1129	0.171	-	-	0.172	0.153	-	0.155	-
${}_{53}\text{I}$	0.166	-	-	-	-	0.173	0.156	-	0.154	-
${}_{54}\text{Xe}$	0.165	-	0.174	-	-	0.175	0.159	0.173	0.154	-
${}_{55}\text{Cs}$	0.164	-	-	-	-	0.177	0.159	-	0.154	-
${}_{56}\text{Ba}$	0.163	-	0.177	0.151	-	0.178	0.159	-	0.153	-
${}_{57}\text{La}$	0.162	-	-	-	-	0.176	0.159	-	0.153	-
${}_{58}\text{Ce}$	0.161	-	-	-	-	0.174	0.158	-	0.153	-
${}_{59}\text{Pr}$	0.160	-	-	-	0.154	0.172	0.158	-	0.153	-
${}_{60}\text{Nd}$	0.158	-	0.170	0.142	0.153	0.171	0.158	0.141	0.152	0.155a
${}_{61}\text{Pm}$	0.157	-	-	-	0.153	0.168	0.156	-	0.151	-
${}_{62}\text{Sm}$	0.156	-	-	-	0.152	0.166	0.154	-	0.15	-
${}_{63}\text{Eu}$	0.155	-	0.162	-	0.150	0.163	0.152	-	0.149	-
${}_{64}\text{Gd}$	0.154	-	-	-	0.149	0.160	0.15	-	0.147	0.147a
${}_{65}\text{Tb}$	0.152	-	-	0.131	0.148	0.158	0.148	-	0.145	0.150a
${}_{66}\text{Dy}$	0.151	-	-	-	0.146	0.155	0.146	-	0.143	0.145a
${}_{67}\text{Ho}$	0.150	-	0.152	-	0.145	0.153	0.144	0.138	0.142	0.142a
${}_{68}\text{Er}$	0.148	-	-	-	0.143	0.150	0.143	-	0.14	0.141a
${}_{69}\text{Tm}$	0.147	-	-	-	0.142	0.147	0.141	-	0.139	-
${}_{70}\text{Yb}$	0.146	-	0.143	-	0.140	0.145	0.14	-	0.138	-
${}_{71}\text{Lu}$	0.144	-	-	-	0.138	0.143	0.138	-	0.136	-
${}_{72}\text{Hf}$	0.143	-	-	-	0.136	0.141	0.136	-	0.135	0.139a
${}_{73}\text{Ta}$	0.141	-	-	-	0.135	0.139	0.134	-	0.134	-
${}_{74}\text{W}$	0.140	-	0.139	0.117	0.133	0.140	0.132	0.123	0.133	0.137a
${}_{75}\text{Re}$	0.138	-	-	-	0.131	0.138	0.131	-	0.13	-
${}_{76}\text{Os}$	0.136	-	-	-	0.129	0.136	0.130	-	0.128	-
${}_{77}\text{Ir}$	0.135	-	-	-	0.127	0.134	0.128	-	0.126	-
${}_{78}\text{Pt}$	0.133	-	-	-	0.126	0.132	0.126	-	0.124	0.133d
${}_{79}\text{Au}$	0.131	-	-	-	0.124	0.129	0.125	0.132	0.122	0.125a
${}_{80}\text{Hg}$	0.130	0.1164	0.127	0.108	0.122	0.128	0.123	-	0.12	-
${}_{81}\text{Tl}$	0.128	-	-	-	0.120	0.126	0.121	-	0.118	0.118a
${}_{82}\text{Pb}$	0.126	-	-	-	0.119	0.123	0.119	-	0.116	0.136d
${}_{83}\text{Bi}$	0.124	0.1109	-	-	0.117	0.121	0.117	0.101	0.113	0.115a
${}_{84}\text{Po}$	0.123	-	-	-	0.116	0.119	0.115	-	0.111	-
${}_{85}\text{At}$	0.121	-	-	0.100	0.114	0.117	0.113	-	0.111	-
${}_{86}\text{Rn}$	0.119	0.1064	-	-	0.113	0.114	0.111	-	0.11	-
${}_{87}\text{Fr}$	0.117	-	-	-	0.112	0.112	0.109	-	0.109	-
${}_{88}\text{Ra}$	0.115	-	0.110	-	0.111	0.111	0.107	-	0.108	-
${}_{89}\text{Ac}$	0.113	-	-	-	0.110	0.108	0.105	-	0.108	-
${}_{90}\text{Th}$	0.111	-	0.106	-	0.109	0.106	0.103	0.102	0.108	0.110a
${}_{91}\text{Pa}$	0.146	-	0.138	-	0.108	0.140	0.141	-	0.139	-
${}_{92}\text{U}$	0.222	-	0.138	-	0.108	0.139	0.14	-	0.167	0.158d
${}_{93}\text{Np}$	0.265	-	-	0.209	-	0.135	0.136	-	0.192	-
${}_{94}\text{Pu}$	0.276	-	0.225	-	-	0.228	0.23	-	0.198	-
${}_{95}\text{Am}$	0.254	-	-	-	-	0.220	0.222	-	0.203	-
${}_{96}\text{Cm}$	0.2	-	-	-	-	0.212	0.214	-	0.2	-

Table 4-3: Calculs empirique (ce travail), théoriques, utilisant la méthode multiconfiguration Dirac Fock (MCDFGME) de la transition Coster-Kronig f_{13} de ${}_{28}\text{Ni}$ to ${}_{98}\text{Cf}$.

Élément	Ce travail		Autres travaux							Exp *(Kaur <i>et al.</i> , [25]) *(Öz <i>et al.</i> , [15])
	Emp	MCDFGME	Chen <i>et al.</i> , [18]	Crasemann <i>et al.</i> , [19]	Campbell [24]	Puri <i>et al.</i> [21]	Campbell [23]	McGuire [22]	Krause [20]	
${}_{28}\text{Ni}$	-	0.64	-	-	-	0.334	-	0.622	0.55	-
${}_{29}\text{Cu}$	-	0.672	-	-	-	0.334	-	-	0.54	-
${}_{30}\text{Zn}$	-	0.664	-	-	-	0.335	-	0.624	0.54	-
${}_{31}\text{Ga}$	-	-	-	-	-	0.338	-	-	0.53	-
${}_{32}\text{Ge}$	-	0.622	-	-	-	0.354	-	0.671	0.53	-
${}_{33}\text{As}$	-	0.659	-	0.547	-	0.354	-	-	0.53	-
${}_{34}\text{Se}$	-	0.65	-	-	-	0.354	-	0.616	0.52	-
${}_{35}\text{Br}$	-	-	-	-	-	0.353	-	-	0.52	-
${}_{36}\text{Kr}$	-	0.613	-	0.585	-	0.352	-	0.686	0.52	-
${}_{37}\text{Rb}$	-	-	-	-	-	0.351	-	-	0.52	-
${}_{38}\text{Sr}$	-	-	-	-	-	0.352	-	0.646	0.52	-
${}_{39}\text{Y}$	0.495	-	0.747	-	-	0.746	0.57	-	0.52	-
${}_{40}\text{Zr}$	0.52	-	-	0.522	-	0.747	0.57	0.648	0.52	-
${}_{41}\text{Nb}$	0.542	-	-	-	-	0.773	0.57	-	0.61	-
${}_{42}\text{Mo}$	0.561	-	-	0.692	-	0.771	0.57	0.689	0.61	-
${}_{43}\text{Tc}$	0.578	-	-	-	-	0.768	0.57	-	0.61	-
${}_{44}\text{Ru}$	0.592	-	-	-	-	0.766	0.57	0.779	0.61	-
${}_{45}\text{Rh}$	0.604	-	0.759	-	-	0.759	0.57	-	0.6	-
${}_{46}\text{Pd}$	0.613	-	-	-	-	0.750	0.57	-	0.6	-
${}_{47}\text{Ag}$	0.619	-	0.740	0.695	-	0.740	0.57	0.786	0.59	-
${}_{48}\text{Cd}$	0.622	0.421	-	-	-	0.735	0.45	-	0.59	-
${}_{49}\text{In}$	0.623	-	-	-	-	0.728	0.45	-	0.59	-
${}_{50}\text{Sn}$	0.338	0.2997	0.322	0.693	-	0.323	0.3	0.784	0.27	-
${}_{51}\text{Sb}$	0.33	-	-	0.316	-	0.325	0.25	-	0.28	-
${}_{52}\text{Te}$	0.322	0.2827	0.326	-	-	0.328	0.25	-	0.28	-
${}_{53}\text{I}$	0.315	-	-	-	-	0.328	0.25	-	0.28	-
${}_{54}\text{Xe}$	0.309	-	0.328	-	-	0.329	0.25	0.1274	0.28	-
${}_{55}\text{Cs}$	0.303	-	-	-	-	0.33	0.25	-	0.28	-
${}_{56}\text{Ba}$	0.298	-	0.329	0.336	-	0.331	0.25	-	0.28	-
${}_{57}\text{La}$	0.294	-	-	-	-	0.328	0.25	-	0.29	-
${}_{58}\text{Ce}$	0.291	-	-	-	-	0.328	0.25	-	0.29	-
${}_{59}\text{Pr}$	0.288	-	-	-	-	0.321	0.25	-	0.29	-
${}_{60}\text{Nd}$	0.286	-	0.331	0.332	-	0.332	0.25	0.303	0.3	0.306 ^c
${}_{61}\text{Pm}$	0.285	-	-	-	-	0.331	0.25	-	0.3	-
${}_{62}\text{Sm}$	0.284	-	-	-	-	0.331	0.25	-	0.3	-
${}_{63}\text{Eu}$	0.285	-	0.333	-	-	0.334	0.25	-	0.3	-
${}_{64}\text{Gd}$	0.286	-	-	-	0.279	0.334	0.25	-	0.3	0.310 ^c , 0.311 [§]
${}_{65}\text{Tb}$	0.287	-	-	-	0.285	0.334	0.25	-	0.3	0.299 ^c
${}_{66}\text{Dy}$	0.29	-	-	-	0.290	0.335	0.25	-	0.3	0.302 ^c
${}_{67}\text{Ho}$	0.293	-	0.337	0.317	0.296	0.338	0.25	0.309	0.3	0.306 [§] , 0.314 ^c
${}_{68}\text{Er}$	0.296	-	-	-	0.301	0.354	0.28	-	0.3	0.306 [§] , 0.309 ^c
${}_{69}\text{Tm}$	0.301	-	-	-	0.306	0.354	0.32	-	0.29	-
${}_{70}\text{Yb}$	0.306	-	0.352	0.316	0.312	0.354	0.32	-	0.29	-
${}_{71}\text{Lu}$	0.312	-	-	-	0.317	0.353	0.32	-	0.28	0.316 [§]
${}_{72}\text{Hf}$	0.319	-	-	-	0.322	0.352	0.32	-	0.28	0.290 ^c
${}_{73}\text{Ta}$	0.326	-	-	-	0.328	0.351	0.32	-	0.28	0.323 [§]
${}_{74}\text{W}$	0.334	-	0.350	0.324	0.333	0.352	0.32	0.332	0.28	0.328 [§] , 0.288 ^c
${}_{75}\text{Re}$	0.457	-	-	-	0.482	0.640	0.32	-	0.33	-
${}_{76}\text{Os}$	0.484	-	-	-	0.482	0.636	0.33	-	0.39	-
${}_{77}\text{Ir}$	0.509	-	-	-	0.482	0.631	0.45	-	0.45	-
${}_{78}\text{Pt}$	0.532	-	-	-	0.545	0.716	0.56	-	0.5	0.563 [§]
${}_{79}\text{Au}$	0.554	-	-	-	0.615	0.711	0.58	0.644	0.53	0.561 [§] , 0.542 ^c
${}_{80}\text{Hg}$	0.573	0.6317	0.705	-	0.615	0.707	0.6	-	0.56	0.578 [§]
${}_{81}\text{Tl}$	0.591	-	-	-	0.615	0.713	0.6	-	0.57	0.582 ^c
${}_{82}\text{Pb}$	0.606	-	-	-	0.62	0.708	0.61	-	0.58	0.606 [§]
${}_{83}\text{Bi}$	0.62	0.6761	0.700	-	0.62	0.703	0.62	0.656	0.58	0.579 ^c , 0.603 [§]
${}_{84}\text{Po}$	0.632	-	-	-	0.62	0.697	0.62	-	0.58	-
${}_{85}\text{At}$	0.642	-	-	-	0.62	0.691	0.63	-	0.59	-
${}_{86}\text{Rn}$	0.65	0.6761	-	-	0.62	0.685	0.63	-	0.58	-
${}_{87}\text{Fr}$	0.656	-	-	-	0.62	0.679	0.64	-	0.58	-
${}_{88}\text{Ra}$	0.66	-	-	-	0.62	0.672	0.65	-	0.58	-
${}_{89}\text{Ac}$	0.663	-	-	-	0.62	0.666	0.66	-	0.58	-
${}_{90}\text{Th}$	0.663	-	0.656	-	0.62	0.659	0.66	0.575	0.57	0.577 ^c
${}_{91}\text{Pa}$	0.662	-	-	-	0.62	0.655	0.67	-	0.58	-
${}_{92}\text{U}$	0.659	-	0.656	-	0.62	0.660	0.67	-	0.57	-
${}_{93}\text{Np}$	0.654	-	-	-	-	0.656	0.67	-	0.57	-
${}_{94}\text{Pu}$	0.647	-	-	-	-	0.648	0.68	-	0.56	-
${}_{95}\text{Am}$	0.638	-	-	-	-	0.639	0.68	-	0.55	-
${}_{96}\text{Cm}$	0.627	-	0.62	-	-	0.631	0.68	-	0.55	-
${}_{97}\text{Bk}$	0.615	-	-	-	-	-	-	-	0.54	-
${}_{98}\text{Cf}$	0.6	-	0.612	-	-	-	-	-	0.54	-

Table 4-4: Calcul empirique (ce travail), théoriques, utilisant la méthode multiconfiguration Dirac-Fock (MCDFGME) de la transition Coster-Kronig F_{123} de ${}_{28}\text{Ni}$ to ${}_{96}\text{Cm}$.

Élément	Ce travail		Autres travaux					Exp *(Kaur <i>et al.</i> , [25]) b(Oz <i>et al.</i> , [15])
	Emp	MCDFGME	Chen <i>et al.</i> [18]	Puri <i>et al.</i> [21]	Campbell [23]	McGuire [22]	Krause [20]	
${}_{28}\text{Ni}$	-	0.642	-	-	-	-	0.558	-
${}_{29}\text{Cu}$	-	0.673	-	-	-	-	0.548	-
${}_{30}\text{Zn}$	-	0.667	-	0.674	-	-	0.548	-
${}_{31}\text{Ga}$	-	-	-	0.731	-	-	0.539	-
${}_{32}\text{Ge}$	-	0.625	-	0.732	-	-	0.544	-
${}_{33}\text{As}$	-	0.663	-	0.733	-	-	0.548	-
${}_{34}\text{Se}$	-	0.654	-	0.734	-	-	0.541	-
${}_{35}\text{Br}$	-	-	-	0.729	-	-	0.545	-
${}_{36}\text{Kr}$	-	0.615	-	0.723	-	0.70	0.547	-
${}_{37}\text{Rb}$	-	-	-	0.733	-	-	0.549	-
${}_{38}\text{Sr}$	-	-	-	0.748	-	0.67	0.552	-
${}_{39}\text{Y}$	-	-	-	0.756	-	-	0.553	-
${}_{40}\text{Zr}$	0.563	-	0.758	0.758	-	0.676	0.554	-
${}_{41}\text{Nb}$	0.585	-	-	0.780	-	-	0.534	-
${}_{42}\text{Mo}$	0.603	-	-	0.778	-	0.710	0.624	-
${}_{43}\text{Tc}$	0.618	-	-	0.776	-	-	0.624	-
${}_{44}\text{Ru}$	0.628	-	-	0.774	-	0.787	0.625	-
${}_{45}\text{Rh}$	0.635	-	0.768	0.768	-	-	0.625	-
${}_{46}\text{Pd}$	0.638	-	-	0.760	-	-	0.615	-
${}_{47}\text{Ag}$	0.633	-	0.751	0.751	-	0.794	0.615	-
${}_{48}\text{Cd}$	0.525	0.434	-	0.746	-	-	0.606	-
${}_{49}\text{In}$	0.613	-	-	0.740	-	-	0.606	-
${}_{50}\text{Sn}$	0.353	0.317	0.353	0.354	-	0.792	0.617	-
${}_{51}\text{Sb}$	0.347	-	-	0.357	-	-	0.297	-
${}_{52}\text{Te}$	0.342	0.304	0.359	0.361	-	-	0.308	-
${}_{53}\text{I}$	0.337	-	-	0.362	-	-	0.308	-
${}_{54}\text{Xe}$	0.333	-	0.362	0.363	-	0.305	0.309	-
${}_{55}\text{Cs}$	0.329	-	-	0.365	-	-	0.309	-
${}_{56}\text{Ba}$	0.326	-	0.364	0.367	-	-	0.309	-
${}_{57}\text{La}$	0.323	-	-	0.363	-	-	0.309	-
${}_{58}\text{Ce}$	0.321	-	-	0.363	-	-	0.319	-
${}_{59}\text{Pr}$	0.319	-	-	0.356	-	-	0.319	-
${}_{60}\text{Nd}$	0.317	-	0.367	0.366	0.280	0.332	0.319	0.335 ^b
${}_{61}\text{Pm}$	0.317	-	-	0.366	0.280	-	0.329	-
${}_{62}\text{Sm}$	0.316	-	-	0.366	0.279	-	0.329	-
${}_{63}\text{Eu}$	0.316	-	0.368	0.369	0.279	-	0.328	-
${}_{64}\text{Gd}$	0.317	-	-	0.369	0.279	-	0.328	0.338 ^b
${}_{65}\text{Tb}$	0.318	-	-	0.368	0.278	-	0.328	0.328 ^b
${}_{66}\text{Dy}$	0.32	-	-	0.369	0.278	-	0.327	0.330 ^b , 0.340 ^a
${}_{67}\text{Ho}$	0.322	-	0.370	0.372	0.277	0.337	0.327	0.341 ^b , 0.336 ^a
${}_{68}\text{Er}$	0.325	-	-	0.381	0.298	-	0.327	0.325 ^a
${}_{69}\text{Tm}$	0.328	-	-	0.381	0.338	-	0.326	-
${}_{70}\text{Yb}$	0.331	-	0.369	0.381	0.338	-	0.316	-
${}_{71}\text{Lu}$	0.335	-	-	0.379	0.337	-	0.316	0.335 ^a
${}_{72}\text{Hf}$	0.34	-	-	0.378	0.337	-	0.304	0.315 ^b
${}_{73}\text{Ta}$	0.345	-	-	0.377	0.337	-	0.304	0.340 ^a
${}_{74}\text{W}$	0.351	-	0.376	0.378	0.337	0.356	0.303	0.313 ^b , 0.345 ^a
${}_{75}\text{Re}$	0.411	-	-	0.652	0.329	-	0.301	-
${}_{76}\text{Os}$	0.444	-	-	0.648	0.339	-	0.350	-
${}_{77}\text{Ir}$	0.475	-	-	0.643	0.459	-	0.409	-
${}_{78}\text{Pt}$	0.503	-	-	0.725	0.569	-	0.467	0.570 ^a
${}_{79}\text{Au}$	0.528	-	-	0.720	0.589	0.655	0.517	0.561 ^b , 0.567 ^a
${}_{80}\text{Hg}$	0.549	0.640	0.714	0.716	0.609	-	0.546	0.584 ^a
${}_{81}\text{Tl}$	0.568	-	-	0.720	0.608	-	0.575	0.599 ^b
${}_{82}\text{Pb}$	0.584	-	-	0.715	0.618	-	0.584	0.612 ^a
${}_{83}\text{Bi}$	0.597	0.682	0.700	0.710	0.627	0.663	0.592	0.591 ^b , 0.608 ^a
${}_{84}\text{Po}$	0.607	-	-	0.704	0.627	-	0.592	-
${}_{85}\text{At}$	0.614	-	-	0.698	0.637	-	0.591	-
${}_{86}\text{Rn}$	0.618	0.681	-	0.691	0.637	-	0.601	-
${}_{87}\text{Fr}$	0.619	-	-	0.685	0.647	-	0.591	-
${}_{88}\text{Ra}$	0.617	-	-	0.678	0.657	-	0.590	-
${}_{89}\text{Ac}$	0.613	-	-	0.672	0.667	-	0.590	-
${}_{90}\text{Th}$	0.605	-	0.662	0.665	0.666	0.582	0.590	0.586 ^b
${}_{91}\text{Pa}$	0.594	-	-	0.662	0.677	-	0.581	-
${}_{92}\text{U}$	0.58	-	0.663	0.667	0.675	-	0.593	-
${}_{93}\text{Np}$	0.564	-	-	0.662	0.674	-	0.583	-
${}_{94}\text{Pu}$	0.544	-	-	0.658	0.687	-	0.580	-
${}_{95}\text{Am}$	0.522	-	-	0.649	0.687	-	0.570	-
${}_{96}\text{Cm}$	0.496	-	0.620	0.641	0.686	-	0.558	-

Table 4-5: Calcul empirique (ce travail), théoriques, utilisant la méthode multiconfiguration Dirac-Fock (MCDFGME), de la transition Coster-Kronig F_1 de ${}_{28}\text{Ni}$ to ${}_{96}\text{Cm}$.

Élément	Ce travail		Autres travaux						Exp ^a (Kaur <i>et al.</i> , [25]) ^b (Oz <i>et al.</i> , [15])
	Emp	MCDFGME	Chen <i>et al.</i> , [18]	Crasemann <i>et al.</i> [19]	Puri <i>et al.</i> [21]	Campbell [23]	McGuire [22]	Krause [20]	
${}_{28}\text{Ni}$	-	0.923	0.947	-	-	-	0.947	0.847	-
${}_{29}\text{Cu}$	-	0.929	-	-	-	-	-	0.839	-
${}_{30}\text{Zn}$	-	0.92	0.946	-	0.95	-	0.946	0.831	-
${}_{31}\text{Ga}$	-	-	-	-	0.931	-	-	0.822	-
${}_{32}\text{Ge}$	-	0.892	0.938	-	0.926	-	0.938	0.815	-
${}_{33}\text{As}$	-	0.877	-	0.829	0.922	-	-	0.809	-
${}_{34}\text{Se}$	-	0.869	0.918	-	0.918	-	0.918	0.804	-
${}_{35}\text{Br}$	-	-	-	-	0.914	-	-	0.8	-
${}_{36}\text{Kr}$	-	0.857	0.915	0.81	0.902	-	0.915	0.797	-
${}_{37}\text{Rb}$	-	-	-	-	0.858	-	-	0.794	-
${}_{38}\text{Sr}$	-	-	0.894	-	0.85	-	0.894	0.79	-
${}_{39}\text{Y}$	-	-	-	-	0.842	-	-	0.785	-
${}_{40}\text{Zr}$	0.696	-	0.835	0.793	0.835	-	0.884	0.779	-
${}_{41}\text{Nb}$	0.713	-	-	-	0.828	-	-	0.713	-
${}_{42}\text{Mo}$	0.726	-	-	0.739	0.827	-	0.855	0.712	-
${}_{43}\text{Tc}$	0.733	-	-	-	0.825	-	-	0.711	-
${}_{44}\text{Ru}$	0.736	-	-	-	0.823	-	0.836	0.709	-
${}_{45}\text{Rh}$	0.732	-	0.821	-	0.821	-	-	0.705	-
${}_{46}\text{Pd}$	0.724	-	-	-	0.815	-	-	0.700	-
${}_{47}\text{Ag}$	0.710	-	0.808	0.758	0.808	-	0.838	0.694	-
${}_{48}\text{Cd}$	0.691	0.557	-	-	0.806	-	-	0.688	-
${}_{49}\text{In}$	0.667	-	-	-	0.802	-	-	0.681	-
${}_{50}\text{Sn}$	0.557	0.468	0.51	0.765	0.511	-	0.836	0.439	-
${}_{51}\text{Sb}$	0.544	-	-	0.48	0.515	-	-	0.448	-
${}_{52}\text{Te}$	0.532	0.467	0.518	-	0.521	-	-	0.455	-
${}_{53}\text{I}$	0.521	-	-	-	0.523	-	-	0.461	-
${}_{54}\text{Xe}$	0.511	-	0.524	-	0.526	-	0.453	0.466	-
${}_{55}\text{Cs}$	0.502	-	-	-	0.529	-	-	0.470	-
${}_{56}\text{Ba}$	0.494	-	0.529	0.504	0.532	-	-	0.474	-
${}_{57}\text{La}$	0.486	-	-	-	0.529	-	-	0.478	-
${}_{58}\text{Ce}$	0.480	-	-	-	0.529	-	-	0.482	-
${}_{59}\text{Pr}$	0.474	-	-	-	0.522	-	-	0.485	-
${}_{60}\text{Nd}$	0.470	-	0.54	0.497	0.533	0.44	0.51	0.488	0.494 ^b
${}_{61}\text{Pm}$	0.466	-	-	-	0.542	0.44	-	0.490	-
${}_{62}\text{Sm}$	0.463	-	-	-	0.543	0.44	-	0.492	-
${}_{63}\text{Eu}$	0.461	-	0.547	-	0.549	0.44	-	0.493	-
${}_{64}\text{Gd}$	0.460	-	-	-	0.55	0.44	-	0.493	0.5 ^b
${}_{65}\text{Tb}$	0.460	-	-	-	0.55	0.44	-	0.493	0.49 ^b
${}_{66}\text{Dy}$	0.460	-	-	-	0.552	0.44	-	0.492	0.518 ^a , 0.497 ^b
${}_{67}\text{Ho}$	0.462	-	0.555	0.495	0.557	0.44	0.511	0.490	0.522 ^a , 0.501 ^b
${}_{68}\text{Er}$	0.464	-	-	-	0.536	0.405	-	0.487	0.448 ^a
${}_{69}\text{Tm}$	0.468	-	-	-	0.537	0.445	-	0.483	-
${}_{70}\text{Yb}$	0.472	-	0.468	0.496	0.538	0.445	-	0.478	-
${}_{71}\text{Lu}$	0.477	-	-	-	0.538	0.445	-	0.472	0.455 ^a
${}_{72}\text{Hf}$	0.483	-	-	-	0.538	0.445	-	0.465	0.472 ^b
${}_{73}\text{Ta}$	0.490	-	-	-	0.537	0.445	-	0.457	0.454 ^a
${}_{74}\text{W}$	0.498	-	0.535	0.484	0.538	0.445	0.527	0.447	0.457 ^a , 0.471 ^b
${}_{75}\text{Re}$	0.588	-	-	-	0.727	0.39	-	0.485	-
${}_{76}\text{Os}$	0.612	-	-	-	0.724	0.4	-	0.552	-
${}_{77}\text{Ir}$	0.633	-	-	-	0.719	0.52	-	0.603	-
${}_{78}\text{Pt}$	0.651	-	-	-	0.783	0.63	-	0.640	0.616 ^a
${}_{79}\text{Au}$	0.668	-	-	-	0.779	0.65	0.727	0.672	0.611 ^a , 0.694 ^b
${}_{80}\text{Hg}$	0.683	0.7014	0.774	0.719	0.776	0.67	-	0.690	0.629 ^a
${}_{81}\text{Tl}$	0.696	-	-	-	0.767	0.67	-	0.696	0.73 ^b
${}_{82}\text{Pb}$	0.706	-	-	-	0.762	0.674	-	0.696	0.659 ^a
${}_{83}\text{Bi}$	0.715	0.727	0.7549	0.694	0.758	0.684	0.725	0.694	0.655 ^a , 0.68 ^b
${}_{84}\text{Po}$	0.721	-	-	-	0.752	0.684	-	0.689	-
${}_{85}\text{At}$	0.725	-	-	-	0.747	0.694	-	0.685	-
${}_{86}\text{Rn}$	0.727	0.727	-	-	0.741	0.694	-	0.682	-
${}_{87}\text{Fr}$	0.727	-	-	-	0.735	0.704	-	0.677	-
${}_{88}\text{Ra}$	0.725	-	-	-	0.728	0.714	-	0.672	-
${}_{89}\text{Ac}$	0.721	-	-	-	0.723	0.724	-	0.664	-
${}_{90}\text{Th}$	0.715	-	0.7135	-	0.717	0.72	0.644	0.660	0.657 ^b
${}_{91}\text{Pa}$	0.707	-	-	-	0.708	0.72	-	0.664	-
${}_{92}\text{U}$	0.696	-	0.707	-	0.711	0.705	-	0.652	-
${}_{93}\text{Np}$	0.684	-	-	-	0.702	0.7	-	0.642	-
${}_{94}\text{Pu}$	0.669	-	-	-	0.694	0.71	-	0.605	-
${}_{95}\text{Am}$	0.652	-	-	-	0.686	0.71	-	0.595	-
${}_{96}\text{Cm}$	0.633	-	0.667	-	0.678	0.71	-	0.587	-

- Nos valeurs théoriques actuelles sont comparées graphiquement à d'autres valeurs pour f_{13}, F_1, F_{123} dans la figure (4-1) Après analyse des figures (4-1-c), (4-1-d) et (4-1-e). Dans la plage $28 \leq Z \leq 40$, les disparités émergent entre les résultats de nos calculs théoriques et les valeurs théoriques ou ajustées d'autres chercheurs, notamment les valeurs théoriques de Krause [20], les valeurs ajustées de Puri et al. [21] et les données expérimentales de Campbell [23] et Kaur et al. [25]. D'autre part, nos calculs théoriques concordent bien avec d'autres travaux. Par exemple, les résultats ajustés de Krause [20] et McGuire [22] concordent bien dans la plage $40 \leq Z \leq 98$.

Nos valeurs théoriques actuelles sont comparées graphiquement à nos résultats empiriques pour $f_{12}, f_{23}, f_{13}, F_{123}$, et F_1 dans la figure (4-1). On constate que dans la plage $40 \leq Z \leq 98$, les coefficients Coster-Kronig empiriques et théoriques présentent un très bon alignement avec ceux de nos groupes empiriques sur l'ensemble du numéro atomique.

4.2.2 Transitions Auger

Le présent calcul des rendements de transition Auger couvre tous les éléments dans la plage $28 \leq Z \leq 98$. De plus, les valeurs théoriques pour treize éléments sélectionnés (${}_{28}\text{Ni}$, ${}_{29}\text{Cu}$, ${}_{30}\text{Zn}$, ${}_{32}\text{Ge}$, ${}_{33}\text{As}$, ${}_{34}\text{Se}$, ${}_{36}\text{Kr}$, ${}_{48}\text{Cd}$, ${}_{50}\text{Sn}$, ${}_{52}\text{Te}$, ${}_{80}\text{Hg}$, ${}_{83}\text{Bi}$, ${}_{86}\text{Rn}$) ont été calculées à l'aide du code MCDFGME. Ces résultats sont présentés sous forme numérique dans les tableaux (4-6) à (4-8).

À des fins de comparaison exhaustive, les tableaux comprennent également les ajustements empiriques et semi-empiriques de Krause [20], Özdemir [28] et Öz *et al.* [29], ainsi que les résultats expérimentaux d'Özdemir [28] et Öz *et al.* [29].

- Afin de faciliter la comparaison de nos valeurs empiriques de désintégration Auger a_1 avec ces valeurs semi-empiriques ajustées et expérimentaux, toutes les valeurs sont représentées en fonction du numéro atomique dans les figures (4-2) à (4-4). Dans l'ensemble, nos valeurs empiriques de désintégration Auger calculées à l'aide de l'équation (3-3) (voir chapitre3) concordent bien avec les données précédemment rapportées.

Malgré de légers écarts observés entre nos valeurs empiriques et celles de Krause [20] dans la plage $40 \leq Z \leq 98$, en particulier pour les lanthanides, la concordance est particulièrement forte. En revanche, les données expérimentales d'Özdemir [28] présentent des écarts plus importants, en particulier pour les éléments plus lourds. Nos données empiriques concordent généralement avec celles de Krause [20] dans une fourchette d'écart comprise entre 1.0 % et 10%, à l'exception de quelques valeurs où les écarts atteignent environ 30 %.

Par rapport aux valeurs d'Öz *et al.* [29] et d'Özdemir [28], les écarts vont d'environ 0 % à 18 %, la plupart des éléments se situant en dessous de 14 %. Cependant, des écarts notables sont observés pour certains éléments lourds spécifiques, en particulier ^{76}Os , ^{77}Ir , ^{78}Pt , ^{79}Au , ^{80}Hg , ^{81}Tl , ^{82}Pb et ^{83}Bi , comme le montre la figure (4-2).

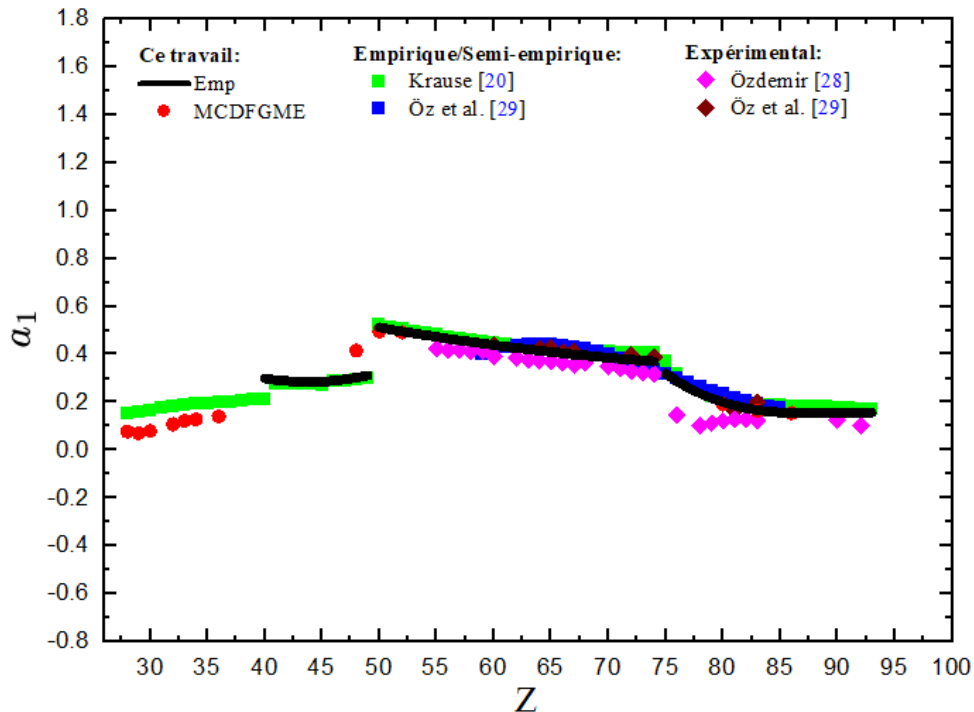


Figure 4-2 : Comparaison des valeurs empiriques et théoriques actuelles de l'Auger avec les valeurs théoriques et expérimentales pour a_1 en fonction du numéro atomique Z .

Dans la gamme des numéros atomiques, $86 \leq Z \leq 96$, nos valeurs théoriques diffèrent légèrement de celles de Krause [20], Özdemir [28] et Öz *et al.* [29], avec des écarts allant d'environ 2.7 % à 37 %. Pour les éléments plus légers ($28 \leq Z \leq 36$), les valeurs de Krause présentent des écarts plus importants, certains dépassant 50%.

Il convient de noter que nos résultats théoriques concordent très bien avec les valeurs expérimentales pour la plupart des éléments, avec des écarts compris entre 0.81% et 4.6%, à l'exception de l'élément ^{48}Cd , pour lequel un écart plus important d'environ 37% est observé. Dans ce contexte, l'écart relatif (RD), utilisé pour quantifier la différence entre les valeurs empiriques et les valeurs de référence, est calculé à l'aide de la formule suivante :

$$\text{RD}(\%) = \left| \frac{(a_1)_{\text{exp}} - (a_1)_{\text{emp}}}{(a_1)_{\text{emp}}} \right| \times 100.$$

- En ce qui concerne les valeurs empiriques de transition Auger ($a_{2-\text{emp}}$), la figure (4-3) illustre leur variation en fonction du numéro atomique.

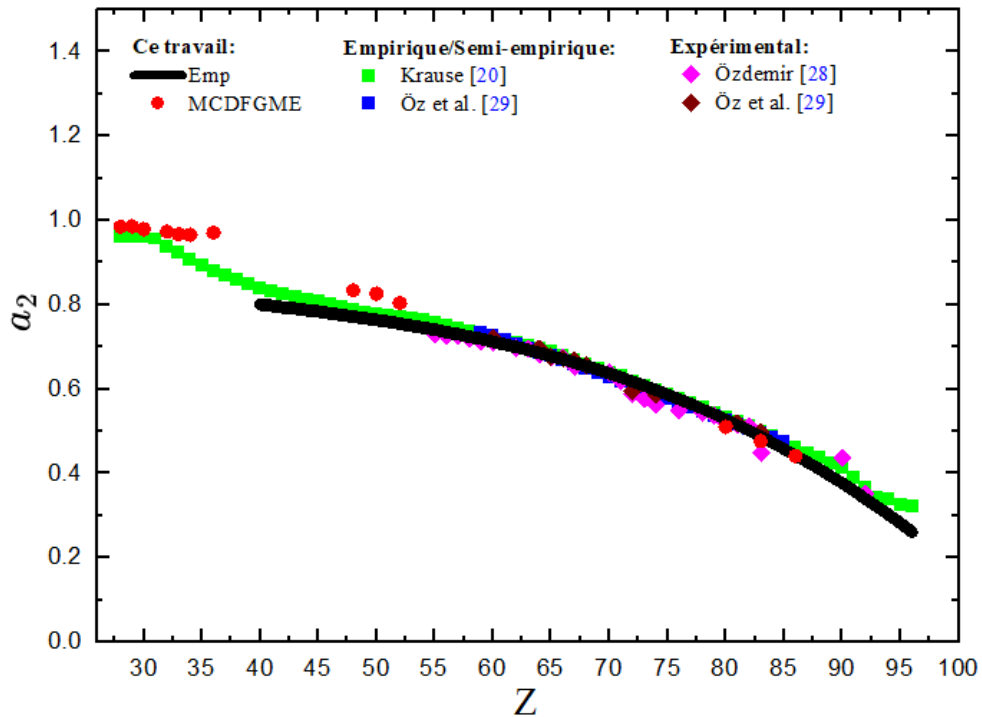


Figure 4-3 : Comparaison des valeurs empiriques et théoriques actuelles de l'Auger avec les valeurs théoriques et expérimentales pour α_2 en fonction du numéro atomique Z .

Cette comparaison inclut les valeurs semi-empiriques et les données ajustées de Krause [20], Özdemir [28] et Öz *et al.* [29]. De plus, les mesures expérimentales rapportées par Özdemir [28] et Öz *et al.* [29] sont intégrées dans la même figure pour une comparaison directe. Nos valeurs empiriques ont été calculées à l'aide de l'équation (3-3) (voir le Chapitre 03) pour les éléments dont le numéro atomique est compris entre 40 et 98. Les résultats montrent que nos conclusions empiriques concordent fortement avec les valeurs semi-empiriques rapportées par Krause [20], avec des écarts relatifs compris entre 0.0 % et 13 %. Pour la plupart des éléments, la différence est faible (entre 0.0 % et 3.7 %), à l'exception du ${}_{63}\text{Eu}$, qui présente un écart de 9.1%. La comparaison avec les données expérimentales confirme également un niveau élevé de cohérence. Les écarts entre nos valeurs empiriques et les résultats expérimentaux varient de 0.14 % à 8.7 % pour Özdemir [28] et de 0.15 % à 3.6% pour Öz *et al.* [29]. Comme le montre la figure (4-3), nos calculs théoriques présentent un niveau élevé de concordance avec les travaux antérieurs, avec des écarts compris entre environ 1.6 % et 6.0 %. Cependant, des divergences notables sont observées pour le ${}_{36}\text{Kr}$, ${}_{48}\text{Cd}$, et ${}_{86}\text{Rn}$, avec des écarts respectifs de 9.4 %, 15 % et 9.1 %. Par rapport aux valeurs ajustées rapportées par Öz *et al.* [29] et aux données expérimentales d'Öz *et al.* [29] et Özdemir [28], qui présentent des écarts compris

entre 2.0 % et 6.3 %, nos résultats s'alignent bien, avec un écart compris entre 0.45 % et 9.74%.

- Dans l'ensemble, la comparaison entre nos résultats empiriques et les valeurs théoriques confirme un bon niveau de concordance. du rendement Auger empirique (a_{3-emp}), la figure (4-4) illustre leur variation en fonction du numéro atomique. nos résultats montrent une forte cohérence dans l'ensemble des données.

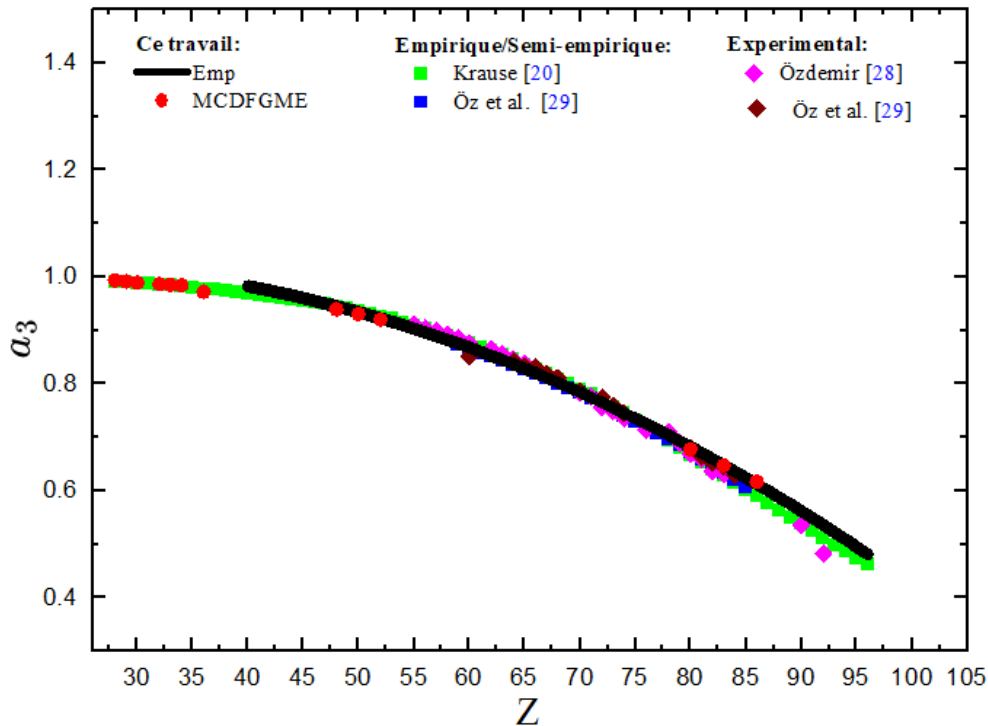


Figure. 4-4 : Comparaison des valeurs empiriques et théoriques actuelles de l'Auger avec les valeurs théoriques et expérimentales pour a_3 en fonction du numéro atomique Z .

Les différences relatives par rapport à Krause [20] varient entre 0.0 % et 4.9 %, tandis que pour Özdemir [28], elles se situent entre 0.12 % et 3.5 %. La comparaison avec les mesures expérimentales révèle une concordance tout aussi élevée : 0.26 % à 2.9 % pour Öz et al. [29], et 0.0 % à 2.7 % pour Özdemir [28]. Il convient de souligner que les valeurs semi-empiriques et ajustées de Krause [20], Özdemir [28] et Öz et al. [29] correspondent étroitement à nos résultats théoriques obtenus à l'aide du code MCDFGME pour les éléments compris dans la plage $40 \leq Z \leq 96$, avec une différence relative (RD) maximale de seulement 4.4 %. Nos calculs théoriques sont particulièrement proches de nos valeurs empiriques, avec des écarts ne dépassant pas 0.73 %.

Table 4-6: Calculs empiriques (ce travail), théoriques, utilisant la méthode de Dirac-Fock multiconfiguration (MCDFGME), la transition Auger α_1 from $_{40}\text{Zr}$ to $_{93}\text{Np}$.

Élément	Ce travail		Autres travaux		
	Emp	MCDFGME	Krause [20]	Öz et al., [29]	Exp ^a (Öz et al., [29]) ^b (Özdemir, [28])
$_{28}\text{Ni}$	-	0.0764	0.152	-	-
$_{29}\text{Cu}$	-	0.0698	0.159	-	-
$_{30}\text{Zn}$	-	0.08	0.167	-	-
$_{31}\text{Ga}$	-	-	0.176	-	-
$_{32}\text{Ge}$	-	0.107	0.183	-	-
$_{33}\text{As}$	-	0.121	0.188	-	-
$_{34}\text{Se}$	-	0.128	0.193	-	-
$_{35}\text{Br}$	-	-	0.196	-	-
$_{36}\text{Kr}$	-	0.14	0.199	-	-
$_{37}\text{Rb}$	-	-	0.201	-	-
$_{38}\text{Sr}$	-	-	0.205	-	-
$_{39}\text{Y}$	-	-	0.209	-	-
$_{40}\text{Zr}$	0.299	-	0.214	-	-
$_{41}\text{Nb}$	0.292	-	0.278	-	-
$_{42}\text{Mo}$	0.288	-	0.278	-	-
$_{43}\text{Te}$	0.285	-	0.278	-	-
$_{44}\text{Ru}$	0.285	-	0.279	-	-
$_{45}\text{Rh}$	0.286	-	0.272	-	-
$_{46}\text{Pd}$	0.289	-	0.286	-	-
$_{47}\text{Ag}$	0.295	-	0.29	-	-
$_{48}\text{Cd}$	0.302	0.415	0.294	-	-
$_{49}\text{In}$	0.311	-	0.299	-	-
$_{50}\text{Sn}$	0.512	0.495	0.524	-	-
$_{51}\text{Sb}$	0.503	-	0.513	-	-
$_{52}\text{Te}$	0.495	0.491	0.504	-	-
$_{53}\text{I}$	0.488	-	0.495	-	-
$_{54}\text{Xe}$	0.480	-	0.488	-	-
$_{55}\text{Cs}$	0.473	-	0.481	-	0.424 ^a
$_{56}\text{Ba}$	0.465	-	0.474	-	0.418 ^a
$_{57}\text{La}$	0.458	-	0.467	-	0.416 ^a
$_{58}\text{Ce}$	0.452	-	0.46	-	0.411 ^a
$_{59}\text{Pr}$	0.445	-	0.454	0.399	0.414 ^a
$_{60}\text{Nd}$	0.439	-	0.448	0.415	0.393 ^a 0.440 ^b
$_{61}\text{Pm}$	0.432	-	0.444	0.427	-
$_{62}\text{Sm}$	0.426	-	0.437	0.436	0.384 ^a
$_{63}\text{Eu}$	0.421	-	0.432	0.441	0.375 ^a
$_{64}\text{Gd}$	0.415	-	0.428	0.443	0.373 ^a 0.422 ^b
$_{65}\text{Tb}$	0.410	-	0.424	0.442	0.370 ^a 0.426 ^b
$_{66}\text{Dy}$	0.404	-	0.419	0.438	0.365 ^a 0.409 ^b
$_{67}\text{Ho}$	0.399	-	0.416	0.431	0.356 ^a 0.413 ^b
$_{68}\text{Er}$	0.395	-	0.413	0.422	0.364 ^a 0.387 ^b
$_{69}\text{Tm}$	0.390	-	0.411	0.411	-
$_{70}\text{Yb}$	0.386	-	0.41	0.399	0.347 ^a
$_{71}\text{Lu}$	0.381	-	0.408	0.385	0.340 ^a
$_{72}\text{Hf}$	0.377	-	0.407	0.37	0.328 ^a 0.398 ^b
$_{73}\text{Ta}$	0.374	-	0.406	0.353	0.324 ^a
$_{74}\text{W}$	0.370	-	0.406	0.336	0.320 ^a 0.386 ^b
$_{75}\text{Re}$	0.319	-	0.371	0.319	-
$_{76}\text{Os}$	0.287	-	0.318	0.301	0.146 ^a
$_{77}\text{Ir}$	0.260	-	0.277	0.284	-
$_{78}\text{Pt}$	0.236	-	0.246	0.266	0.102 ^a
$_{79}\text{Au}$	0.216	-	0.221	0.25	0.111 ^a
$_{80}\text{Hg}$	0.199	0.191	0.203	0.234	0.121 ^a
$_{81}\text{Tl}$	0.186	-	0.197	0.219	0.127 ^a 0.164 ^b
$_{82}\text{Pb}$	0.175	-	0.192	0.205	0.128 ^a
$_{83}\text{Bi}$	0.167	0.164	0.189	0.193	0.121 ^a 0.202 ^b
$_{84}\text{Po}$	0.161	-	0.189	0.183	-
$_{85}\text{At}$	0.157	-	0.187	0.175	-
$_{86}\text{Rn}$	0.155	0.154	0.184	-	-
$_{87}\text{Fr}$	0.153	-	0.184	-	-
$_{88}\text{Ra}$	0.153	-	0.182	-	-
$_{89}\text{Ac}$	0.153	-	0.183	-	-
$_{90}\text{Th}$	0.154	-	0.179	-	0.126 ^a
$_{91}\text{Pa}$	0.155	-	0.174	-	-
$_{92}\text{U}$	0.156	-	0.172	-	0.102 ^a
$_{93}\text{Np}$	0.156	-	0.171	-	-

Table 4-7: Calculs empiriques (ce travail), théoriques, utilisant la méthode de Dirac-Fock multiconfiguration (MCDFGME), la transition Auger α_2 from ${}_{40}\text{Zr}$ to ${}_{96}\text{Cm}$.

Élément	Ce travail	Autres travaux			Exp ^a (Özdemir, [28]) ^b (Öz et al., [29])
	Emp	MCDFGME	Krause [20]	Öz et al., [29]	
${}_{28}\text{Ni}$	-	0.985	0.963	-	-
${}_{29}\text{Cu}$	-	0.986	0.962	-	-
${}_{30}\text{Zn}$	-	0.979	0.963	-	-
${}_{31}\text{Ga}$	-	-	0.956	-	-
${}_{32}\text{Ge}$	-	0.973	0.937	-	-
${}_{33}\text{As}$	-	0.967	0.923	-	-
${}_{34}\text{Se}$	-	0.966	0.908	-	-
${}_{35}\text{Br}$	-	-	0.894	-	-
${}_{36}\text{Kr}$	-	0.971	0.88	-	-
${}_{37}\text{Rb}$	-	-	0.869	-	-
${}_{38}\text{Sr}$	-	-	0.859	-	-
${}_{39}\text{Y}$	-	-	0.848	-	-
${}_{40}\text{Zr}$	0.801	-	0.84	-	-
${}_{41}\text{Nb}$	0.798	-	0.832	-	-
${}_{42}\text{Mo}$	0.794	-	0.825	-	-
${}_{43}\text{Tc}$	0.791	-	0.819	-	-
${}_{44}\text{Ru}$	0.787	-	0.812	-	-
${}_{45}\text{Rh}$	0.784	-	0.807	-	-
${}_{46}\text{Pd}$	0.780	-	0.802	-	-
${}_{47}\text{Ag}$	0.776	-	0.796	-	-
${}_{48}\text{Cd}$	0.772	0.93	0.789	-	-
${}_{49}\text{In}$	0.768	-	0.782	-	-
${}_{50}\text{Sn}$	0.764	0.826	0.778	-	-
${}_{51}\text{Sb}$	0.760	-	0.775	-	-
${}_{52}\text{Te}$	0.755	0.804	0.771	-	-
${}_{53}\text{I}$	0.750	-	0.767	-	-
${}_{54}\text{Xe}$	0.746	-	0.763	-	-
${}_{55}\text{Cs}$	0.741	-	0.756	-	0.729 ^a
${}_{56}\text{Ba}$	0.735	-	0.751	-	0.726 ^a
${}_{57}\text{La}$	0.730	-	0.744	-	0.727 ^a
${}_{58}\text{Ce}$	0.724	-	0.737	-	0.718 ^a
${}_{59}\text{Pr}$	0.719	-	0.73	0.735	0.712 ^a
${}_{60}\text{Nd}$	0.712	-	0.724	0.726	0.711 ^a , 0.720 ^b
${}_{61}\text{Pm}$	0.706	-	0.717	0.716	-
${}_{62}\text{Sm}$	0.700	-	0.71	0.707	0.698 ^a
${}_{63}\text{Eu}$	0.693	-	0.702	0.697	0.695 ^a
${}_{64}\text{Gd}$	0.686	-	0.695	0.687	0.682 ^a , 0.697 ^b
${}_{65}\text{Tb}$	0.678	-	0.688	0.678	0.674 ^a , 0.677 ^b
${}_{66}\text{Dy}$	0.671	-	0.679	0.668	0.674 ^a , 0.673 ^b
${}_{67}\text{Ho}$	0.663	-	0.669	0.658	0.653 ^a , 0.669 ^b
${}_{68}\text{Er}$	0.655	-	0.66	0.648	0.656 ^a
${}_{69}\text{Tm}$	0.646	-	0.65	0.639	-
${}_{70}\text{Yb}$	0.637	-	0.64	0.629	0.639 ^a
${}_{71}\text{Lu}$	0.628	-	0.63	0.619	0.619 ^a
${}_{72}\text{Hf}$	0.618	-	0.619	0.609	0.589 ^a , 0.596 ^b
${}_{73}\text{Ta}$	0.608	-	0.608	0.599	0.576 ^a
${}_{74}\text{W}$	0.598	-	0.597	0.589	0.562 ^a , 0.588 ^b
${}_{75}\text{Re}$	0.587	-	0.587	0.578	-
${}_{76}\text{Os}$	0.576	-	0.577	0.568	0.549 ^a
${}_{77}\text{Ir}$	0.565	-	0.566	0.558	-
${}_{78}\text{Pt}$	0.553	-	0.555	0.548	0.543 ^a
${}_{79}\text{Au}$	0.541	-	0.544	0.537	0.537 ^a
${}_{80}\text{Hg}$	0.528	0.51	0.533	0.527	0.520 ^a
${}_{81}\text{Tl}$	0.515	-	0.522	0.517	0.516 ^a , 0.520 ^b
${}_{82}\text{Pb}$	0.502	-	0.511	0.506	0.511 ^a
${}_{83}\text{Bi}$	0.488	0.476	0.5	0.496	0.449 ^a , 0.499 ^b
${}_{84}\text{Po}$	0.473	-	0.488	0.485	-
${}_{85}\text{At}$	0.458	-	0.474	0.475	-
${}_{86}\text{Rn}$	0.443	0.441	0.461	-	-
${}_{87}\text{Fr}$	0.427	-	0.448	-	-
${}_{88}\text{Ra}$	0.411	-	0.436	-	-
${}_{89}\text{Ac}$	0.394	-	0.424	-	-
${}_{90}\text{Th}$	0.377	-	0.413	-	0.437 ^a
${}_{91}\text{Pa}$	0.359	-	0.389	-	-
${}_{92}\text{U}$	0.340	-	0.366	-	0.352 ^a
${}_{93}\text{Np}$	0.321	-	0.342	-	-
${}_{94}\text{Pu}$	0.302	-	0.338	-	-
${}_{95}\text{Am}$	0.282	-	0.326	-	-
${}_{96}\text{Cm}$	0.261	-	0.321	-	-

Table 4-8: Calculs empiriques (ce travail), théoriques, utilisant la méthode de Dirac-Fock multiconfiguration (MCDFGME), la transition Auger a_3 from ${}_{40}\text{Zr}$ to ${}_{96}\text{Cm}$.

Élément	Ce travail		Autres travaux		Exp ^a (Öz <i>et al.</i> , [29]) ^b (Özdemir, [28])
	Emp	MCDFGME	Krause [20]	Öz <i>et al.</i> , [29]	
28Ni	-	0.993	0.991	-	-
29Cu	-	0.991	0.989	-	-
30Zn	-	0.989	0.988	-	-
31Ga	-	-	0.987	-	-
32Ge	-	0.986	0.985	-	-
33As	-	0.985	0.984	-	-
34Se	-	0.984	0.982	-	-
35Br	-	-	0.98	-	-
36Kr	-	0.972	0.978	-	-
37Rb	-	-	0.976	-	-
38Sr	-	-	0.974	-	-
39Y	-	-	0.972	-	-
40Zr	0.982	-	0.969	-	-
41Nb	0.978	-	0.966	-	-
42Mo	0.974	-	0.963	-	-
43Tc	0.969	-	0.96	-	-
44Ru	0.965	-	0.957	-	-
45Rh	0.960	-	0.954	-	-
46Pd	0.955	-	0.951	-	-
47Ag	0.950	-	0.948	-	-
48Cd	0.945	0.939	0.944	-	-
49In	0.939	-	0.94	-	-
50Sn	0.934	0.93	0.936	-	-
51Sb	0.928	-	0.931	-	-
52Te	0.922	0.92	0.926	-	-
53I	0.916	-	0.921	-	-
54Xe	0.910	-	0.915	-	-
55Cs	0.903	-	0.909	-	0.911 ^b
56Ba	0.896	-	0.903	-	0.903 ^b
57La	0.889	-	0.896	-	0.899 ^b
58Ce	0.882	-	0.889	-	0.892 ^b
59Pr	0.875	-	0.882	0.872	0.886 ^b
60Nd	0.868	-	0.875	0.865	0.875 ^b ,0.850 ^a
61Pm	0.860	-	0.868	0.858	-
62Sm	0.852	-	0.861	0.851	0.864 ^b
63Eu	0.845	-	0.853	0.843	0.855 ^b
64Gd	0.836	-	0.845	0.835	0.846 ^b ,0.842 ^a
65Tb	0.828	-	0.836	0.827	0.837 ^b ,0.831 ^a
66Dy	0.820	-	0.826	0.819	0.825 ^b ,0.830 ^a
67Ho	0.811	-	0.818	0.810	0.816 ^b ,0.819 ^a
68Er	0.802	-	0.808	0.801	0.807 ^b ,0.811 ^a
69Tm	0.793	-	0.799	0.792	-
70Yb	0.784	-	0.79	0.782	0.782 ^b ,0.787 ^a
71Lu	0.774	-	0.78	0.772	0.776 ^b
72Hf	0.765	-	0.769	0.762	0.756 ^b ,0.774 ^a
73Ta	0.755	-	0.757	0.752	0.749 ^b ,0.758 ^a
74W	0.745	-	0.745	0.741	0.736 ^b ,0.745 ^a
75Re	0.735	-	0.732	0.730	-
76Os	0.725	-	0.719	0.719	0.715 ^b
77Ir	0.714	-	0.706	0.708	-
78Pt	0.704	-	0.694	0.696	0.710 ^b
79Au	0.693	-	0.68	0.684	0.689 ^b ,0.681 ^a
80Hg	0.682	0.677	0.667	0.672	0.669 ^b ,0.664 ^a
81Tl	0.671	-	0.653	0.659	0.660 ^b ,0.653 ^a
82Pb	0.659	-	0.64	0.646	0.636 ^b ,0.645 ^a
83Bi	0.648	0.647	0.627	0.633	0.630 ^b ,0.630 ^a
84Po	0.636	-	0.614	0.619	-
85At	0.624	-	0.601	0.606	-
86Rn	0.612	0.616	0.589	-	-
87Fr	0.600	-	0.576	-	-
88Ra	0.587	-	0.563	-	-
89Ac	0.575	-	0.55	-	-
90Th	0.562	-	0.537	-	0.536 ^b
91Pa	0.549	-	0.524	-	-
92U	0.536	-	0.511	-	0.482 ^b
93Np	0.522	-	0.498	-	-
94Pu	0.509	-	0.486	-	-
95Am	0.495	-	0.474	-	-
96Cm	0.481	-	0.461	-	-

4.3. Références

- [1] Meddah, S., Kahoul, A., Parente, F., Daoudi, S., Marques, J.P., Sampaio, J.M., Croft, S., Favalli, A., Kasri, Y., Aylikci, N.K. Kup, Aylikci, V., Hamidani, A. (2025). *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 164, 101731.
- [2] Desclaux, J. P. (1975). *Comput. Phys. Commun.* 9, 31–45.
- [3] Indelicato, P., & Desclaux, J.P. (2007). *arXiv:physics/0701239*.
- [4] Kahoul, A., Abassi, A., Deghfel, B., & Nekkab, M. (2011). *Radiat. Phys. Chem.* 80, 369–377.
- [5] Küp Aylikçi, N., Aylikçi, V., Kahoul, A., Tirasoglu, E., Karahan, I.H., & Cengiz, E. (2011). *Phys. Rev. A* 84, 042509.
- [6] Daoudi, S., Kahoul, A., Sahnoune, Y., Deghfel, B., Kasri, Y., Khalfallah, F., & Nekkab, M. (2015). *J. Korean Phys. Soc.* 67, 1537–1543.
- [7] Bendjedi, A., Deghfel, B., Kahoul, A., Derradj, I., Khalfallah, F., Sahnoune, Y., Bentabet, A., & Nekkab, M. (2015). *Radiat. Phys. Chem.* 117, 128–134.
- [8] Sahnoune, Y., Kahoul, A., Kasri, Y., Deghfel, B., Medjadi, D. E., Khalfallah, F., Daoudi, S., Aylikçi, V., Aylikçi, N. Küp, & Nekkab, M. (2016). *Radiat. Phys. Chem.* 125, 227–251.
- [9] Sahnoune, Y., Kahoul, A., Daoudi, S., Sampaio, J.M., Aylikçi, N.K., Aylikçi, V., Kasri, Y., Deghfel, B., Marques, J.P., & Medjadi, D.E. (2020). *Radiat. Phys. Chem.* 166, 108495.
- [10] Hamidani, A., Daoudi, S., Kahoul, A., Sampaio, J.M., Marques, J.P., Parente, F., Croft, S., Favalli, A., Aylikci, N.K. Kup, Aylikci, V., Kasri, Y., & Meddouh, K. (2023). *At. Data Nucl. Data Tables* 149, 101549.
- [11] Berkani, B., Kahoul, A., Sampaio, J.M., Daoudi, S., Marques, J.P., Parente, F., Hamidani, A., Croft, S., Favalli, A., Kasri, Y., Zidi, A., & Amari, K. (2024). *Radiat. Phys. Chem.* 225, 112106.
- [12] Amari, K., Kahoul, A., Sampaio, J.M., Kasri, Y., Marques, J.P., Parente, F., Hamidani, A., Croft, S., Favalli, A., Daoudi, S., Deghfel, B., Zidi, A., & Berkani, B. (2024). *Phys. Scr.* 99, 105402.
- [13] Berkani, B., Kahoul, A., Sampaio, J.M., Daoudi, S., Marques, J.P., Parente, F., Hamidani, A., Croft, S., Favalli, A., Kasri, Y., Zidi, A., Amari, K. (2025). *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* 224, 107089.
- [14] Zidi, A., Kahoul, A., Sampaio, J.M., Daoudi, S., Marques, J.P., Parente, F., Hamidani, A., Croft, S., Favalli, A., Kasri, Y., Zidi, A., Berkani, B. (2025). *At. Data Nucl. Data Tables* 152, 101645.
- [15] Öz, E., Ekinci, N., Özdemir, Y., Ertuğrul, M., Şahin, Y., Erdogan, H. (2001). *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 34, 631–638.
- [16] Sögüt, Ö. (2003). *Instrum. Sci. Technol.* 31, 85–92.
- [17] Bansal, H., Tiwari, M.K., Mittal, R. (2017). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 199, 93102.
- [18] Chen, M.H., Crasemann, B., Mark, H. (1981). *Phys. Rev. A*, 24(1), 177, 182.
- [19] Crasemann, B., Chen, M.H., Kostroun, V.O. (1971). *Phys. Rev. A* 4, 2161–2164.
- [20] Krause, M.O. (1979). *J. Phys. Chem. Ref. Data* 8, 307–327.
- [21] Puri, S., Mehta, D., Chand, B., Singh, N., Trehan, P.N. (1993). *X Ray Spectrom.* 22, 358–361.
- [22] McGuire, E.J. (1971). *Phys. Rev. A* 3, 587–604.
- [23] Campbell, J.L. (2003). *At. Data Nucl. Data Tables* 85, 291–315.
- [24] Campbell, J.L. (2009). *At. Data Nucl. Data Tables* 95, 115–124.
- [25] Kaur, G., Bansal, H., Tiwari, M.K., Mittal, R. (2016). *Pramana – J. Phys.* 87, 33.
- [26] Chen, M.H., Crasemann, B., Kostroun, V.O. (1971). *Phys. Rev. A* 4, 122–140.
- [27] Gupta, N., Mehta, D., Puri, S., Chand, B., Singh, N., Trehan, P.N. (2010). *Radiat. Phys. Chem.* 79, 23–34.
- [28] Özdemir, Y. (2003). *Radiat. Phys. Chem.* 66, 317–322.
- [29] Öz, E., Özdemir, Y., Ekinci, N., Ertuğrul, M., Şahin, Y., Erdogan, H. (2000). *Spectrochim. Acta Part B* 55, 1869–1877.

Conclusion générale

Nos résultats ne se contentent pas d'enrichir les connaissances existantes sur les processus non radiatifs, mais offrent également une approche distincte et complémentaire aux techniques expérimentales, améliorant ainsi la précision des données publiées sur les transitions Coster-Kronig et Auger qui étaient auparavant difficiles à explorer. Ces résultats sont le produit de recherches approfondies et d'efforts soutenus visant à réexaminer et à analyser les travaux d'autres chercheurs, ce qui renforce la validité des méthodes utilisées et apporte une contribution appréciable dans ce domaine de recherche.

Dans la première partie de ce travail, au total, 1058 valeurs ont été publiées durant la période 1955-2024. Cela représente un effort considérable pour compiler un aperçu complet des valeurs des données expérimentales pour L subshell Coster Kronig et Auger transitions (f_{12} , f_{23} , f_{13} , F_1 , F_{123} , a_1 , a_2 et a_3). Suite à l'analyse des données recueillies, plusieurs conclusions peuvent être tirées. En étudiant l'évolution du nombre de données en fonction du numéro atomique Z , il a été possible d'identifier les éléments les plus fréquemment mesurés. Concernant les transitions Coster-Kronig et Auger, les éléments les plus souvent mesurés se trouvent dans la gamme $64 \leq Z \leq 83$, notamment éléments tels que ${}_{73}\text{Ta}$, ${}_{79}\text{Au}$, ${}_{81}\text{Tl}$, ${}_{82}\text{Pb}$, ${}_{92}\text{U}$. En revanche, pour les éléments dont le numéro atomique se situe entre $28 \leq Z \leq 50$, comme ${}_{29}\text{Cu}$, ${}_{40}\text{Zr}$ et ${}_{42}\text{Mo}$, les mesures sont moins fréquentes comparativement aux autres éléments, avec parfois une absence totale de données expérimentales pour quelques éléments qui sont difficilement à manipuler ou bien radioactifs. Cette compilation offre un aperçu de l'état actuel des données atomiques. Elle constitue une ressource précieuse pour orienter les futures études expérimentales et théoriques dans ce domaine afin de faire progresser les applications scientifiques dans les domaines de la spectroscopie, du développement de dispositifs électroniques, de la médecine et de l'environnement.

Une méthode de calcul empirique a été élaborée. Obtenir des valeurs fiables pour les transitions dans la couche L reste particulièrement difficile en raison de la complexité des mesures et des limites de la précision expérimentale. Comme les données expérimentales étaient insuffisantes pour certains éléments, celles-ci ont été organisées et utilisées pour établir des tendances empiriques simple à l'aide de l'interpolation polynomiale et des valeurs moyennes pondérées. Les coefficients F_1 et F_{123} ont été calculés pour la première fois, et ils sont importants pour exprimer la distribution finale des lacunes de la sous-couche L_1 et aussi pour déterminer les rendements moyens de fluorescence et les sections efficaces de production des rayons X.

En parallèle, des calculs théoriques de premier principe ont été effectués pour la première fois à l'aide de la méthode Multiconfiguration Dirac-Fock (MCDF) pour plusieurs éléments représentatifs, à savoir ${}_{28}\text{Ni}$, ${}_{29}\text{Cu}$, ${}_{30}\text{Zn}$, ${}_{32}\text{Ge}$, ${}_{33}\text{As}$, ${}_{34}\text{Se}$, ${}_{36}\text{Kr}$, ${}_{48}\text{Cd}$, ${}_{50}\text{Sn}$, ${}_{52}\text{Te}$, ${}_{80}\text{Hg}$, ${}_{83}\text{Bi}$, et ${}_{86}\text{R}$. Ce calcul a été réalisé dans le but de fournir une description théorique précise des transitions électroniques pour ces éléments, et de comparer ces résultats avec les données expérimentales disponibles.

Pour la suite de cette thèse, plusieurs axes de recherche pourraient être explorés afin de développer et d'améliorer les calculs effectués. À l'avenir, nous prévoyons de réaliser des calculs semi-empiriques et semi-théoriques pour approfondir nos modèles et affiner les prédictions des transitions Coster-

Kronig et Auger. Ces approches permettront d'intégrer davantage de données expérimentales et d'améliorer la précision des résultats obtenus, tout en comparant les résultats théoriques avec les données réelles disponibles.

Annexes

Annexe I : Table Des Conditions Expérimentales

Table 1. Résumé des paramètres atomiques pour les éléments allant du $_{28}\text{Ni}$ to $_{96}\text{Cm}$, les sources d'excitation, les échantillons cibles et les détecteurs. Les références à partir desquelles ces données ont été obtenues sont également incluses.

Références	Paramètres	Sources d'excitation	Échantillons cibles	Détecteurs
[3]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Rayonnement synchrotron (9 énergies photoniques à intervalles de 0.1keV).	Cibles minces de Sm, $_{63}\text{Eu}$, $_{64}\text{Gd}$, $_{65}\text{Tb}$, $_{66}\text{Dy}$, $_{67}\text{Ho}$ (Déposées sur des feuilles de Mylar).	Détecteur de photons SDD (Vortex, États-Unis) avec une résolution énergétique de 138 eV à 5.959 keV.
[7]	a_1, a_2, a_3	Rayons gamma de 59.5 keV provenant d'une source ponctuelle de 100 mCi ^{241}Am .	$_{59}\text{Pr}$, $_{60}\text{Nd}$, $_{62}\text{Sm}$, $_{64}\text{Gd}$, $_{65}\text{Tb}$, $_{66}\text{Dy}$, $_{67}\text{Ho}$, $_{68}\text{Er}$, $_{72}\text{Hf}$, $_{74}\text{W}$, $_{78}\text{Pt}$, $_{81}\text{Tl}$, $_{82}\text{Pb}$, $_{83}\text{Bi}$.	Spectromètre à rayons X Si(Li) FWHM : 160 eV à 5.96 keV
[8]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Rayons γ de 59.5 keV obtenus à partir de 100 mCi ^{241}Am .	$_{59}\text{Pr}$, $_{60}\text{Nd}$, $_{64}\text{Gd}$, $_{65}\text{Tb}$, $_{66}\text{Dy}$, $_{67}\text{Ho}$, $_{68}\text{Er}$, $_{72}\text{Hf}$, $_{74}\text{W}$, $_{79}\text{Au}$, $_{81}\text{Tl}$, $_{83}\text{Bi}$, $_{90}\text{Th}$. Bas du formulaire	FWHM = 160 eV à 5.96 keV, surface active = 12.5 mm ² , profondeur de sensibilité = 3.5 cm, épaisseur de la fenêtre en béryllium = 12.5 μm .
[34]	f_{23}	Rayonnement gamma et rayons X émis lors des processus de capture d'électrons et de conversion interne des isotopes radioactifs.	$_{63}\text{Eu}$, $_{65}\text{Tb}$, $_{73}\text{Ta}$, $_{80}\text{Hg}$, $_{81}\text{Tl}$, Isotopes radioactifs: ^{151}Gd , ^{159}Dy , ^{181}W , ^{198}Au , ^{204}Tl , et ^{203}Hg .	Détecteurs Si(Li) avec des profondeurs d'appauvrissement de 2 mm et 4 mm, FWHM de 200-400 eV

[11]	a_1, a_2, a_3	Rayonnement gamma d'une énergie de 59.54 keV, émis par un ^{241}Am .	^{55}Cs , ^{56}Ba , ^{57}La , ^{58}Ce , ^{59}Pr , ^{60}Nd , ^{62}Sm , ^{63}Eu , ^{64}Gd , ^{65}Tb , ^{66}Dy , ^{67}Ho , ^{68}Er , ^{70}Yb , ^{71}Lu , ^{72}Hf , ^{73}Ta , ^{74}W , ^{76}Os , ^{78}Pt , ^{79}Au , ^{80}Hg , ^{81}Tl , ^{82}Pb , ^{83}Bi , ^{90}Th , ^{92}U d'une surface de 1.72 cm ² et d'une épaisseur comprise entre 3 et 35 mg/cm ² .	Détecteur Si(Li), surface active de 12.5 mm ² , profondeur du cristal de 3 mm, épaisseur de la fenêtre Be de 0.025 mm, résolution énergétique de 188 eV au 5.9 keV pour le pic de Fe-55.
[26]	f_{23}	Sources de radionucléides générant des photons X avec une énergie gamma de 66.7 keV.	Environ 1.2 μCi de solution de chlorure de bismuth sur une feuille de béryllium de 0.05 mm d'épaisseur avec de l'insuline.	Détecteurs de rayons X haute résolution, détecteur Ge (germanium), détecteur Si(Li).
[28]	f_{23}	Rayons gamma provenant d'une source radioactive ^{57}Co émettant à 122 keV et d'autres énergies.	^{91}Pa , feuilles métalliques pour certains éléments, échantillons de poudre métallique ou d'oxyde mélangés à du polystyrène pour d'autres.	Détecteur Ge(Li) : utilisé pour détecter les raies $K\alpha$. Détecteur NaI(Tl) : utilisé pour détecter les rayonnements de la série L.
[30]	f_{12}, f_{23}, f_{13} , F_{123} (calculé) a_1, a_2, a_3 .	Rayons gamma provenant de la désintégration radioactive du ^{210}Pb et ^{241}Am , valeurs énergétiques comprises entre 8 et 22 keV.	^{83}Bi , ^{93}Np .	Spectromètre ORTEC Si(Li) spectromètre, 180 eV résolution, profondeur de 3 mm, diamètre de 4 mm, fenêtre Be de 0.025 mm, contact en or 200A.
[31]	a_2, f_{23}	Désintégrations de ^{244}Cm , ^{240}Pu , ^{238}Pu , énergies des particules alpha comprises entre 5.587 MeV et 12.83 keV.	^{94}Pu , et ^{92}U Sources sans porteur de Cm^{244} , Pu^{240} , et Pu^{238} .	Détecteur au silicium, cristal NaI (Tl), compteur proportionnel, spectrographe à cristal courbé.
[32]	f_{23}, a_2	Photons X en coïncidence avec des particules α provenant du ^{242}Cm .	Échantillons de ^{94}Pu recouverts d'une feuille d'aluminium de 14.5 mg/cm ² .	Chambre d'ionisation photons détectés à l'aide d'un cristal d'iode de sodium avec une fenêtre de 5 mg/cm ² d'aluminium, 7 mg/cm ² d'araldite et 6 mg/cm ² de MgO ; fenêtre de la chambre d'ionisation en polyéthylène de 3.1 mg/cm ² polyéthylène.

[38]	f_{23}	^{155}Eu (demi-vie de 4.9 ans), avec des énergies pouvant atteindre 105.30 keV.	^{64}Gd .	Détecteur Si(Li) (30 mm ² , fenêtre Be de 0.002 pouce), détecteur Ge(Li) (80 mm ² , fenêtre Be de 0.005 pouce).
[39]	f_{23}	Des rayons gamma d'une énergie de 59.5 keV provenant d'une source ^{241}Am ont été observés, ainsi que des rayons gamma d'une énergie de 88 keV provenant de ^{109}Cd .	Sources minces et uniformes de ^{198}Au , ^{203}Hg , ^{207}Bi , and ^{233}Pa .	Détecteur Si(Li) pour les rayons X L (résolution 169 eV), détecteur Ge(HP) pour les rayons X K (résolution 204 eV) FWHM à 5.9 keV.
[43]	f_{12}, f_{13}, a_1, a_3	Rayonnement nucléaire provenant de sources radioactives sans support de ^{210}Pb (RaD).	Pb^{210} (RaD).	Spectromètre à rayons X Ge(Li) (résolution de 436 eV FWHM à 14.4 keV) et spectromètre à rayons X Si(Li) (résolution de 600 eV FWHM à 14.4 keV).
[44]	$f_{12}, f_{23}, f_{13}, F_{123}$ (calculé)	Sources de photons couvrant une gamme d'énergie de 100 eV à 35 keV.	Feuilles métalliques de haute pureté (supérieure à 99.95 %), d'une épaisseur comprise entre 0.2 μm et 20 μm .	-Photodiode AXUV pour les mesures de transmission. -Détecteur à dérive au silicium (SDD) pour le Rayonnement fluorescent. - Photodiodes calibrées pour la surveillance du flux photonique.
[46]	$f_{12}, f_{23}, f_{13}, F_{123}$ (calculé)	^{207}Bi Isotope du bismuth, qui subit une désintégration par capture d'électrons (EC) et émet des rayons X d'une énergie primaire d'environ 14.4 KeV	^{82}Pb , Sources sans support de Bi^{207} d'une intensité de 0.1 et 1.0 μCi , évaporées dans du HNO_3 dilué.	Détecteurs Si(Li) et Ge(Li), séries ORTEC 7110 et 8010 respectivement.
[47]	$f_{12}, f_{23}, f_{13}, F_{123}$ (calculé) a_1, a_2, a_3	Rayonnement synchrotron, monochromatisé à l'aide d'un spectromètre à double cristal, avec une énergie comprise entre 3.4 à 4.9 keV.	La feuille d' ^{47}Ag avait une épaisseur de 1 mm et la feuille de ^{13}Al une épaisseur de 0.8 mm.	Détecteur Si(Li) pour détecter la fluorescence X induite, situé à 90° par rapport au faisceau incident.
[48]	f_{12}, f_{13}	Faisceau d'électrons de 55 kV.	Feuilles métalliques minces (Or $\sim 50 \text{ \AA}$). Étalonage avec du cuivre et du sélénium.	Spectromètre à rayons X avec photomultiplicateur.

[49]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Installation de Rayonnement synchrotron, avec un anneau de stockage d'électrons fonctionnant à 2.0 GeV et un courant nominal de 309 mA.	Cible mince pure de ^{66}Dy , $\sim 5,9 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ sur un support en mylar de $6.3 \mu\text{m}$ d'épaisseur.	Détecteur à dérive au silicium (XFlash 5030), 30 Surface de mm^2 , épaisseur de $450 \mu\text{m}$, résolution de 131eV à 5.89keV ; photodiode au silicium (SXUV100).
[50]	f_{23}	Rayons gamma de 59.54keV provenant d'une source ^{241}Am .	^{66}Dy , ^{74}W , ^{83}Bi .	Détecteur de rayons X Si(Li) avec une résolution d'environ 160eV à 5.9keV .
[51]	f_{23}, a_2	Désintégration alpha du ^{238}Pu et du ^{232}Th , avec des énergies associées comprises entre 43.5keV et 84.4keV .	^{92}U , ^{88}Ra	Détecteur à barrière de surface pour particules alpha, spectromètre à rayons X Si(Li) L, compteur à scintillation NaI(Tl).
[52]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Rayonnement synchrotron La gamme d'énergie utilisée était comprise entre environ 0.8keV à 3keV .	^{28}Ni , ^{29}Cu , ^{42}Mo .	Un analyseur à miroir cylindrique à double passage a mesuré les électrons à 100eV à l'aide d'un multiplicateur d'électrons Spiraltron.
[53]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Rayonnement synchrotron entre 845 et 1300eV .	^{28}Ni .	Spectromètre à réseau, photodiode calibrée.
[54]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Énergies des photons comprises entre 12.019 et 18.0keV provenant du rayonnement synchrotron.	Feuilles monométalliques autonomes de ^{79}Au et ^{82}Pb (épaisseur de $2 \mu\text{m}$), dépôts métalliques minces de ^{42}Mo et ^{46}Pd (épaisseur 250nm) sur des membranes en nitrure de silicium de 500nm .	Détecteur Si(Li) ou détecteur à dérive de silicium (SDD).
[55]	$f_{23}, f_{12}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Rayonnement synchrotron provenant du HASYLAB, monochromatisé à l'aide d'un monochromateur à double cristal non dispersif Si(111)	^{72}Hf , ^{73}Ta , ^{74}W , ^{77}Ir , ^{78}Pt , ^{79}Au , ^{82}Pb .	Détecteurs Si(Li) pour la détection de fluorescence, chambre d'ionisation pour les mesures de photoatténuation.
[56]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Photons d'énergies variables, rayonnement synchrotron dur provenant de DORIS II (énergie des électrons 5GeV , courant de l'anneau de stockage $25\text{-}40 \text{mA}$).	Feuille ^{79}Au .	Détecteur Si(Li) avec une résolution énergétique FWHM de 210eV à 5.9keV , monté à un angle d'observation de 90° .

[57]	a_1, a_2, a_3	Rayonnement thorium B (ThB), gamme d'énergie du spectromètre à lentille magnétique comprise entre 1 keV et 15 keV.	^{83}Bi .	Compteur Geiger- Müller avec une fenêtre d'entrée mince en laque Zapon ou Formvar.
[58]	$f_{12}, f_{23}, f_{13}, F_{123}$ (calculé)	Rayonnement synchrotron à différentes énergies (10.0-14.0 keV).	$^{74}\text{W}, ^{75}\text{Re}$.	Détecteur à dérive au silicium (SDD) avec une résolution de 131 eV à 5.89 keV et fenêtre pour éléments super légers (SLEW)
[59]	$f_{12}, f_{23}, f_{13}, F_{123}$ (calculé)	Rayonnement synchrotron utilisé pour la photoionisation sélective des sous-couches L.	Feuille métallique ^{46}Pd autoportante de 1.66 μm d'épaisseur et ^{46}Pd de 114 μm d'épaisseur.	Détecteur Si(Li), détecteur CCD, chambres d'ionisation.
[60]	$f_{12}, f_{23}, f_{13}, F_{123}$ (calculé)	Désintégration radioactive du ^{207}Bi (33.4 ans), qui fournit des lacunes dans la couche L du Pb créées par conversion interne et transitions par capture d'électrons.	^{82}Pb .	Détecteur ORTEC Ge(HP), détecteur Kevex Si (Li), détecteur coaxial Ge(Li).
[61]	a_1, a_2, a_3	Rayonnement β provenant de la désintégration de l'isotope ^{199}Au , dans une gamme d'énergie comprise entre 5 keV et 500 keV.	^{199}Au presque pur.	Un spectromètre à rayons β et un détecteur à lentille magnétique.
[62]	f_{13}	Rayons gamma de 59.54 keV provenant d'une source de ^{241}Am , rayons X K Rb provenant de RbNO_3 .	^{82}Pb .	Détecteur Si(Li), résolution de 180 eV à 5.96 keV
[63]	$f_{12}, f_{23}, f_{13}, F_{123}$ (calculé)	3.7–14.0 keV. Cette gamme d'énergie a été obtenue à l'aide d'un faisceau de photons monochromatiques fourni par un monochromateur à double cristal Si (111) (DCM).	Une cible mince pure de ^{51}Sb et ^{50}Sn ont été utilisées, avec des épaisseurs de 10.50 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ et 5.57 mg/cm^2 .	(SDD), modèle XFlash 5030 modèle avec une surface de 30 $\text{mm}^2 \times 450 \mu\text{m}$ et une FWHM de ~ 131 eV à 5.89 keV.
[64]	f_{23}	Conversion interne (transition de 412 keV dans ^{198}Hg) et capture d'électrons (désintégration de ^{204}Tl en ^{204}Hg).	^{80}Hg .	Si (Li) 3.6 mm depletion depth, 290 eV FWHM for 6.4-keV Fe $K\alpha$ x-rays from ^{57}Co . Ge (Li) x-ray detector: 410 eV FWHM at 6.4 keV.

[65]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Ligne de faisceau à monochromateur à quatre cristaux fournissant un rayonnement monochromatique avec des énergies comprises entre 1.75 et 10.5 keV.	Feuille d'élément unique ^{40}Zr de haute pureté (épaisseur 500 nm).	Dispositif à dispersion d'énergie calibré (SDD) placé derrière un diaphragme calibré.
[66]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Le faisceau de rayons X avec une énergie graduée de 2.1 keV à 4 keV.	Film mince de 150 nm de ^{44}Ru sur une membrane de Si_3N_4 de 500 nm.	Détecteur à dérive au silicium (SDD), étalonné radiométriquement.
[67]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ $a_1, a_2, a_3,$ F_{123} (calculé)	Rayonnement monochromatique entre 1.75 keV et 10.5 keV Ce rayonnement est fourni par la ligne de faisceau du monochromateur à quatre cristaux de la PTB dans l'électron BESSY II.	^{44}Ru recouverte d'une membrane en nitrure de silicium.	Photodiodes calibrées, (SDD).
[68]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	^{103}Pd se désintégrant en ^{103}Rh (39.75 keV ,niveau) par capture d'électrons.	^{45}Rh .	Détecteur Si(Li), détecteur Ge(Li), compteur proportionnel.
[69]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Rayonnement synchrotron, les rayons X utilisés avaient une gamme d'énergie comprise entre 3380 et 3850 électronvolts(eV).	^{47}Ag (argent) évaporé sur un substrat ^{13}Al .	Analyseur à miroir cylindrique à double passage Physical Electronics modèle 15-255.
[70]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	ELETTRA rayonnement synchrotron, faisceau de photons 4.0 keV–5.0 keV.	^{50}Sn (~5.57 mg/cm ²) et cible mince de Sb sur feuille de Mylar (~10.50 µg/cm ²).	Détecteur à dérive au silicium (XFlash 5030), surface de 30 mm ² , épaisseur de 450 µm, résolution FWHM de 131 eV à 5.89 keV.
[71]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Canon à électrons de type triode avec filament en tungstène, fournissant des courants de faisceau d'environ 100 µA.	Atomes libres ^{54}Xe .	Détecteurs de rayons X Si(Li) avec une résolution énergétique de 200 eV à 5.9 keV.
[72]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Rayonnement synchrotron monochromatisé. Énergie du rayonnement primaire fixée à environ 50 points énergétiques dans la gamme des bords L du xénon.	^{54}Xe .	Détecteur Si(Li) pour une résolution à 160 eV FWHM.

[73]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Rayonnement synchrotron à énergie réglable entre 4500 et 5800 eV.	Gaz ^{54}Xe contenu dans une cellule en acier inoxydable de 10 mm de long scellée avec des feuilles de Kapton de 12.5 μm d'épaisseur.	Spectromètre à cristal courbé de type Johansson haute résolution, détecteur CCD, chambres d'ionisation.
[74]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	L'énergie a été réglée entre 3 et 14 keV à l'aide d'un faisceau de rayons X monochromatisé provenant d'un rayonnement synchrotron.	Chlorure de ^{56}Ba (BaCl_2).	Détecteur, épaisseur 3 mm, surface active 30 mm^2 , résolution de 165 eV à 5.9 keV avec une fenêtre en béryllium de 8 μm d'épaisseur.
[75]	f_{12}, f_{23}, f_{13} F_{123} (calculé)	L'énergie a été réglée entre 3 et 14 keV à l'aide d'un faisceau de rayons X monochromatisé provenant d'un rayonnement synchrotron.	Pour le ^{57}La et le ^{59}Pr .	Détecteur, épaisseur 5 mm, diamètre 5 mm, résolution de 165 eV à 5.9 keV avec une fenêtre en béryllium de 0.0127 cm d'épaisseur.
[76]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé) a_1, a_2, a_3	Rayonnement synchrotron monochromatisé de 6.5 keV à 8.5 keV.	Feuilles de ^{62}Sm et ^{22}Ti .	Détecteur Si(Li) avec une fenêtre Be de 0.025 mm d'épaisseur et une résolution de 210 eV FWHM à 5.9 keV
[77]	f_{12}	Photons γ produits par un radio-isotope $^{75}\text{mCi}^{241}\text{Am}$, qui a produit des photons γ de 59.5 keV.	$\text{TeO}_2, \text{NH}_4\text{I}, \text{CsNO}_3, \text{BaO}, \text{La}_2\text{O}_3, \text{CeO}_2, ^{62}\text{Sm}, ^{67}\text{Ho}, ^{68}\text{Er}, \text{YbO}_2, ^{72}\text{Hf}, ^{73}\text{Ta}, ^{74}\text{W}, ^{75}\text{Re}, ^{78}\text{Pt}, ^{79}\text{Au}, \text{HgO}, \text{Tl}_2\text{O}_3, ^{82}\text{Pb}, \text{BiOCl}, \text{ThO}_2, \text{et } ^{92}\text{U}$.	Détecteur Si(Li) avec FWHM = 155 eV à 5.9 keV, surface active = 12.5 mm^2 , profondeur de sensibilité = 3.5 cm et épaisseur de la fenêtre Be = 12.5 mm.
[78]	f_{12}, f_{13}, F_{123}	Rayonnement gamma d'une énergie de 21.54 keV.	^{63}Eu .	Détecteur Si(Li) avec une résolution énergétique de 260 eV (FWHM) à 6.4 keV pour détecter les rayons X Eu L, détecteur Ge(Li) pour détecter 174.68 keV.
[79]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	62.2 keV désintégrations par capture d'électrons de sources radioactives $^{157}\text{Tb}, ^{158}\text{Tb}$.	^{64}Gd séparés par masse et séparés chimiquement ^{65}Tb isotopes.	Petite diode Si(Li) pour la détection haute résolution des rayons X et détecteurs en germanium hyperpur.
[80]	f_{12}, f_{13}	Rayons X émis par la désintégration par capture d'électrons du radionucléide ^{157}Tb .	^{64}Gd .	Si(Li) d'une épaisseur de 3 mm, d'un diamètre de 6 mm, fenêtre en béryllium de 0.025 mm d'épaisseur et une résolution de 140eV.

[81]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Faisceau de photons monochromatiques d'énergies comprises entre 3 et 30 keV, fourni par le synchrotron SOLEIL.	Feuille de ^{64}Gd de 10 μm d'épaisseur, 10.664(10) mg masse, 135.52(10) mm^2 de surface.	Spectromètre à dispersion d'énergie (SDD) avec une résolution de 128 eV à 5.9 keV, réglé à 90° par rapport au faisceau incident.
[82]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Rayonnement synchrotron monochromatisé, 7.2 keV à 9.0 keV.	^{64}Gd .	Détecteur à dispersion d'énergie (SDD) et spectromètre von Hamos à cylindre complet avec cristal HAPG.
[83]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Rayonnement de capture d'électrons (EC), conduisant à l'émission de rayons X à partir de la couche L.	^{65}Tb .	Détecteur Ge(Li) de 8 mm de diamètre, 5 mm de profondeur et 440 eV FWHM à 14,4 keV. Détecteur Si(Li) de 6 mm de diamètre, 3 mm de profondeur, 260 eV FWHM à 6,4 keV, équipé d'une fenêtre Be de 0.5 mm.
[84]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Le rayonnement synchrotron a été utilisé, avec des spectres enregistrés à des énergies photoniques de 7.7 keV, 8.4 keV et 8.9 keV.	Feuille d'élément pur de ^{65}Tb d'une épaisseur de 0.127 nm.	Détecteur à l'état solide Si(Li), amplificateur rapide, convertisseur analogique-numérique et tampon multicanaux 4K.
[85]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Rayonnement synchrotron, RRCAT, allant de 8.00 à 17.00 keV.	^{73}Ta , ^{74}W , ^{78}Pt , ^{79}Au , ^{82}Pb (metallic) ^{67}Ho , ^{71}Lu , ^{66}Dy , ^{68}Er , ^{80}Hg , ^{83}Bi (oxides/powders).	Détecteur à vortex à l'état solide refroidi par effet Peltier 138 eV à 5.959 keV rayons X.
[86]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	^{107}Tm , un émetteur bêta à faible énergie.	^{73}Ta .	Spectromètre Si(Li), compteur proportionnel, spectromètre β de Chalk River.
[87]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Le rayonnement synchrotron fournit une énergie photonique réglable.	Feuilles d'éléments purs de ^{70}Yb et ^{73}Ta , chacune d'une épaisseur de 0.100 mm.	Détecteur à l'état solide avec cristal Si(Li).
[88]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	L'énergie a été réglée entre 3 et 14 keV à l'aide d'un faisceau de rayons X monochromatisé provenant d'un rayonnement synchrotron.	Feuille épaisse de ^{68}Er pur.	Détecteur à l'état solide Si(Li) avec une résolution de 165 eV à 5.9 keV et une fenêtre en béryllium de 0.0127 cm d'épaisseur.

[89]	f_{12}, f_{13}, F_{123}	Désintégration bêta de ^{194}Os , émettant des rayons gamma ^{194}Os radioactif en équilibre avec son descendant ^{194}Ir .	^{194}Os en équilibre avec son produit de désintégration ^{194}Ir (iridium).	Détecteur Si(Li) avec une profondeur d'appauvrissement d'environ 4 mm et une résolution énergétique de 240 eV (FWHM) à 6.4 keV Rayons X Fe K.
[90]	$f_{12}, f_{23}, f_{13}, F_{123}$ (calculé)	Rayonnement synchrotron monochromatique à rayons X provenant de la ligne BAMline à BESSY II, avec une gamme d'énergie photonique comprise entre 5 keV et 60 keV.	Dépôt de 250 nm d'épaisseur de ^{73}Ta sur une membrane de nitrure de silicium (Si_3N_4) de 1000 nm d'épaisseur.	Détecteur à dérive de silicium à dispersion d'énergie et photodiodes calibrées.
[91]	f_{12}	Faisceau d'électrons provenant d'un tube à rayons X avec une énergie de 42 keV et un courant de 5 mA.	$^{74}\text{W}, ^{75}\text{Re}, ^{77}\text{Ir}, ^{79}\text{Au}, ^{90}\text{Th}$.	Cristal scintillateur à travers une fenêtre en béryllium et enregistreur « Philips», utilisant un spectromètre à cristal incurvé avec un cristal de quartz.
[92]	f_{12}, f_{13}	Rayonnement polychromatique provenant d'un tube à rayons X BSV-29 Ag avec $U = 35$ kV et $I = 30$ mA.	$^{74}\text{W}, ^{75}\text{Re}, ^{76}\text{Os}, ^{76}\text{Ir}, ^{77}\text{Pt}$ (99.9% de pureté).	Spectrographe à rayons X DRS-2 avec monocristal de quartz courbé selon Johann.
[93]	f_{12}	Rayonnement X, généré par la désintégration radioactive des isotopes produisant des énergies de 30.9 keV et 98.9 keV, ainsi que par la désintégration de ^{199}Au .	$\text{Pt } ^{78}$ très pur (99.999 %).	Détecteur de rayons X Si(Li), diamètre 10mm, profondeur 5 mm, fenêtre Be 0.025 mm, FWHM 185 eV à 6.4 keV.
[94]	f_{12}	Rayons gamma de 59.5 keV émis par une source ponctuelle d'Am-241.	Échantillons de ^{80}Hg et ^{79}Au de haute pureté (99.9 %) d'une épaisseur comprise entre 5 et 20 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$.	Détecteur Si(Li) avec une surface active de 12 mm^2 , une profondeur de sensibilité de 3 mm, une fenêtre en Be de 12.5 μm d'épaisseur et une résolution énergétique d'environ 160 eV à 5.96 keV.
[95]	$f_{12}, f_{23}, f_{13}, F_{123}$ (calculé)	Transition de 279 keV résultant de la désintégration de ^{203}Hg en ^{203}Tl .	^{81}Tl .	-Détecteur Si(Li) avec une résolution de 290 eV FWHM à 6.4 keV. - Détecteur Ge(Li) avec une résolution de 460 eV FWHM à 14.4 keV.

[96]	f_{12}, f_{13}	Rayonnement isotopique radioactif.	^{82}Pb .	Détecteurs Si(Li) avec différentes résolutions, y compris ceux avec une largeur à mi-hauteur (FWHM) de 155 eV à 260 eV.
[97]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé) a_1, a_2, a_3 .	Rayons X mous (rayonnement Ag K), désintégration RaD d'environ 46,5 keV.	^{83}Bi .	Compteur proportionnel, spectromètre à cristal, compteur à scintillation.
[98]	f_{12}, f_{13}	46.5 keV Désintégrations de ^{210}Pb .	^{83}Bi	Détecteur Si(Li) d'une épaisseur de 4.3 mm et d'une résolution de 145 eV à 5.9 keV.
[99]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	Rayonnement synchrotron, couvrant la gamme d'énergie de 100 eV à 30 keV.	Feuilles de ^{83}Bi .	SDD rapide d'Amptek pour la détection par dispersion d'énergie ; photodiode AXUV100G pour surveiller le flux de photons entrants.
[100]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé) a_1, a_2, a_3	Rayonnement X, plus précisément énergie photonique de 24 keV.	Dépôts en couche mince de HfO ₂ sur des membranes en nitrure de silicium d'une épaisseur nominale de 1000 nm.	(SDD) et photodiode calibrée.
[101]	f_{12}	Spectres d'électrons et de photons.	Environ 10 mg d'Os (99.4 %) enrichi électromagnétiquement.	(SDD) pour la spectrométrie à conversion électronique. Ge pour les mesures spectrales des photons et des rayons X.
[102]	f_{23}	9.69 jours ^{137}Cs préparé par irradiation de Ba(NO ₃) ₂ dans un flux neutronique thermique.	^{54}Xe .	Détecteur de rayons X K : Ge plan (HP) robuste implanté par ions avec 230 eV FWHM à 14.4 keV. Détecteur de rayons X : Si(Li) plan avec 240 eV FWHM à 5.9 keV.
[103]	f_{23}	L'isotope ^{139}Ce se désintègre par capture d'électrons en ^{139}La .	^{57}La , l'isotope ^{139}Ce constituant une source satisfaisante de rayons X La.	Des détecteurs de rayons X Ge(Li) à semi-conducteurs haute résolution ont été utilisés.
[104]	f_{23}	Radio-isotope Fe-55 émettant des photons Mn K β à 6.492 keV.	Pr ₂ O ₃ de haute pureté (99.9 %) de haute pureté (99.9%) avec une épaisseur de 35 mg/cm ² .	Détecteur Si(Li) (FWHM = 160 eV à 5.96 keV, surface active = 12.5 mm ² , profondeur de sensibilité = 3.5 cm.

[105]	f_{23}	Rayonnement gamma résultant de la désintégration de ces isotopes radioactifs.	^{60}Nd , ^{70}Yb .	Détecteur plan Ge(HP) avec une largeur à mi-hauteur (FWHM) de 230 eV à 14.4 keV et détecteur plan KeveX Si(Li) avec une largeur à mi-hauteur (FWHM) de 240 eV à 5.9 keV.
[106]	f_{23}	Source radioactive de ^{195}Pm se désintégrant en ^{147}Nd par capture d'électrons.	^{60}Nd	Détecteur Ge(HP) avec une résolution énergétique de 487 eV à 122 keV pour les rayons X K, et détecteur Si(Li) avec une résolution énergétique de 146 eV à 5.9 keV pour les rayons X.
[107]	f_{23}	Sources radioactives qui se désintègrent par capture d'électrons ou désintégration alpha.	^{63}Eu , ^{94}Pu , ^{96}Cm .	Un détecteur Ge(Li) a été utilisé pour détecter les rayons X K, et un détecteur Si(Li) a été utilisé pour les rayons X.
[109]	f_{23}	Rayons X, produits par la désintégration de la source radioactive ^{249}Cf , ^{244}Cm et ^{238}Pu .	^{249}Cf , ^{244}Cm et ^{238}Pu préparées par électrodéposition sur des disques de béryllium.	Détecteurs de rayons X Si(Li) et Ge(Li) : Si(Li) avec une largeur à mi-hauteur de 180 eV à 5.9 keV, Ge(Li) avec une largeur à mi-hauteur de 343 eV à 6.4 keV.
[110]	f_{23}	Rayons gamma de 59.54 keV provenant d'une source radioactive annulaire filtrée de ^{241}Am (100 mCi).	^{68}Er , ^{70}Yb , ^{72}Hf .	Détecteur de rayons X Si(Li) avec une résolution de 160 eV à 5.9 keV.
[111]	f_{23}	Rayonnement gamma d'une énergie de 59.54 keV, émis par une source ^{241}Am .	^{67}Ho et ^{69}Tm .	Détecteurs Ge(Li).
[112]	f_{23}	Les sources de rayons X de 5.9 keV utilisées comprennent ^{195}Au , ^{203}Hg , ^{204}Tl et ^{207}Bi .	^{78}Pt , ^{80}Hg , ^{81}Tl .	Les mesures de coïncidence ont été enregistrées par un détecteur Ge plan et un détecteur Si(Li).
[113]	f_{23}	Sources de désintégration radioactive : ^{170}Tm et ^{171}Tm .	^{70}Yb .	Détecteurs de rayons X Ge(Li) et Si(Li) avec une largeur à mi-hauteur (FWHM) de 404 eV et 290 eV à 6 keV, respectivement.

[114]	f_{23}	La source radioactive de ^{169}Yb , qui se désintègre en thulium ^{169}Tm par capture d'électrons, produit des énergies comprises entre 7.18 keV et 50.74 keV.	^{69}Tm .	Détecteur Ge(HP) avec une résolution énergétique de 480 eV, et Si(Li) r avec une résolution énergétique de 180 eV.
[115]	f_{23}	Un rayonnement X provenant des sources radioactives ^{204}Tl et ^{181}W a été observé, avec une énergie des électrons émis comprise entre 0.7 à 1.5 keV.	^{80}Hg (mercure) et ^{73}Ta .	Compteur à scintillation NaI(Tl) pour les rayons X K et compteur proportionnel argon-méthane pour les rayons X.
[116]	f_{23}	Un tube à rayons X à faible puissance avec anode en rhodium a été utilisé comme source de photons, fonctionnant dans une plage d'énergie comprise entre 20 et 25 kV et un intensité de 0.5 mA.	Des cibles métalliques pures de ^{74}W , ^{82}Pb et ^{92}U .	Détecteurs Si-PIN refroidis par Peltier, résolution d'environ 200 eV à 5.959 keV.
[117]	f_{23}	Rayons X émis lors de la désintégration des radionucléides.	^{78}Pt , ^{80}Hg , ^{81}Tl , ^{82}Pb , ^{92}U , ^{96}Cm .	Détecteur Si(Li) pour les rayons X L (surface 30 mm ² , épaisseur 5mm) et détecteur Ge(Li) pour les rayons X K (surface 200 mm ² , épaisseur 10 mm).
[119]	f_{23}	^{207}Bi , qui se désintègre en Pb par capture d'électrons, énergies des rayons X de 7497 keV et 7280 keV. Détecteur Ge(HP) et Si(Li).	^{82}Pb .	Détecteur Ge(HP) et Si(Li).
[120]	a_2, a_3	Désintégration du ^{210}Pb .	^{83}Bi .	Détecteurs Ge(Li) et Si(Li) pour les rayons X.
[121]	f_{12}, f_{23}	Les rayons X, la désintégration du ^{226}Ra en équilibre avec ses produits de désintégration, produisant principalement du bismuth (^{214}Bi) entre 74.8 keV et 77.1 keV.	^{83}Bi .	Ge(Li) coaxial (25.1 cm ³) et Si(Li) plan (diamètre actif de 6 mm).
[122]	f_{23}	^{243}Am - ^{239}Np , électrodéposé sur du Mylar aluminisé.	^{86}Rn , ^{88}Ra , ^{94}Pu , ^{96}Cm . Sources spécifiques incluses ^{243}Am - ^{239}Np et ^{227}Th .	Détecteurs de rayons X Ge(HP) et Si(Li) intrinsèques de haute pureté dans un système de coïncidence rapide-lent.

[123]	f_{23}	Désintégrations de ^{224}Ra et ^{238}Pu avec une énergie de 84.5 keV.	^{224}Ra et ^{238}Pu purifiés par échange d'ions et évaporés sur un support en béryllium.	Spectromètre à rayons X Si(Li).
[124]	f_{23}	Bombardement de protons à 1.5 MeV.	^{88}Ra , ^{90}Th , ^{92}U , ^{94}Pu .	Détecteur de rayons X Si(Li), diamètre 6 mm, profondeur 3 mm, fenêtre Be 30 μm , résolution 150 eV à 5.9 keV.
[125]	f_{23}, a_2	57.9 keV Désintégration alpha de ^{232}U .	^{90}Th .	Détecteur à barrière de surface (Ortec) pour les particules alpha, compteur à scintillation NaI(Tl) pour les rayons X L, détecteur Si(Li) pour mesurer l'intensité relative des photons LX photons
[126]	$f_{12}, f_{23}, f_{13}, F_{123}$ (calculé)	Énergie de désintégration Q_{EC} de l'isotope ^{235}Np , qui a été déterminée à 123.6 keV.	^{92}U .	Le détecteur Ge(HP) avait une résolution de 204 eV FWHM à 5.9 keV, et le détecteur Si(Li) avait une résolution de 180 eV FWHM à 5.9 keV.
[127]	f_{23}	L'isotope radioactif ^{249}Cf .	^{96}Cm .	Détecteur de rayons X Si(Li) (résolution de 169 eV FWHM à 5.9 keV), Spectromètre Ge(Li) (résolution de 730 eV FWHM à 122 keV).
[128]	f_{23}	Rayons gamma d'une énergie de 88 keV provenant d'une source radioactive ^{109}Cd .	Feuille d' ^{79}Au pur	Rayons X K : détecteur ORTEC LEPS HPGe (160 eV à 5.9 keV) rayons X : détecteur DSG Si(Li) (140 eV à 5.9 keV) ; angle relatif entre les détecteurs : 125°
[129]	f_{23}	Rayonnement synchrotron de 90.3 keV provenant de la source photonique avancée (APS) d'Argonne.	Feuilles très fines de ^{79}Au .	Détecteurs à l'état solide au germanium placés à des angles spécifiques par rapport au faisceau.
[130]	f_{23}	Désintégration par capture d'électrons du Bi_{207} .	^{82}Pb .	Détecteur Ge(Li) pour les rayons X K du Pb, détecteur Si(Li) pour les rayons X L du Pb.
[131]	f_{23}	Rayonnement bêta. La source radioactive ^{179}W subit une capture d'électrons.	^{73}Ta .	Détecteur Ge(Li) et détecteur Si(Li).

[133]	$f_{12}, f_{23}, f_{13},$ F_{123} (calculé)	L'énergie a été réglée entre 3 et 14 keV à l'aide d'un faisceau de rayons X monochromatique rayonnement synchrotron rayonnement synchrotron.	Feuille épaisse de ^{72}Hf pur.	Détecteur, épaisseur 5 mm, diamètre 5 mm, résolution de 165 eV à 5.9 keV avec une fenêtre en béryllium de 0.0127 cm d'épaisseur.
[134]	f_{23}	Rayons gamma de 59.54 keV Provenant d'une source de ^{241}Am .	$^{76}\text{Os}, ^{81}\text{T}$.	Détecteur Si(Li) avec une résolution de 160 eV à 5.9 keV.
[135]	f_{23}, F_{123}	Decay of ^{181}W produces a transition energy of 187 keV, and the coincidence rates between L X-rays, K X-rays, and 153 keV gamma rays were measured.	^{73}Ta .	Si(Li) detector with 260 eV FWHM at 6.4 keV for L x-ray spectra, Ge(Li) x-ray spectrometer with 470 eV FWHM at 6.4 keV for Ta K x-rays.
[137]	f_{23}	$K\alpha$ et $K\beta$, les spectres Lx ont été enregistrés en coïncidence avec les rayons X $K\alpha$ et $K\beta$.	$^{65}\text{Tb}, ^{70}\text{Yb}, ^{73}\text{Ta},$ ^{80}Hg .	Détecteurs Si(li) avec une résolution FWHM de 260 eV à 6.4.
[138]	f_{23}	^{155}Eu (demi-vie de 4.68 ans) et ^{165}Er (demi-vie de 10.4 heures).	$^{63}\text{Eu}, ^{68}\text{Er}$	Ge(HP) avec une résolution de 340 eV à 46 keV. Détecteur de rayons X L: Si(Li) avec une résolution FWHM de 240 eV à 5.9 keV.
[139]	f_{13}	Rayonnement synchrotron provenant de (BESSY), gamme d'énergie des photons comprise entre 2 et 2.5 keV.	Feuille de ^{39}Y	Analyseur d'électrons hémisphérique commercial (CLAM 100).
[140]	f_{13}	Rayons gamma de 59.54 keV provenant d'une source ^{241}Am .	Feuilles minces, spectroscopiquement pures, de $^3\text{YbF},$ $^3\text{LuF}, ^3\text{W}, \text{O}, \text{Re},$ Au et TlCl évaporées sur un support en Mylar. Cibles épaisses de $^{70}\text{Yb}, ^{75}\text{Re}, ^{79}\text{Au},$ ^{80}Hg .	Détecteur Si(Li) de dimensions 28.27 mm x 35.5 mm, largeur à mi-hauteur de 180 eV à 5.89 keV
[141]	f_{13}	Bombardement électronique, avec une énergie supérieure à 40 keV.	$^{73}\text{Ta}, ^{74}\text{W}, ^{77}\text{Ir}, ^{78}\text{Pt},$ $^{79}\text{Au}, ^{81}\text{Tl}$.	Spectrographe à cristal de quartz, films Ilfex, microphotomètre Hilger et Watts.

[142]	f_{12}, f_{13}	Désintégration par capture d'électrons du ^{181}W (193 keV) entraîne la production de rayons X Ta L, ainsi que de rayons gamma d'énergies de 136 keV et 159 keV.	^{73}Ta .	Détecteur Si(Li) ayant une résolution de 240 eV à 6.4 keV pour les rayons X Fe K.
[144]	f_{13}	^{241}Am Source annulaire d'américium (300 mCi) émettant des rayons gamma de 59.5 keV.	^{77}Ir , ^{78}Pt , ^{83}Bi .	Détecteur Si(Li) (28.27 mm ² x 5.5 mm, FWHM = 180 eV à 5.89 keV).
[145]	f_{13}	^{241}Am radioactif, qui émet des rayons gamma de 59.54 keV rayons gamma.	^{42}Mo Les rayons X K ont été utilisés comme ^{90}Th , ^{92}U .	Détecteur Si(Li) avec une résolution de 180 eV à 5.89 keV a été utilisé pour détecter les spectres de rayons X.
[146]	f_{12}, f_{13}	Une énergie de 388 keV a été utilisée dans la désintégration du ^{249}Cf .	^{96}Cm .	Détecteurs Si(Li) pour les rayons X L et les électrons de conversion, détecteur Ge(Li) pour les rayons gamma.
[147]	f_{12}, f_{23}, f_{13} , F_{123} (calculé) a_1, a_2, a_3 ,	^{199}Au (dans une solution de chlorures avec du HCl dilué).	Sources minces de ^{79}Au sur film Formvar de 10 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$.	Spectromètre à double focalisation avec compteurs Geiger à flux continu et fenêtres à film organique très minces.
[151]	a_3	Les rayons X étaient de 25 kV. Anodes en Y_2O_3 (oxyde d'yttrium) et anodes en Ag (argent).	Couche mince de ^{83}Bi déposée sur une feuille de Formvar de 500 Å d'épaisseur. La couche de bismuth avait une épaisseur d'environ 100 Å.	Un spectromètre à lentille magnétique a été utilisé pour mesurer le spectre électronique, en se concentrant sur l'énergie, la transition et l'intensité relative des raies.
[152]	a_2, f_{23}	Le ^{242}Cm se désintègre avec une énergie de particule alpha de 6.115 MeV.	Composé initialement de 76% de ^{242}Cm , 13,9% de ^{244}Cm et 10% ^{238}Pu .	Détecteur à barrière de surface en silicium pour les particules alpha, cristal NaI(Tl) pour la détection des rayons X L.

Table 2. Résumé des données expérimentales $(f_{12})_{Exp}$ de ^{28}Ni à ^{96}Cm présentées en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(f_{12})_W$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ε_{ISD} , ε_{ESD} , l'écart type interne et externe (z_{ISD} , z_{ESD}) et leurs moyennes (\bar{z}_{ISD} , \bar{z}_{ESD}) sont également indiqués.

Elements	$(f_{12})_{Exp}$ $\pm \Delta(f_{12})_{Exp}$	References	$(f_{12})_W$	ε_{ISD}	z_{ISD}	\bar{z}_{ISD}	ε_{ESD}	z_{ESD}	\bar{z}_{ESD}
^{28}Ni	0.35±0.20 0.82±0.23	[52] [53]	0.5524	0.1509	-0.81 0.97	0.08	0.2327	-0.66 0.82	0.23
^{29}Cu	0.44±0.06	[52]	0.4400	0.0600	0.00	0.00	-	-	-
^{40}Zr	0.145±0.148	[65]	0.1450	0.1480	0.00	0.00	-	-	-
^{42}Mo	0.15±0.02 0.182±0.096	[52] [54]	0.1513	0.0196	-0.05 0.31	0.13	0.0064	-0.06 0.32	0.01
^{44}Ru	0.173±0.073 0.1673±0.012	[66] [67]	0.1674	0.0118	0.08 -0.01	0.03	0.0009	0.08 -0.01	0.00
^{45}Rh	0.10±0.02	[68]	0.1000	0.0200	0.00	0.00	-	-	-
^{46}Pd	0.047±0.001 0.072±0.004 0.08±0.08	[59] [59] [54]	0.0485	0.0010	-1.06 5.72 0.39	1.68	0.0042	-0.34 4.07 0.39	0.00
^{47}Ag	0.044±0.004 0.14±0.03 0.14	[52] [47] [47]	0.0457	0.0040	-0.30 3.12 23.79	1.41	0.0126	-0.13 2.90 7.50	0.01
^{50}Sn	0.39±0.03 0.10±0.10 0.070±0.004 0.144±0.023	[44] [44] [70] [70]	0.0776	0.0039	10.33 0.22 -1.36 2.85	3.01	0.0247	8.03 0.22 -0.30 1.97	0.02
^{51}Sb	0.079±0.004 0.106±0.008 0.161±0.026	[70] [70] [70]	0.0858	0.0035	-1.28 2.31 2.86	1.30	0.0105	-0.61 1.53 2.68	0.01
^{54}Xe	0.19±0.038 0.12±0.03 0.096±0.016	[71] [72] [73]	0.1121	0.0132	1.94 0.24 -0.77	0.47	0.0215	1.78 0.21 -0.60	0.02
^{56}Ba	0.156±0.02	[74]	0.1560	0.0200	0.00	0.00	-	-	-
^{57}La	0.212±0.02	[75]	0.2120	0.0200	0.00	0.00	-	-	-
^{59}Pr	0.185 ± 0.015 0.147±0.01	[8] [75]	0.1587	0.0083	1.53 -0.90	0.32	0.0175	1.14 -0.58	0.02
^{60}Nd	0.188 ± 0.011	[8]	0.1880	0.0110	0.00	0.00	-	-	-
^{62}Sm	0.19±0.03 0.214±0.034 0.196±0.019	[76] [77] [3]	0.1979	0.0145	-0.243 0.44 -0.08	0.04	0.0057	-0.26 0.47 -0.09	0.01

63Eu	0.26±0.10 0.21±0.021	[78] [3]	0.2508	0.0090	0.69 -1.78	-0.55	0.0194	0.42 -1.43	0.02
64Gd	0.200±0.030 0.166±0.020 0.190 ± 0.011 0.233±0.023 0.053±0.023 0.169±0.096 0.148±0.043	[79] [80] [8] [3] [81] [82] [82]	0.1746	0.0078	0.82 -0.40 1.14 2.40 -5.00 -0.06 -0.61	-0.24	0.0196	0.71 -0.31 0.69 1.93 -4.02 -0.06 -0.56	0.02
65Tb	0.41±0.36 0.201±0.014 0.191 ± 0.013 0.203±0.020	[83] [84] [8] [3]	0.1971	0.0086	0.59 0.24 -0.39 0.27	0.18	0.0043	0.59 0.27 -0.45 0.29	0.00
66Dy	0.212 ± 0.034 0.180 ± 0.009 0.195 ± 0.012 0.207±0.062 0.194±0.019 0.183 ± 0.013	[49] [49] [8] [85] [3] [49]	0.1867	0.0059	0.73 -0.63 0.62 0.33 0.37 -0.26	0.19	0.0036	0.74 -0.69 0.66 0.33 0.38 -0.28	0.00
67Ho	0.187 ± 0.013 0.194±0.033 0.216±0.065 0.19±0.019	[8] [77] [85] [3]	0.1892	0.0101	-0.13 0.14 0.41 0.04	0.11	0.0027	-0.17 0.15 0.41 0.04	0.00
68Er	0.143±0.01 0.196±0.034 0.142±0.043	[88] [77] [85]	0.1470	0.0094	-0.29 1.39 -0.11	0.33	0.0099	-0.28 1.38 -0.11	0.01
70Yb	0.16±0.03 0.249±0.021	[86] [87]	0.2197	0.0172	-1.73 1.08	-0.32	0.0418	-1.16 0.63	0.04
71Lu	0.139±0.043	[85]	0.1390	0.0430	0.00	0.00	-	-	-
72Hf	0.141±0.015 0.182±0.015 0.123±0.01 0.185±0.031 0.1923±0.0155	[55] [8] [133] [77] [100]	0.1519	0.0064	-0.66 1.85 -2.43 1.05 2.41	0.44	0.0147	-0.52 1.44 -1.62 0.97 1.89	0.01
73Ta	0.23±0.05 0.104±0.015 0.168±0.039 0.187±0.034 0.131±0.039 0.14±0.11	[89] [55] [87] [77] [85] [90]	0.1300	0.0119	1.95 -1.36 0.93 1.58 0.02 0.09	0.54	0.0174	1.89 -1.13 0.89 1.49 0.02 0.09	0.02
74W	0.260±0.063 0.102±0.015 0.183 ± 0.013 0.156±0.004 0.188±0.033 0.129±0.039 0.138±0.022 0.109±0.005	[91] [55] [8] [92] [77] [85] [58] [58]	0.1392	0.0029	1.92 -2.44 3.29 3.39 1.47 -0.26 -0.05 -5.22	0.26	0.0097	1.89 -2.08 2.70 1.59 1.42 -0.25 -0.05 -2.76	0.01
75Re	0.286±0.070 0.141±0.004 0.094±0.033 0.128±0.020 0.103±0.005	[91] [92] [77] [58] [58]	0.1403	0.0039	2.08 0.12 -1.39 -0.60 -5.89	0.05	0.0058	2.07 0.10 -1.38 -0.59 -4.86	0.01

⁷⁶ Os	0.108±0.004	[92]	0.1080	0.0040	0.00	0.00	-	-	-
⁷⁷ Ir	0.157±0.035 0.11±0.04 0.091±0.011 0.058±0.020 0.088±0.004	[91] [89] [101] [55] [92]	0.0883	0.0037	1.95 0.54 0.24 -1.49 -0.05	0.24	0.0047	1.95 0.54 0.23 -1.47 -0.04	0.00
⁷⁸ Pt	0.15±0.04 0.066±0.020 0.076±0.015 0.078±0.004 0.053±0.016	[93] [55] [77] [92] [85]	0.0781	0.0038	1.79 -0.59 -0.13 -0.02 -1.53	0.26	0.0041	1.79 -0.59 -0.13 -0.02 -1.52	0.00
⁷⁹ Au	0.25±0.13 0.207±0.051 0.047±0.010 0.047±0.020 0.152 ± 0.014 0.127±0.006 0.073±0.015 0.064±0.040 0.050±0.015	[48] [91] [56] [55] [8] [94] [77] [54] [85]	0.1007	0.0043	1.15 2.08 -4.94 -2.63 3.51 3.58 -1.78 -0.91 -3.25	-0.36	0.0143	1.14 2.01 -3.08 -2.19 2.57 1.70 -1.34 -0.86 -2.45	0.01
⁸⁰ Hg	0.128±0.007 0.051±0.015	[94] [85]	0.1142	0.0063	1.46 -3.88	-1.21	0.0295	0.45 -1.91	0.03
⁸¹ Tl	0.17±0.05 0.14±0.03 0.148 ±0.012	[33] [95] [8]	0.1480	0.0109	0.43 -0.25 0.00	0.06	0.0040	0.44 -0.26 0.00	0.00
⁸² Pb	0.15±0.04 0.17±0.05 0.105±0.026 0.040 ±0.015 0.064±0.013 0.010±0.009 0.053±0.016	[46] [96] [60] [55] [77] [54] [85]	0.0414	0.0059	2.69 2.56 2.39 -0.08 1.59 -2.92 0.68	0.99	0.0143	2.56 2.47 2.15 -0.07 1.17 -1.86 0.54	0.01
⁸³ Bi	0.19±0.05 0.18±0.02 0.093±0.009 0.10±0.02 0.101 ± 0.010 0.069±0.008 0.052±0.016 0.032±0.021 0.16	[97] [43] [30] [30] [8] [98] [85] [99] [45]	0.0865	0.0045	2.06 4.56 0.64 0.66 1.32 -1.91 -2.08 -2.54 16.35	0.34	0.0114	2.02 4.06 0.44 0.58 0.95 -1.26 -1.76 -2.28 6.42	0.01
⁹⁰ Th	0.080 ± 0.010 0.086±0.020 0.058	[8] [91] [62]	0.0812	0.0089	-0.09 0.22 -2.59	0.06	0.0024	-0.12 0.24 -9.67	0.00
⁹² U	0.064±0.012 0.051	[77] [62]	0.0640	0.0120	0.00 -1.08	0.00	-	- -	-
⁹³ Np	0.10±0.04 0.10±0.02 0.10±0.01 0.10±0.05	[41] [30] [30] [29]	0.1000	0.0086	0.00 0.00 0.00 0.00	0.00	0.0000	0.00 0.00 0.00 0.00	0.00
⁹⁵ Am	0.16±0.03	[153]	0.1600	0.0300	0.00	0.00	-	-	-
⁹⁶ Cm	0.038±0.022 0.05±0.05	[42] [29]	0.0399	0.0201	-0.07 0.19	0.06	0.0044	-0.09 0.20	0.00

Table 3. Résumé des données expérimentales $(f_{23})_{Exp}$ de ^{28}Ni à ^{100}Fm sont présentées en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(f_{23})_W$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ε_{ISD} , ε_{ESD} , l'écart type interne et externe (Z_{ISD} , Z_{ESD}), et leurs moyennes (\bar{Z}_{ISD} , \bar{Z}_{ESD}) sont également répertoriées.

Elements	$(f_{23})_{Exp}$ $\pm \Delta(f_{23})_{Exp}$	References	$(f_{23})_W$	ε_{ISD}	Z_{ISD}	\bar{Z}_{ISD}	ε_{ESD}	Z_{ESD}	\bar{Z}_{ESD}
^{28}Ni	0.6±0.2	[52]	0.6480	0.0894	-0.22	-0.06	0.0240	-0.24	0.02
	0.66±0.10	[53]							
^{29}Cu	0.8±0.1	[52]	0.8000	0.1000	0.00	0.00	-	-	-
^{40}Zr	0.218±0.055	[65]	0.2180	0.0550	0.00	0.00	-	-	-
^{42}Mo	0.15±0.02	[52]	0.1610	0.0178	-0.41	0.28	0.0215	-0.38	0.02
	0.203± 0.039	[54]							
^{44}Ru	0.177±0.032	[66]	0.1972	0.0217	-0.52	-0.03	0.0186	-0.54	0.02
	0.2144±0.0296	[67]							
^{45}Rh	0.15±0.03	[68]	0.1500	0.0300	0.00	0.00	-	-	-
^{46}Pd	0.164±0.033	[59]	0.1421	0.0198	0.57	-0.01	0.0117	0.63	0.01
	0.130±0.030	[59]							
	0.129±0.044	[54]							
^{47}Ag	0.16±0.03	[69]	0.1700	0.0173	-0.29	0.00	0.0058	-0.33	0.01
	0.17±0.03	[52]							
	0.18±0.03	[47]							
	0.27	[47]							
^{50}Sn	0.18±0.03	[44]	0.1228	0.0057	1.87	0.87	0.0086	1.83	0.01
	0.17±0.05	[44]							
	0.118±0.006	[70]							
	0.155±0.025	[70]							
^{51}Sb	0.124±0.006	[70]	0.1273	0.0049	-0.43	0.70	0.0086	-0.32	0.01
	0.129±0.009	[70]							
	0.206±0.033	[70]							
^{54}Xe	0.14±0.02	[72]	0.1396	0.0130	0.01	0.01	0.0069	0.02	0.01
	0.154±0.031	[71]							
	0.148±0.029	[102]							
	0.118±0.029	[73]							
^{56}Ba	0.26±0.26	[27]	0.1891	0.0100	0.27	0.13	0.0027	0.27	0.00
	0.189±0.01	[74]							
^{57}La	0.21±0.02	[103]	0.1812	0.0089	1.31	0.39	0.0144	1.17	0.01
	0.174±0.01	[75]							
^{59}Pr	0.166±0.01	[104]	0.1720	0.0071	-0.49	0.00	0.0060	-0.51	0.01
	0.178±0.01	[75]							
^{60}Nd	0.123± 0.013	[105]	0.1449	0.0043	-1.60	-0.19	0.0059	-1.53	0.01
	0.146±0.005	[106]							
	0.155±0.011	[8]							
^{62}Sm	0.14±0.03	[76]	0.1375	0.0127	0.08	0.02	0.0011	0.08	0.00
	0.137±0.014	[3]							
^{63}Eu	0.129±0.019	[34]	0.1721	0.0093	-2.04	-0.17	0.0189	-1.61	0.02
	0.199±0.015	[132]							
	0.172±0.015	[131]							
^{64}Gd	0.223±0.011	[38]	0.1558	0.0048	5.6	-0.04	0.0129	3.96	0.01
	0.130±0.012	[138]							
	0.157± 0.012	[108]							
	0.140±0.020	[79]							
	0.147 ± 0.010	[8]							
	0.132±0.013	[3]							

	0.095±0.020 0.235±0.059 0.206±0.060	[81] [82] [82]			-2.96 1.34 0.83			-2.55 1.31 0.82	
⁶⁵ Tb	0.090±0.014 0.066±0.014 0.150±0.011 0.130±0.011 0.097±0.016 0.150 ± 0.012 0.15±0.015	[83] [137] [38] [34] [84] [8] [3]	0.1237	0.0049	-2.27 -3.89 2.19 0.53 -1.59 2.03 1.67	-0.19	0.0125	-1.79 -3.07 1.58 0.38 -1.31 1.52 1.35	0.01
⁶⁶ Dy	0.168±0.013 0.145 ± 0.010 0.142±0.042 0.141±0.021 0.117± 0.006 0.055± 0.003 0.141±0.014	[50] [8] [85] [49] [49] [49] [3]	0.0794	0.0025	6.69 6.37 1.49 2.91 5.79 -6.27 4.33	3.04	0.0152	4.43 3.61 1.40 2.38 2.30 -1.58 2.98	0.02
⁶⁷ Ho	0.205±0.034 0.143±0.010 0.115±0.011 0.141± 0.011 0.142± 0.011 0.139±0.042 0.133±0.013	[35] [111] [138] [108] [8] [85] [3]	0.1367	0.0049	1.99 0.56 -1.81 0.35 0.44 0.05 -0.27	0.19	0.0059	1.98 0.54 -1.74 0.34 0.42 0.05 -0.26	0.01
⁶⁸ Er	0.225±0.025 0.159±0.012 0.141±0.011 0.160±0.005 0.134±0.040	[35] [110] [8] [88] [85]	0.1587	0.0042	2.62 0.03 -1.50 0.20 -0.61	0.15	0.0066	2.56 0.02 -1.38 0.16 -0.61	0.01
⁶⁹ Tm	0.148±0.007 0.1344±0.0024 0.1406±0.0024	[111] [114] [114]	0.1381	0.0016	1.38 -1.26 0.86	0.33	0.0027	1.32 -1.01 0.69	0.00
⁷⁰ Yb	0.142±0.009 0.170±0.009 0.174±0.009 0.165±0.009 0.142±0.009 0.130±0.010 0.141±0.007 0.186±0.040 0.149±0.013	[37] [113] [113] [113] [137] [86] [105] [87] [110]	0.1517	0.0032	-1.01 1.92 2.34 1.40 -1.01 -2.06 -1.39 0.86 -0.20	0.09	0.0054	-0.92 1.75 2.13 1.27 -0.92 -1.91 -1.21 0.85 -0.19	0.01
⁷¹ Lu	0.135±0.040	[85]	0.1350	0.0400	0.00	0.00	-	-	-
⁷² Hf	0.109±0.010 0.138±0.010 0.139 ±0.013 0.142±0.005 0.1343±0.0186	[55] [110] [8] [133] [100]	0.1360	0.0038	-2.53 0.18 0.22 0.95 -0.10	-0.25	0.0056	-2.35 0.17 0.21 0.79 -0.10	0.01
⁷³ Ta	0.20±0.04 0.148±0.010 0.180±0.007 0.150±0.007 0.125±0.008 0.160±0.003 0.155±0.003 0.165±0.021 0.160±0.021 0.167±0.027 0.157±0.003 0.152±0.003 0.153±0.002 0.111±0.010 0.161±0.053	[115] [136] [135] [137] [34] [107] [107] [107] [107] [107] [107] [107] [107] [107] [55] [87]	0.1543	0.0011	1.14 -0.62 3.63 -0.60 -3.62 1.79 0.23 0.51 0.27 0.47 0.85 -0.71 -0.55 -4.30 0.13	-0.14	0.0021	1.14 -0.61 3.52 -0.59 -3.54 1.57 0.20 0.51 0.27 0.47 0.75 -0.62 -0.44 -4.24 0.13	0.00

	0.131±0.039 0.123±0.084	[85] [90]			-0.60 -0.37			-0.60 -0.37	
⁷⁴ W	0.106±0.010 0.146±0.008 0.144±0.017 0.137±0.010 0.131±0.039 0.174±0.028 0.137±0.007	[55] [50] [116] [8] [85] [58] [58]	0.1353	0.0040	-2,72 1.19 0.50 0.15 -0.11 1.37 0.21	0.08	0.0059	-2.53 1.08 0.48 0.14 -0.11 1.35 0.18	0.01
⁷⁵ Re	0.113±0.018 0.113±0.006	[58] [58]	0.1130	0.0057	0.00 0.00	0.00	0.0000	0.00 0.00	0.00
⁷⁶ Os	0.106±0.023 0.142±0.029	[37] [134]	0.1199	0.0180	-0.48 0.65	0.09	0.0175	-0.48 0.65	0.02
⁷⁷ Ir	0.103±0.010	[55]	0.1030	0.0100	0.00	0.00	-	-	-
⁷⁸ Pt	0.114±0.020 0.126±0.020 0.112±0.012 0.104±0.020 0.133±0.016 0.125±0.037	[37] [37] [117] [55] [116] [85]	0.1178	0.0072	-0.18 0.38 -0.42 -0.65 0.86 0.19	0.03	0.0044	-0.19 0.40 -0.46 -0.68 0.91 0.19	0.00
⁷⁹ Au	0.22±0.04 0.192±0.011 0.100±0.009 0.112±0.004 0.101±0.010 0.125 ± 0.013 0.119±0.003 0.112±0.004 0.180±0.040 0.124±0.037	[48] [64] [56] [112] [55] [8] [128] [129] [54] [85]	0.1170	0.0019	2.57 6.72 -1.85 -1.13 -1.57 0.61 0.56 -1.13 1.57 0.19	0.65	0.0052	2.55 6.17 -1.64 -0.77 -1.42 0.57 0.33 -0.77 1.56 0.19	0.01
⁸⁰ Hg	0.22±0.04 0.080±0.02 0.190±0.010 0.192±0.011 0.188±0.010 0.134±0.011 0.128±0.008 0.123±0.012 0.122±0.001 0.123 ±0.002 0.124±0.037	[147] [115] [64] [64] [137] [34] [34] [39] [112] [117] [85]	0.1261	0.0013	2.35 -2.30 6.33 5.94 6.13 0.71 0.23 -0.26 -1.72 -1.30 -0.06	1.46	0.0049	2.33 -2.24 5.74 5.48 5.56 0.65 0.20 -0.24 -0.79 -0.60 -0.06	0.00
⁸¹ Tl	0.25±0.13 0.08±0.02 0.169±0.010 0.159±0.013 0.130±0.007 0.130±0.006 0.113±0.011 0.109±0.011 0.117±0.006 0.118 ± 0.013 0.122±0.026	[33] [115] [95] [37] [37] [118] [34] [39] [117] [8] [134]	0.1273	0.0029	0.94 -2.34 4.00 2.38 0.35 0.40 -1.26 -1.61 -1.55 -0.70 -0.20	0.04	0.0057	0.94 -2.28 3.62 2.23 0.29 0.32 -1.16 -1.48 -1.25 -0.66 -0.20	0.01
⁸² Pb	0.164±0.016 0.156±0.010 0.105±0.011 0.130±0.002 0.111±0.002 0.113±0.002 0.1055±0.011 0.112 ±0.001	[148] [130] [39] [60] [26] [26] [119] [119]	0.1148	0.0007	3.07 4.11 -0.89 7.16 -1.76 -0.82 -0.84 -2.22	0.58	0.0022	3.05 4.03 -0.87 5.15 -1.27 -0.59 -0.83 -1.15	0.00

	0.115 ±0.004 0.091±0.010 0.136±0.016 0.141±0.040 0.115±0.035	[117] [55] [116] [54] [85]			0.06 -2.37 1.33 0.66 0.01			0.05 -2.32 1.32 0.66 0.01	
⁸³ Bi	0.06±0.14 0.164±0.016 0.17±0.03 0.164±0.016 0.18±0.018 0.18±0.07 0.135±0.011 0.115 ± 0.010 0.103±0.031 0.057±0.016	[97] [46] [120] [30] [30] [121] [50] [8] [85] [99]	0.1314	0.0053	-0.51 1.93 1.27 1.93 2.59 0.69 0.30 -1.45 -0.90 -4.41	0.14	0.0116	-0.51 1.65 1.20 1.65 2.27 0.69 0.23 -1.07 0.86 -3.76	0.01
⁸⁶ Rn	0.105±0.011	[122]	0.1050	0.0110	0.00	0.00	-	-	-
⁸⁸ Ra	0.01±0.07 0.102±0.006 0.053±0.026 0.104±0.002	[51] [123] [122] [124]	0.1035	0.0019	-1.33 -0.23 -1.94 0.20	-0.83	0.0026	-1.33 -0.22 -1.93 0.16	0.00
⁹⁰ Th	0.13±0.10 0.105±0.007 0.110 ±0.011 0.106	[125] [124] [8] [62]	0.1065	0.0059	0.23 -0.17 0.28 -0.09	0.12	0.0019	0.23 -0.21 0.31 -0.28	0.00
⁹¹ Pa	0.13±0.13	[28]	0.1300	0.1300	0.00	0.00	-	-	-
⁹² U	0.38±0.06 0.23±0.12 0.37±0.07 0.40±0.07 0.43±0.06 0.147±0.010 0.07±0.05 0.146±0.018 0.139±0.004 0.140±0.004 0.158±0.019 0.139	[31] [109] [31] [31] [31] [126] [51] [39] [124] [117] [116] [62]	0.1421	0.0027	3.96 0.73 3.25 3.68 4.79 0.47 -1.44 0.21 -0.65 -0.44 0.83 -1.18	1.40	0.0069	3.94 0.73 3.24 3.67 4.77 0.40 -1.43 0.20 -0.39 -0.27 0.79 -0.45	0.01
⁹³ Np	0.223±0.020 0.22±0.022 0.30±0.10	[30] [30] [29]	0.2233	0.0146	-0.01 -0.13 0.76	0.21	0.0081	-0.01 -0.14 0.76	0.01
⁹⁴ Pu	0.22±0.08 0.42±0.08 0.42±0.09 0.226±0.016 0.229±0.004 0.233±0.015 0.225±0.006	[32] [31] [31] [122] [123] [131] [124]	0.2369	0.0032	-0.21 2.29 2.03 -0.67 -1.54 -0.25 2.67	0.62	0.0062	-0.21 2.28 2.03 -0.63 -1.07 -0.24 2.10	0.01
⁹⁶ Cm	0.188±0.019 0.188±0.010 0.226±0.017 0.209±0.022 0.219±0.016 0.19±0.04	[109] [122] [131] [127] [117] [29]	0.2010	0.0066	-0.65 -1.09 1.37 0.35 1.04 -0.27	0.13	0.0071	-0.64 -1.06 1.36 0.35 1.03 -0.27	0.01
¹⁰⁰ Fm	0.18±0.04	[153]	0.1800	0.0400	0.00	0.00	-	-	-

Table 4. Résumé des expériences $(f_{13})_{Exp}$ Coster Kronig de ${}_{28}\text{Ni}$ à ${}_{96}\text{Cm}$ sont présentées en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(f_{13})_W$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ϵ_{ISD} , ϵ_{ESD} , les écarts-types internes et externes (z_{ISD} , z_{ESD}), et leurs moyennes (\bar{z}_{ISD} , \bar{z}_{ESD}) sont également indiqués.

Elements	$(f_{13})_{Exp}$ $\pm \Delta(f_{13})_{Exp}$	References	$(f_{13})_W$	ϵ_{ISD}	z_{ISD}	\bar{z}_{ISD}	ϵ_{ESD}	Z_{ESD}	\bar{z}_{ESD}
${}_{28}\text{Ni}$	0.5±0.2 0.06±0.30	[52] [53]	0.3646	0.1664	0.52 -0.89	-0.18	0.2031	0.47 -0.84	0.20
${}_{29}\text{Cu}$	0.3±0.2	[52]	0.3000	0.2000	0.00	0.00	-	-	-
${}_{39}\text{Y}$	0.49±0.09	[139]	0.4900	0.0900	0.00	0.00	-	-	-
${}_{40}\text{Zr}$	0.529±0.178	[65]	0.5290	0.1780	0.00	0.00	-	-	-
${}_{42}\text{Mo}$	0.61±0.06 0.57±0.14	[52] [54]	0.6038	0.0551	0.08 -0.22	-0.07	0.0145	0.10 -0.24	0.01
${}_{44}\text{Ru}$	0.528±0.090 0.5134±0.0204	[66] [67]	0.5141	0.0199	0.15 -0.03	0.06	0.0031	0.15 -0.03	0.00
${}_{45}\text{Rh}$	0.60±0.09	[68]	0.6000	0.0900	0.00	0.00	-	-	-
${}_{46}\text{Pd}$	0.730±0.039 0.743±0.045 0.589±0.131	[59] [59] [54]	0.7285	0.0288	0.03 0.27 -1.04	-0.25	0.0226	0.03 0.29 -1.05	0.02
${}_{47}\text{Ag}$	0.61±0.05 0.61±0.06 0.58±0.05 0.58	[69] [52] [47] [47]	0.5989	0.0305	0.19 0.17 -0.32 -0.62	0.01	0.0102	0.22 0.18 -0.37 -1.84	0.01
${}_{50}\text{Sn}$	0.85±0.36 0.29±0.15 0.405±0.028 0.428±0.107	[44] [44] [70] [70]	0.4052	0.0266	1.23 -0.76 -0.01 0.21	0.17	0.0226	1.23 -0.76 0.01 0.21	0.02
${}_{51}\text{Sb}$	0.297±0.021 0.247±0.022 0.343±0.085	[70] [70] [70]	0.2753	0.0150	0.84 -1.06 0.78	0.19	0.0194	0.76 -0.97 0.78	0.02
${}_{54}\text{Xe}$	0.28±0.042 0.23±0.04 0.383±0.037	[71] [72] [73]	0.3029	0.0228	-0.48 1.58 1.84	-0.07	0.0465	-0.37 -1.19 1.35	0.05
${}_{56}\text{Ba}$	0.296±0.03	[74]	0.2960	0.0300	0.00	0.00	-	-	-
${}_{57}\text{La}$	0.358±0.03	[75]	0.3580	0.0300	0.00	0.00	-	-	-
${}_{59}\text{Pr}$	0.268±0.02	[75]	0.2680	0.0200	0.00	0.00	-	-	-
${}_{60}\text{Nd}$	0.306 ± 0.018	[8]	0.3060	0.0180	0.00	0.00	-	-	-
${}_{62}\text{Sm}$	0.18±0.03 0.19±0.03 0.44±0.044	[76] [76] [3]	0.2331	0.0191	-1.49 -1.21 4.31	0.54	0.0706	-0.69 -0.56 2.49	0.12
${}_{63}\text{Eu}$	0.27±0.03	[78]	0.2700	0,0300	0.00	0.00	-	-	-
${}_{64}\text{Gd}$	0.289±0.015 0.287±0.014 0.310 ± 0.012	[79] [80] [8]	0.2804	0.0071	0.52 0.42 2.13	-0.45	0.0164	0.39 0.31 1.46	0.02

	0.186±0.019 0.27±0.04 0.197±0.121 0.193±0.147	[3] [81] [82] [82]			-4.66 -0.26 -0.69 -0.59			-3.76 -0.24 -0.68 -0.59	
⁶⁵ Tb	0.43±0.28 0.281±0.027 0.299 ±0.015 0.323±0.032	[83] [84] [8] [3]	0.2991	0.0121	0.47 -0.61 0.00 0.70	0.14	0.0077	0.47 -0.64 0.00 0.73	0.01
⁶⁶ Dy	0.302 ±0.018 0.311±0.092 0.344±0.034 0.268 ± 0.030 0.302 ±0.076 0.284 ± 0.020	[8] [85] [3] [49] [49] [49]	0.2962	0.0113	0.27 0.16 1.33 -0.88 0.08 -0.53	0.07	0.0093	0.29 0.16 1.36 -0.90 0.08 -0.55	0.01
⁶⁷ Ho	0.314 ±0.025 0.306±0.092	[8] [85]	0.3134	0.0241	0.02 -0.08	-0.03	0.0020	0.02 -0.08	0.00
⁶⁸ Er	0.309 ±0.016 0.277±0.009 0.306±0.092	[8] [88] [85]	0.2848	0.0078	1.36 -0.66 0.23	0.31	0.0097	1.29 -0.59 0.23	0.01
⁷⁰ Yb	0.297±0.020 0.408±0.055 0.348 ±0.021	[86] [87] [140]	0.3269	0.0140	-1.22 1.43 0.84	0.35	0.0231	-0.98 1.36 0.68	0.02
⁷¹ Lu	0.338±0.021 0.316±0.092	[140] [85]	0.3369	0.0205	0.04 -0.22	-0.09	0.0048	0.05 -0.23	0.00
⁷² Hf	0.309±0.010 0.290±0.012 0.337±0.01 0.2562±0.0333	[55] [8] [133] [100]	0.3126	0.0060	-0.31 -0.69 2.09 -1.67	-0.39	0.0122	-0.23 -1.32 1.54 -1.59	0.01
⁷³ Ta	0.19±0.20 0.32±0.03 0.339±0.02 0.322±0.072 0.323±0.097 0.328±0.152	[141] [142] [55] [87] [85] [90]	0.3314	0.0159	-0.70 -0.34 0.30 -0.13 -0.09 -0.02	-0.16	0.0064	-0.71 -0.37 0.36 -0.13 -0.09 -0.02	0.01
⁷⁴ W	0.27±0.03 0.325±0.010 0.288±0.020 0.457±0.012 0.354±0.024 0.328±0.098 0.358±0.089 0.360±0.025	[141] [55] [8] [92] [140] [85] [58] [58]	0.3612	0.0064	-2.97 -3.05 -3.49 7.03 -0.29 -0.34 -0.04 -0.05	-0.40	0.0243	-2.36 -1.38 -2.33 3.53 -0.21 -0.33 -0.03 -0.04	0.02
⁷⁵ Re	0.510±0.015 0.450±0.027 0.30±0.04 0.428±0.030 0.437±0.109	[92] [140] [143] [58] [58]	0.4693	0.0114	2.16 -0.66 -4.07 -1.29 -0.29	-0.83	0.0302	1.21 -0.48 -3.38 -0.97 -0.29	0.03
⁷⁶ Os	0.55±0.02	[92]	0.5500	0.0200	0.00	0.00	-	-	-
⁷⁷ Ir	0.467±0.025 0.496±0.010 0.46±0.06 0.64±0.03 0.37±0.03	[144] [55] [141] [92] [89]	0.4944	0.0084	-0.70 0.12 -0.57 4.67 -3.99	-0.09	0.0272	-0.50 0.05 -0.52 3.60 -3.07	0.03
⁷⁸ Pt	0.50±0.05 0.562±0.020 0.527±0.027 0.67±0.04 0.563±0.169	[141] [55] [144] [92] [85]	0.5609	0.0142	-1.17 0.04 -1.11 2.57 0.01	0.07	0.0231	-1.11 0.04 -0.96 2.36 0.01	0.02
⁷⁹ Au	0.51±0.13 0.61±0.07	[48] [141]	0.5774	0.0079	-0.52 0.46	-0.17	0.0061	-0.52 0.46	0.01

	0.590±0.020 0.582±0.010 0.542 ±0.022 0.580±0.030 0.524±0.075 0.561±0.168	[56] [55] [8] [140] [54] [85]			0.59 0.36 -1.51 0.08 -0.71 -0.10			0.60 0.39 -1.55 0.09 -0.71 -0.10	
⁸⁰ Hg	0.582±0.030 0.578±0.173	[140] [85]	0.5819	0.0296	0.00 -0.02	-0.01	0.0007	0.00 -0.02	0.00
⁸¹ Tl	0.56±0.07 0.57±0.10 0.76±0.10 0.56±0.05 0.582±0.018 0.568±0.030	[33] [40] [141] [95] [8] [140]	0.5796	0.0141	-0.27 -0.09 1.79 -0.38 0.11 -0.35	0.13	0.0121	-0.28 -0.09 1.79 -0.38 0.11 -0.36	0.01
⁸² Pb	0.57±0.03 0.61±0.08 0.658±0.086 0.661±0.010 0.60±0.03 0.664±0.100 0.606±0.182	[46] [96] [60] [55] [145] [54] [85]	0.6469	0.0089	-2.46 -0.46 0.13 1.06 -1.50 0.17 -0.22	-0.47	0.0122	-2.37 -0.46 0.13 0.90 -1.45 0.17 -0.22	0.01
⁸³ Bi	0.58±0.05 0.58±0.02 0.61±0.03 0.63±0.03 0.579 ±0.017 0.620±0.025 0.66 ± 0.05 0.603±0.181 0.59±0.12 0.62	[97] [43] [30] [30] [8] [144] [98] [85] [99] [45]	0.5899	0.0104	-0.34 -0.77 0.41 1.04 -0.93 0.85 1.23 0.03 -0.06 2.37	0.38	0.0082	-0.34 -0.79 0.41 1.06 -0.96 0.87 1.24 0.03 -0.06 2.78	0.01
⁹⁰ Th	0.577±0.017 0.66±0.04 0.659	[8] [62] [62]	0.5897	0.0156	-0.55 1.64 4.43	0.54	0.0299	-0.37 1.41 2.32	0.03
⁹² U	0.67± 0.05 0.66±0.04 0.660	[126] [62] [62]	0.6639	0.0312	0.10 -0.08 -0.12	0.01	0.0049	0.12 -0.10 -0.80	0.00
⁹³ Np	0.55±0.09 0.707±0.065 0.70±0.07 0.55±0.09	[41] [30] [30] [29]	0.6486	0.0381	-1.01 0.78 0.65 -1.01	-0.15	0.0426	-0.99 0.75 0.63 -0.99	0.04
⁹⁶ Cm	0.69±0.08 0.68±0.04 0.72±0.08 0.50±0.09	[146] [146] [146] [29]	0.6664	0.0307	0.28 0.27 0.63 -1.75	-0.15	0.0358	0.27 0.25 0.61 -1.72	0.04
⁹⁸ Cf	0.63±0.07	[153]	0.6300	0.0700	0.00	0.00	-	-	-

Table 5. Résumé des expériences $(F_{123})_{Exp}$ Coster Kronig de ^{28}Ni à ^{92}Cm sont présentées en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(F_{123})_W$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ε_{ISD} , ε_{ESD} , les écarts-types internes et externes (Z_{ISD} , Z_{ESD}) et leurs moyennes (\bar{Z}_{ISD} , \bar{Z}_{ESD}) sont également indiqués.

Elements	$(F_{123})_{Exp}$ $\pm \Delta(F_{123})_{Exp}$	References	$(F_{123})_W$	ε_{ISD}	Z_{ISD}	\bar{Z}_{ISD}	ε_{ESD}	Z_{ESD}	\bar{Z}_{ESD}
^{28}Ni	0.71±0.224 0.601±0.346	[52] [53]	0.6778	0.1880	0.11 -0.20	-0.04	0.0497	0.14 -0.22	0.05
^{29}Cu	0.652±0.210	[52]	0.6520	0.2100	0.00	0.00	-	-	-
^{40}Zr	0.561±0.181	[65]	0.5610	0.1810	0.00	0.00	-	-	-
^{42}Mo	0.633±0.060 0.607±0.142	[52] [54]	0.6291	0.0553	0.05 -0.14	-0.05	0.0093	0.06 -0.16	0.01
^{44}Ru	0.559±0.091 0.594±0.021	[66] [67]	0.5922	0.0205	-0.36 0.06	-0.15	0.0077	-0.36 0.08	0.01
^{45}Rh	0.615±0.090	[68]	0.6150	0.0900	0.00	0.00	-	-	-
^{46}Pd	0.752±0.045 0.738±0.039 0.599±0.131	[59] [59] [54]	0.7370	0.0288	0.28 0.02 -1.03	-0.24	0.0225	0.30 0.02 -1.04	0.02
^{47}Ag	0.617±0.060 0.617±0.050 0.605±0.050 0.618	[52] [69] [47] [47]	0.6133	0.0320	0.05 0.06 -0.13 0.15	0.00	0.0039	0.06 0.07 -0.14 1.19	0.00
^{50}Sn	0.413±0.028 0.376±0.085 0.920±0.360 0.307±0.151	[70] [70] [44] [44]	0.4090	0.0261	0.10 -0.37 1.42 -0.67	0.12	0.0245	0.11 -0.37 1.42 -0.67	0.02
^{51}Sb	0.307±0.021 0.261±0.022 0.450±0.107	[70] [70] [70]	0.2883	0.0150	0.72 -1.03 1.50	0.40	0.0228	0.60 -0.86 1.48	0.02
^{54}Xe	0.309±0.043 0.247±0.040 0.394±0.037	[71] [72] [73]	0.3213	0.0230	-0.25 -1.61 1.67	-0.06	0.0442	-0.20 -1.25 1.26	0.04
^{56}Ba	0.325±0.030	[74]	0.0350	0.0300	0.00	0.00	-	-	-
^{57}La	0.395±0.030	[75]	0.3940	0.0300	0.00	0.00	-	-	-
^{59}Pr	0.294±0.020	[75]	0.2940	0.0200	0.00	0.00	-	-	-
^{60}Nd	0.335±0.018	[8]	0.3350	0.0180	0.00	0.00	-	-	-
^{62}Sm	0.207±0.031 0.467±0.044	[76] [3]	0.2932	0.0253	-2.15 3.42	0.63	0.1224	-0.68 1.34	0.12
^{63}Eu	0.30±0.03	[78]	0.3000	0.0300	0.00	0.00	-	-	-
^{64}Gd	0.317±0.016 0.338±0.012 0.217±0.019 0.275±0.040	[79] [8] [3] [81]	0.3054	0.0083	0.64 2.23 -4.26 -0.74 -0.56 -0.42	-0.52	0.0207	0.44 1.36 -3.15 -0.68 -0.55 -0.42	0.02

	0.237±0.123 0.223±0.148	[82] [82]							
65Tb	0.47±0.28 0.300±0.027 0.328±0.015 0.353±0.032	[83] [84] [8] [3]	0.3262	0.0121	0.51 -0.89 0.09 0.78	0.13	0.0097	0.51 -0.91 0.10 0.80	0.01
66Dy	0.330±0.018 0.340±0.094 0.332±0.076 0.305±0.020 0.278±0.030 0.371±0.034	[8] [85] [49] [49] [49] [3]	0.3194	0.0113	0.50 0.22 0.16 -0.63 -1.29 1.44	0.07	0.0115	0.50 0.22 0.16 -0.62 -1.29 1.44	0.01
67Ho	0.341±0.025 0.336±0.093	[8] [85]	0.3407	0.0241	0.01 -0.05	-0.02	0.0013	0.01 -0.05	0.00
68Er	0.300±0.009 0.325±0.092	[88] [85]	0.3002	0.0090	-0.02 0.27	0.12	0.0024	-0.03 0.27	0.00
70Yb	0.318±0.020 0.454±0.056	[86] [87]	0.3344	0.0188	-0.56 2.04	0.74	0.0431	-0.32 1.71	0.04
71Lu	0.335±0.095	[85]	0.3350	0.0950	0.00	0.00	-	-	-
72Hf	0.324±0.010 0.315±0.012 0.354±0.010 0.282±0.034	[55] [8] [133] [100]	0.3312	0.0060	-0.62 -0.21 1.95 -1.43	-0.33	0.0107	-0.49 -0.01 1.55 -1.38	0.01
73Ta	0.351±0.020 0.349±0.073 0.340±0.097 0.345±0.153	[55] [87] [85] [90]	0.3504	0.0188	0.02 -0.02 -0.10 -0.03	-0.03	0.0013	0.03 -0.02 -0.11 -0.04	0.00
74W	0.336±0.010 0.313±0.020 0.345±0.098 0.382±0.089 0.375±0.025	[55] [8] [85] [58] [58]	0.3368	0.0084	-0.06 -1.10 0.08 0.51 1.45	0.18	0.0084	-0.06 -1.10 0.08 0.51 1.45	0.01
75Re	0.440±0.030 0.451±0.109	[58] [58]	0.4408	0.0289	-0.02 0.09	0.04	0.0028	-0.03 0.09	0.00
77Ir	0.38±0.03 0.502±0.010	[89] [55]	0.4898	0.0095	-3.49 0.89	-1.30	0.0366	-2.32 0.32	0.04
78Pt	0.569±0.020 0.570±0.169	[55] [85]	0.5690	0.0199	0.00 0.01	0.00	0.0001	0.00 0.01	0.00
79Au	0.565±0.133 0.595±0.020 0.587±0.010 0.561±0.022 0.536±0.075 0.567±0.168	[48] [56] [55] [8] [54] [85]	0.5840	0.0082	-0.14 0.51 0.23 -0.98 -0.64 -0.10	-0.19	0.0051	-0.14 0.53 0.27 -1.02 -0.64 -0.10	0.01
80Hg	0.584±0.018	[85]	0.5840	0.0180	0.00	0.00	-	-	-
81Tl	0.603±0.074 0.584±0.050 0.599±0.018	[33] [95] [8]	0.5976	0.0165	0.07 -0.26 0.06	-0.04	0.0034	0.07 -0.27 0.08	0.00

⁸² Pb	0.672±0.086 0.665±0.010 0.595±0.031 0.665±0.100 0.612±0.182	[60] [55] [46] [54] [85]	0.6585	0.0094	-0.60 0.47 -1.96 0.06 -0.26	-0.45	0.0102	0.16 0.45 -1.95 0.06 -0.26	0.01
⁸³ Bi	0.610±0.020 0.648±0.030 0.645±0.032 0.591±0.017 0.591±0.057 0.608±0.181 0.592±0.120	[43] [30] [30] [8] [97] [85] [99]	0.6104	0.0109	-0.02 1.18 1.02 -0.96 -0.33 -0.01 -0.15	0.10	0.0091	-0.02 1.20 1.04 -1.01 -0.34 -0.01 -0.15	0.01
⁹⁰ Th	0.586±0.017	[8]	0.5860	0.0170	0.00	0.00	-	-	-
⁹³ Np	0.722±0.007 0.580±0.092	[30] [29]	0.7212	0.0070	0.08 -1.53	-0.72	0.0107	0.06 -1.52	0.01
⁹⁶ Cm	0.510±0.091	[29]	0.5100	0.0910	0.00	0.00	-	-	-

Table 6. Résumé des résultats expérimentaux $(F_1)_{Exp}$ Coster Kronig de ^{28}Ni à ^{92}Cm sont présentés en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(F_1)_W$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ε_{ISD} , ε_{ESD} , les écarts-types internes et externes (z_{ISD} , z_{ESD}) et leurs moyennes (\bar{z}_{ISD} , \bar{z}_{ESD}) sont également indiqués.

Elements	F_{1-Exp} $\pm \Delta F_{1-Exp}$	References	F_{1-W}	ε_{ISD}	z_{ISD}	\bar{z}_{ISD}	ε_{ESD}	Z_{ESD}	\bar{z}_{ESD}
^{28}Ni	0.85±0.283 0.88±0.378	[52] [53]	0.8608	0.2265	-0.03 0.04	0.01	0.0144	-0.04 0.05	0.01
^{29}Cu	0.74±0.209	[52]	0.7400	0.2090	0.00	0.00	-	-	-
^{40}Zr	0.674±0.231	[65]	0.6740	0.2310	0.00	0.00	-	-	-
^{42}Mo	0.76±0.063 0.752±0.170	[52] [54]	0.7590	0.0591	0.01 -0.04	-0.01	0.0026	0.02 -0.04	0.00
^{44}Ru	0.701±0.116 0.6807±0.0324	[66] [67]	0.6822	0.0312	0.16 -0.03	0.06	0.0053	0.16 -0.04	0.01
^{45}Rh	0.7±0.092	[68]	0.7000	0.0920	0.00	0.00	-	-	-
^{46}Pd	0.777±0.039 0.815±0.045 0.669±0.153	[59] [59] [54]	0.7889	0.0289	-0.24 0.49 -0.77	-0.18	0.0209	-0.27 0.53 -0.78	0.02
^{47}Ag	0.654±0.060 0.72±0.058 0.72	[69] [47] [47]	0.6881	0.0417	-0.47 0.45 1.76	-0.01	0.0330	-0.50 0.48 0.97	0.03
^{50}Sn	1.24±0.361 0.39±0.180 0.475±0.028 0.572±0.109	[44] [44] [70] [70]	0.4832	0.0267	2.09 -0.51 -0.21 0.79	0.54	0.0359	2.09 -0.51 -0.18 0.77	0.04
^{51}Sb	0.376±0.021 0.353±0.023 0.504±0.089	[70] [70] [70]	0.3696	0.0153	0.25 -0.60 1.49	0.38	0.0184	0.23 -0.56 1.48	0.02
^{54}Xe	0.47±0.057 0.35±0.050 0.479±0.040	[71] [72] [73]	0.4382	0.0274	0.50 -1.55 0.84	-0.07	0.0409	0.45 -1.37 0.71	0.04
^{56}Ba	0.66±0.07 0.452±0.036	[27] [74]	0.4955	0.0320	2.14 -0.90	0.62	0.0846	1.50 -0.47	0.08
^{57}La	0.57±0.036	[75]	0.5700	0.0360	0.00	0.00	-	-	-
^{59}Pr	0.415±0.022	[75]	0.4150	0.0220	0.00	0.00	-	-	-
^{60}Nd	0.494±0.021	[8]	0.4940	0.0210	0.00	0.00	-	-	-
^{62}Sm	0.37±0.042 0.636±0.048	[76] [3]	0.4853	0.0316	-2.19 2.62	0.21	0.1318	-0.83 1.07	0.13
^{63}Eu	0.53±0.104	[78]	0.5300	0.1040	0.00	0.00	-	-	-
^{64}Gd	0.489±0.034 0.453±0.024 0.5±0.016 0.419±0.030 0.323±0.046	[79] [80] [8] [3] [81]	0.4661	0.0111	0.64 -0.50 1.74 -1.47 -3.02 -0.65	-0.58	0.0194	0.59 -0.42 1.35 -1.32 -2.87 -0.64	0.02

	0.366±0.154 0.341±0.153	[82] [82]			-0.82			-0.81	
⁶⁵ Tb	0.84±0.456 0.482±0.030 0.49±0.020 0.526±0.038	[83] [84] [8] [3]	0.4941	0.0152	0.76 -0.36 -0.16 0.78	0.25	0.0107	0.76 -0.38 -0.18 0.81	0.01
⁶⁶ Dy	0.497±0.022 0.518±0.112 0.538±0.039 0.514±0.083 0.464±0.022 0.451±0.033	[8] [85] [3] [49] [49] [49]	0.4836	0.0130	0.52 0.30 1.32 0.36 -0.77 -0.92	0.14	0.0121	0.53 0.31 1.33 0.36 -0.78 -0.93	0.01
⁶⁷ Ho	0.522±0.113 0.501±0.028	[85] [8]	0.5022	0.0272	0.17 -0.03	0.07	0.0049	0.17 -0.04	0.00
⁶⁸ Er	0.42±0.013 0.448±0.102	[88] [85]	0.4204	0.0129	-0.02 0.27	0.12	0.0035	-0.03 0.27	0.00
⁷⁰ Yb	0.457±0.036 0.657±0.059	[86] [87]	0.5113	0.0307	-1.15 2.19	0.52	0.0889	-0.57 1.37	0.09
⁷¹ Lu	0.455±0.104	[85]	0.4550	0.1040	0.00	0.00	-	-	-
⁷² Hf	0.45±0.018 0.472±0.019 0.46±0.014 0.4485±0.037	[55] [8] [133] [100]	0.4595	0.0092	-0.47 0.59 0.03 -0.29	-0.03	0.0048	-0.51 0.64 0.03 -0.29	0.00
⁷³ Ta	0.55±0.058 0.443±0.025 0.49±0.082 0.454±0.105 0.468±0.188	[142] [55] [87] [85] [90]	0.4617	0.0215	1.43 -0.57 0.33 -0.07 0.03	0.23	0.0186	1.45 -0.60 0.34 -0.07 0.03	0.02
⁷⁴ W	0.427±0.018 0.471±0.024 0.613±0.004 0.457±0.105 0.496±0.092 0.469±0.025	[55] [8] [92] [85] [58] [58]	0.5974	0.0038	-9.26 -5.20 2.83 -1.34 -1.10 -5.08	-3.19	0.0216	-6.05 -3.91 0.71 -1.31 -1.07 -3.88	0.02
⁷⁵ Re	0.651±0.016 0.565±0.111 0.531±0.030	[92] [58] [58]	0.6235	0.0140	1.29 -0.52 -2.79	-0.67	0.0353	0.71 -0.50 -1.99	0.04
⁷⁶ Os	0.658±0.020	[92]	0.6580	0.0200	0.00	0.00	-	-	-
⁷⁷ Ir	0.48±0.050 0.554±0.022 0.728±0.030	[89] [55] [92]	0.5998	0.0167	-2.27 -1.66 3.73	-0.06	0.0629	-1.49 -0.69 1.84	0.06
⁷⁸ Pt	0.628±0.028 0.748±0.040 0.616±0.170	[55] [92] [85]	0.6665	0.0227	-1.07 1.77 -0.29	0.14	0.0398	-0.79 1.44 -0.29	0.04
⁷⁹ Au	0.76±0.184 0.637±0.022 0.629±0.022 0.694±0.026 0.588±0.085 0.611±0.169	[48] [56] [55] [8] [54] [85]	0.6480	0.0131	0.61 -0.43 -0.74 1.58 -0.70 -0.22	0.02	0.0132	0.61 -0.43 -0.74 1.58 -0.70 -0.22	0.01

⁸⁰ Hg	0.74±0.04 0.629±0.023	[147] [85]	0.6566	0.0199	1.87 -0.91	0.48	0.0480	1.34 -0.52	0.05
⁸¹ Tl	0.7±0.058 0.73±0.086 0.73±0.022	[95] [33] [8]	0.7264	0.0200	-0.43 0.04 0.12	-0.09	0.0069	-0.45 0.04 0.15	0.01
⁸² Pb	0.72±0.050 0.78±0.094 0.763±0.090 0.701±0.018 0.659±0.183 0.674±0.100	[46] [96] [60] [55] [85] [54]	0.7063	0.0161	0.26 0.77 0.62 -0.22 -0.32 -0.26	0.14	0.0084	0.27 0.78 0.63 -0.26 -0.32 -0.26	0.01
⁸³ Bi	0.77±0.071 0.76±0.028 0.703±0.031 0.73±0.034 0.68±0.020 0.729±0.051 0.655±0.182 0.622±0.122	[97] [43] [30] [30] [8] [98] [85] [99]	0.7116	0.0125	0.81 1.58 -0.26 0.51 -1.34 0.33 -0.31 -0.73	0.07	0.0128	0.81 1.57 -0.26 0.51 -1.33 0.33 -0.31 -0.73	0.01
⁹⁰ Th	0.657±0.020 0.717	[8] [62]	0.6570	0.0270	0.00 2.22	0.00	-	- -	-
⁹³ Np	0.65±0.13 0.65±0.103 0.8±0.073	[41] [29] [30]	0.7325	0.0541	-0.59 -0.71 0.74	-0.18	0.0528	-0.59 -0.71 0.75	0.05
⁹⁶ Cm	0.55±0.103	[29]	0.5500	0.1030	0.00	0.00	-	-	-

Table 7. Résumé des désintégrations Auger expérimentales $(a_1)_{Exp}$ de ${}_{40}\text{Zr}$ à ${}_{92}\text{U}$ présentées en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(a_1)_W$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ε_{ISD} , ε_{ESD} , les écarts-types internes et externes (Z_{ISD} , Z_{ESD}) et leurs moyennes (\bar{Z}_{ISD} , \bar{Z}_{ESD}) sont également indiqués.

Elements	$(a_1)_{Exp}$ $\pm \Delta(a_1)_{Exp}$	References	$(a_1)_W$	ε_{ISD}	Z_{ISD}	\bar{Z}_{ISD}	ε_{ESD}	Z_{ESD}	\bar{Z}_{ESD}
${}_{40}\text{Zr}$	0.318±0.231	[65]	0.3180	0.2310	0.00	0.00	-	-	-
${}_{42}\text{Mo}$	0.239±0.170	[54]	0.2390	0.1700	0.00	0.00	-	-	-
${}_{44}\text{Ru}$	0.2881±0.116 0.3086±0.0329	[66] [67]	0.3071	0.0317	-0.16 0.03	-0.06	0.0054	-0.16 0.05	0.01
${}_{46}\text{Pd}$	0.316±0.131	[54]	0.3160	0.1311	0.00	0.00	-	-	-
${}_{47}\text{Ag}$	0.270±0.08	[47]	0.2700	0.0800	0.00	0.00	-	-	-
${}_{50}\text{Sn}$	0.489±0.028 0.389±0.110 0.572±0.180	[70] [70] [44]	0.4849	0.0268	0.11 -0.85 0.48	-0.09	0.0191	0.12 -0.86 0.48	0.02
${}_{51}\text{Sb}$	0.584±0.022 0.6±0.024 0.454±0.089	[70] [70] [70]	0.5869	0.0160	-0.11 0.45 -1.47	-0.37	0.0180	-0.10 0.44 -1.46	0.02
${}_{54}\text{Xe}$	0.484±0.057 0.462±0.040	[71] [73]	0.4693	0.0327	0.22 -0.14	0.04	0.0103	0.25 -0.18	0.01
${}_{55}\text{Cs}$	0.424±0.005	[11]	0.4240	0.0050	0.00	0.00	-	-	-
${}_{56}\text{Ba}$	0.418±0.005 0.480±0.037	[11] [74]	0.4191	0.0050	-0.16 1.63	0.74	0.0082	-0.12 1.61	0.01
${}_{57}\text{La}$	0.416±0.006	[11]	0.4160	0.0060	0.00	0.00	-	-	-
${}_{58}\text{Ce}$	0.411±0.006	[11]	0.4110	0.0060	0.00	0.00	-	-	-
${}_{59}\text{Pr}$	0.414±0.007	[11]	0.4140	0.0070	0.00	0.00	-	-	-
${}_{60}\text{Nd}$	0.440±0.013 0.393±0.008	[7] [11]	0.4059	0.0068	2.32 -1.23	0.55	0.0210	1.38 -0.57	0.02
${}_{62}\text{Sm}$	0.56±0.05 0.384±0.007 0.292±0.048	[76] [11] [3]	0.3854	0.0069	3.46 -0.15 -1.93	0.46	0.0194	3.25 -0.07 -1.80	0.02
${}_{63}\text{Eu}$	0.410±0.106 0.375±0.006	[78] [11]	0.3751	0.0060	0.33 -0.01	0.16	0.0020	0.33 -0.02	0.00
${}_{64}\text{Gd}$	0.427±0.037 0.446±0.025 0.422±0.013 0.373±0.006 0.496±0.031 0.578±0.046 0.475±0.155	[79] [80] [7] [11] [3] [81] [82]	0.3910	0.0052	0.96 2.16 2.22 -2.27 3.34 4.04 0.54	1.57	0.0147	0.90 1.90 1.58 -1.13 3.06 3.87 0.54	0.01
${}_{65}\text{Tb}$	0.416±0.033 0.426±0.011 0.370±0.006 0.38±0.039	[84] [7] [11] [3]	0.3836	0.0052	0.97 3.49 -1.72 -0.09	0.66	0.0136	0.91 2.42 -0.91 -0.09	0.01
${}_{66}\text{Dy}$	0.409±0.012 0.365±0.009	[7] [11]	0.3890	0.0066	1.46 -2.14	0.55	0.0135	1.11 -1.47	0.01

	0.366±0.040 0.396±0.085 0.445±0.023 0.463±0.034	[3] [49] [49] [49]			-0.57 0.08 2.34 2.14			-0.54 0.08 2.10 2.02	
⁶⁷ Ho	0.413±0.017 0.356±0.009	[7] [11]	0.3685	0.0080	2.37 -1.04	0.67	0.0236	1.53 -0.49	0.02
⁶⁸ Er	0.387±0.005 0.463±0.015 0.364±0.010	[7] [88] [11]	0.3890	0.0043	-0.30 4.74 -2.30	0.72	0.0168	-0.11 3.29 -1.28	0.02
⁷⁰ Yb	0.417±0.037 0.347±0.010	[86] [11]	0.3518	0.0097	1.71 -0.34	0.68	0.0176	1.59 -0.24	0.02
⁷¹ Lu	0.398±0.010 0.340±0.010	[7] [11]	0.3690	0.0071	2.37 -2.37	0.00	0.0290	0.95 -0.95	0.03
⁷² Hf	0.425±0.025 0.398±0.010 0.409±0.015 0.4216±0.0547	[55] [7] [133] [100]	0.4041	0.0078	0.80 -0.48 0.29 0.32	0.23	0.0051	0.82 -0.54 0.31 0.32	0.01
⁷³ Ta	0.3±0.062 0.758±0.011 0.324±0.009 0.375±0.188	[142] [7] [11] [90]	0.4954	0.0069	-3.13 20.21 -15.10 -0.64	0.33	0.1226	-1.42 2.13 -1.39 -0.54	0.12
⁷⁴ W	0.443±0.026 0.386±0.014 0.320±0.008 0.273±0.005 0.363±0.095 0.401±0.028	[55] [7] [11] [92] [58] [58]	0.3003	0.0040	5.43 5.89 2.21 -4.28 0.66 3.56	2.24	0.0192	4.42 3.61 -0.95 -1.38 0.65 2.97	0.02
⁷⁵ Re	0.242±0.016 0.384±0.031 0.346±0.112	[92] [58] [58]	0.2730	0.0141	-1.46 3.26 0.65	0.82	0.0411	-0.70 2.15 0.61	0.04
⁷⁶ Os	0.146±0.007 0.234±0.021	[11] [92]	0.1548	0.0066	-0.91 3.60	1.34	0.0264	-0.32 2.35	0.03
⁷⁷ Ir	0.36±0.064 0.307±0.018 0.18±0.031	[89] [55] [92]	0.2797	0.0151	1.22 1.16 -2.89	-0.17	0.0403	1.06 0.62 -1.96	0.04
⁷⁸ Pt	0.242±0.014 0.102±0.005	[55] [11]	0.1178	0.0047	8.41 -2.31	3.05	0.0443	2.67 -0.35	0.04
⁷⁹ Au	0.228±0.024 0.234±0.014 0.166±0.041 0.111±0.005 0.295±0.085	[56] [55] [92] [11] [54]	0.1297	0.0046	4.02 7.08 0.88 -2.75 1.94	2.23	0.0218	3.03 4.02 0.78 -0.83 1.88	0.02
⁸⁰ Hg	0.16±0.02 0.121±0.005	[147] [11]	0.1233	0.0049	1.78 -0.33	0.73	0.0092	1.67 -0.22	0.01
⁸¹ Tl	0.07±0.02 0.23±0.062 0.164±0.004 0.127±0.007	[57] [95] [7] [11]	0.1526	0.0034	-4.07 1.25 2.16 -3.29	-0.99	0.0125	-3.50 1.22 0.87 -1.79	0.01
⁸² Pb	0.21±0.054 0.133±0.092 0.154±0.009 0.128±0.008 0.212±0.101	[148] [60] [55] [11] [54]	0.1405	0.0059	1.28 0.71 -0.08 1.25 -1.26	0.38	0.0078	1.27 0.71 -0.08 1.13 -1.13	0.01
⁸³ Bi	0.11±0.03 0.133±0.009 0.18±0.02 0.15±0.0225 0.202±0.005 0.121±0.008 0.14±0.051	[97] [43] [30] [30] [7] [11] [98]	0.1695	0.0037	-1.97 -3.76 0.52 -0.86 5.23 -5.51 -0.58	-0.99	0.0151	-1.77 -2.08 0.42 -0.72 2.05 -2.84 -0.56	0.02

^{90}Th	0.126 ± 0.007	[11]	0.1260	0.0070	0.00	0.00	-	-	-
^{92}U	0.102 ± 0.011	[11]	0.1020	0.0110	0.00	0.00	-	-	-
^{93}Np	0.01 ± 0.01 0.16 ± 0.11	[30] [29]	0,0112	0,0100	-0.09 1.35	0.63	0.0135	-0.07 1.34	0.01
^{96}Cm	0.24 ± 0.11	[29]	0.2400	0.1100	0.00	0.00	-	-	-

Table 8. Résumé des désintégrations Auger expérimentales $(a_2)_{Exp}$ de ^{40}Zr à ^{92}U présentées en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(a_2)_W$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ε_{ISD} , ε_{ESD} , les écarts-types internes et externes (z_{ISD} , z_{ESD}) et leurs moyennes (\bar{z}_{ISD} , \bar{z}_{ESD}) sont également indiqués.

Elements	$(a_2)_{Exp}$ $\pm \Delta(a_2)_{Exp}$	References	$(a_2)_W$	ε_{ISD}	z_{ISD}	\bar{z}_{ISD}	ε_{ESD}	z_{ESD}	\bar{z}_{ESD}
^{40}Zr	0.753±0.005	[65]	0.7530	0.0050	0.00	0.00	-	-	-
^{42}Mo	0.765±0.039	[54]	0.7650	0.0390	0.00	0.00	-	-	-
^{44}Ru	0.7815±0.041 0.7438±0.0311	[66] [67]	0.7576	0.0248	0.50 -0.35	0.08	0.0182	0.53 -0.38	0.02
^{46}Pd	0.825±0.005	[54]	0.8250	0.0050	0.00	0.00	-	-	-
^{47}Ag	0.75±0.04	[47]	0.7500	0.0400	0.00	0.00	-	-	-
^{50}Sn	0.812±0.008 0.779±0.027 0.770±0.050 0.929±0.005	[70] [70] [44] [44]	0.8925	0.0042	-8.92 -4.15 -2.44 5.61	-2.47	0.0322	-2.43 -2.70 -2.06 1.12	0.03
^{51}Sb	0.792±0.010 0.793±0.013 0.715±0.035	[70] [70] [70]	0.7886	0.0077	0.27 0.29 -2.05	-0.50	0.0118	0.22 0.25 -1.99	0.01
^{54}Xe	0.763±0.032	[71]	0.7630	0.0320	0.00	0.00	-	-	-
^{55}Cs	0.729±0.009	[11]	0.7290	0.0090	0.00	0.00	-	-	-
^{56}Ba	0.726±0.010 0.691±0.014	[11] [74]	0.7142	0.0081	0.92 -1.43	-0.26	0.0166	0.61 -1.07	0.02
^{57}La	0.678±0.022 0.727±0.011	[103] [11]	0.7172	0.0098	-1.63 0.66	-0.48	0.0196	-1.33 0.44	0.02
^{58}Ce	0.718±0.011	[11]	0.7180	0.0110	0.00	0.00	-	-	-
^{59}Pr	0.712±0.013	[11]	0.7120	0.0130	0.00	0.00	-	-	-
^{60}Nd	0.749±0.018 0.711±0.014	[105] [11]	0.7253	0.0111	1.12 -0.80	0.16	0.0184	0.92 -0.62	0.02
^{62}Sm	0.71±0.03 0.698±0.013 0.715±0.021	[76] [11] [3]	0.7036	0.0104	0.20 -0.34 0.49	0.12	0.0053	0.21 -0.40 0.53	0.01
^{63}Eu	0.695±0.012	[11]	0.6950	0.0120	0.00	0.00	-	-	-
^{64}Gd	0.595±0.014 0.705±0.025 0.675±0.028 0.697±0.017 0.682±0.013 0.693±0.022 0.743±0.020 0.601±0.060	[38] [138] [79] [7] [11] [3] [81] [82]	0.6725	0.0067	-4.99 1.26 0.09 1.34 0.65 0.89 3.34 -1.18	0.17	0.0179	-3.41 1.06 0.08 0.99 0.43 0.72 2.63 -1.14	0.02
^{65}Tb	0.750±0.023 0.694±0.043 0.677±0.017 0.674±0.013 0.664±0.024	[83] [84] [7] [11] [3]	0.6849	0.0086	2.65 0.21 -0.41 -0.70 -0.82	0.19	0.0134	2.45 0.20 -0.36 -0.58 -0.76	0.01

⁶⁶ Dy	0.673±0.014 0.674±0.019 0.660±0.024 0.677±0.037 0.691±0.018 0.761±0.020	[7] [11] [3] [49] [49] [49]	0.6892	0.0079	-1.01 -0.74 -1.16 -0.32 0.09 3.34	0.03	0.0144	-0.81 -0.64 -1.05 -0.31 0.08 2.91	0.01
⁶⁷ Ho	0.625±0.065 0.699±0.025 0.669±0.017 0.653±0.020 0.647±0.026	[35] [138] [7] [11] [3]	0.6652	0.0104	-0.61 1.25 0.19 -0.54 -0.65	-0.07	0.0092	-0.61 1.27 0.20 -0.56 -0.66	0.01
⁶⁸ Er	0.59±0.065 0.657±0.016 0.620±0.011 0.656±0.019	[35] [7] [88] [11]	0.6356	0.0081	-0.70 1.19 -1.14 0.99	0.08	0.109	-0.69 1.10 -1.01 0.93	0.01
⁷⁰ Yb	0.648±0.014 0.631±0.012 0.642±0.031 0.639±0.025	[113] [86] [105] [11]	0.6386	0.0083	0.58 -0.52 0.11 0.02	0.05	0.0044	0.64 -0.59 0.11 0.02	0.00
⁷¹ Lu	0.619±0.025	[11]	0.6190	0.0250	0.00	0.00	-	-	-
⁷² Hf	0.596±0.015 0.589±0.022 0.648±0.039 0.585±0.011 0.5928±0.0313	[7] [11] [55] [133] [100]	0.5915	0.0078	0.27 -0.11 1.42 -0.48 0.04	0.23	0.0062	0.28 -0.11 1.43 -0.51 0.04	0.01
⁷³ Ta	0.550±0.045 0.57±0.015 0.627±0.038 0.576±0.022 0.599±0.085	[115] [135] [55] [11] [90]	0.5759	0.0113	-0.56 -0.31 1.29 0.01 0.27	0.14	0.0087	-0.56 -0.34 1.31 0.01 0.27	0.01
⁷⁴ W	0.620±0.037 0.588±0.012 0.562±0.019 0.528±0.058 0.568±0.027	[55] [7] [11] [58] [58]	0.5802	0.00091	1.04 0.52 -0.87 -0.89 -0.43	-0.13	0.0085	1.05 0.53 -0.88 -0.89 -0.43	0.01
⁷⁵ Re	0.684±0.038 0.686±0.018	[58] [58]	0.6856	0.0163	-0.04 0.02	-0.01	0.0008	-0.04 0.02	0.00
⁷⁶ Os	0.549±0.021	[11]	0.5490	0.0210	0.00	0.00	-	-	-
⁷⁷ Ir	0.574±0.034	[55]	0.5740	0.0340	0.00	0.00	-	-	-
⁷⁸ Pt	0.543±0.022 0.547±0.033 0.546±0.018	[11] [55] [117]	0.5451	0.0128	-0.08 0.05 0.04	0.00	0.0011	-0.10 0.06 0.05	0.00
⁷⁹ Au	0.577±0.09 0.52±0.05 0.499±0.022 0.546±0.011 0.681±0.010 0.537±0.025 0.623±0.042	[61] [48] [56] [112] [7] [11] [54]	0.6014	0.0066	-0.27 -1.61 -4.46 -4.32 6.65 -2.49 0.51	-0.86	0.0295	-0.26 -1.40 -2.87 -1.76 2.56 -1.67 0.42	0.03
⁸⁰ Hg	0.530±0.036 0.520±0.025 0.46±0.04 0.494±0.014 0.507±0.009 0.506±0.009	[115] [11] [147] [64] [112] [117]	0.5049	0.0055	0.69 0.59 -1.11 -0.72 0.20 0.11	-0.04	0.0041	0.69 0.60 -1.12 -0.75 0.21 0.11	0.00
⁸¹ Tl	0.520±0.013 0.516±0.029 0.46±0.09 0.512±0.014	[7] [11] [57] [95]	0.5020	0.0058	1.26 0.47 -0.47 0.66	0.05	0.0056	1.27 0.47 -0.47 0.66	0.01

	0.492±0.012 0.492±0.010	[117] [112]			-0.75 -0.86			-0.75 -0.87	
⁸² Pb	0.511±0.028 0.487±0.010 0.501±0.030 0.473±0.022 0.487±0.010 0.346±0.044 0.504±0.026	[11] [112] [55] [46] [117] [54] [105]	0.4858	0.0061	0.88 0.10 0.49 -0.56 0.10 -3.15 0.68	-0.21	0.0087	0.86 0.09 0.49 -0.54 0.09 -3.12 0.66	0.01
⁸³ Bi	0.62±0.14 0.61±0.02 0.45±0.02 0.478±0.038 0.48±0.010 0.46±0.08 0.499±0.013 0.449±0.029	[97] [43] [120] [30] [30] [121] [7] [11]	0.4943	0,0066	0.90 5.50 -2.10 -0.42 -1.19 -0.43 0.32 -1.52	0,13	0,0166	0.89 4.46 -1.70 -0.39 -0.74 -0.42 0.22 -1.36	0,02
⁸⁶ Rn	0.436±0.027	[122]	0.4360	0.0270	0.00	0.00	-	-	-
⁸⁸ Ra	0.571±0.084 0.4±0.028 0.454±0.040 0.416±0.005	[51] [123] [122] [124]	0.4166	0.0049	1.83 -0.58 0.93 -0.09	0.52	0.0061	1.83 -0.58 0.92 -0.08	0.01
⁹⁰ Th	0.43±0.10 0.411±0.009 0.437±0.026	[125] [124] [11]	0.4139	0.0085	0.16 -0.23 0.84	0.26	0.0057	0.16 -0.27 0.87	0.01
⁹² U	0.11±0.06 0.09±0.11 0.09±0.10 0.07±0.07 0.293±0.034 0.571±0.084 0.522±0.056 0.359±0.006 0.403±0.014 0.352±0.032	[31] [31] [31] [31] [126] [51] [51] [124] [117] [11]	0.3608	0.0053	-4.16 -2.46 -2.70 -4.14 -1.97 2.50 2.87 -0.23 2.82 -0.27	-0.78	0.0153	-4.05 -2.44 -2.68 -4.06 -1.82 2.46 2.78 -0.11 2.03 -0.25	0.02
⁹³ Np	0.20±0.06 0.20±0.011 0.29±0.029	[41] [29] [30]	0.2110	0.0101	-0.18 -0.74 2.57	0.55	0.0208	-0.17 -0.47 2.21	0.02
⁹⁴ Pu	0.37±0.08 0.35±0.08 0.11±0.08 0.11±0.09 0.286±0.026 0.261±0.027 0.299±0.008	[32] [32] [31] [31] [123] [122] [124]	0.2935	0.0072	0.95 0.70 -2.28 -2.03 -0.28 -1.16 0.51	-0.51	0.0106	0.95 0.70 -2.27 -2.02 -0.27 -1.12 0.42	0.01
⁹⁶ Cm	0.23±0.09 0.298±0.028	[29] [117]	0.2920	0.0267	-0.66 0.16	-0.25	0.0193	-0.67 0.18	0.02

Table 9. Résumé des désintégrations Auger expérimentales $(a_3)_{Exp}$ de ${}_{40}\text{Zr}$ à ${}_{92}\text{U}$ présentées en fonction de leur numéro atomique cible. Les valeurs moyennes pondérées $(a_3)_W$, les références à partir desquelles les bases de données sont extraites, ε_{ISD} , ε_{ESD} , les écarts-types internes et externes (z_{ISD} , z_{ESD}) et leurs moyennes (\bar{z}_{ISD} , \bar{z}_{ESD}) sont également indiqués.

Elements	$(a_3)_{Exp}$ $\pm \Delta(a_3)_{Exp}$	References	$(a_3)_W$	ε_{ISD}	z_{ISD}	\bar{z}_{ISD}	ε_{ESD}	z_{ESD}	\bar{z}_{ESD}
${}_{40}\text{Zr}$	0.966±0.002	[65]	0.9660	0.0020	0.00	0.00	-	-	-
${}_{42}\text{Mo}$	0.968±0.001	[54]	0.9680	0.0010	0.00	0.00	-	-	-
${}_{44}\text{Ru}$	0.9541±0.002 0.9556±0.0016	[66] [67]	0.9550	0.0012	-0.39 0.29	-0.05	0.000 7	-0.43 0.33	0.00
${}_{46}\text{Pd}$	0.95±0.002	[54]	0.9500	0.0020	0.00	0.00	-	-	-
${}_{47}\text{Ag}$	0.944±0.007	[47]	0.9440	0.0070	0.00	0.00	-	-	-
${}_{50}\text{Sn}$	0.933±0.006 0.934±0.011 0.928±0.003	[70] [70] [44]	0.9293	0.0026	0.57 0.42 -0.32	0.22	0.001 6	0.60 0.42 -0.38	0.00
${}_{51}\text{Sb}$	0.919±0.008 0.924±0.009 0.923±0.012	[70] [70] [70]	0.9216	0.0054	-0.27 0.23 0.11	0.03	0.001 7	-0.31 0.27 0.12	0.00
${}_{54}\text{Xe}$	0.915±0.0085	[71]	0.9150	0.0085	0.00	0.00	-	-	-
${}_{55}\text{Cs}$	0.911±0.005	[11]	0.9110	0.0050	0.00	0.00	-	-	-
${}_{56}\text{Ba}$	0.903±0.006 0.89±0.01	[11] [74]	0.8996	0.0051	0.44 -0.85	-0.21	0.005 7	0.41 -0.83	0.01
${}_{57}\text{La}$	0.899±0.007 0.908±0.008	[11] [103]	0.9029	0.0053	-0.45 0.53	0.04	0.004 5	-0.47 0.56	0.00
${}_{58}\text{Ce}$	0.892±0.007	[11]	0.8920	0.0070	0.00	0.00	-	-	-
${}_{59}\text{Pr}$	0.886±0.007	[11]	0.8860	0.0070	0.00	0.00	-	-	-
${}_{60}\text{Nd}$	0.875±0.008 0.892±0.01	[11] [105]	0.8816	0.0062	-0.65 0.88	0.11	0.008 3	-0.58 0.80	0.01
${}_{62}\text{Sm}$	0.864±0.007 0.86±0.01 0.859±0.014	[11] [76] [3]	0.8622	0.0053	0.21 -0.19 -0.21	-0.06	0.001 5	0.26 -0.21 -0.22	0.00
${}_{63}\text{Eu}$	0.855±0.007	[11]	0.8550	0.0070	0.00	0.00	-	-	-
${}_{64}\text{Gd}$	0.813±0.006 0.839±0.019 0.817±0.015 0.842±0.017 0.846±0.008 0.842±0.016 0.841±0.003 0.841±0.007 0.841±0.003	[38] [138] [79] [7] [11] [3] [81] [82] [82]	0.8383	0.0018	-4.04 0.04 -1.41 0.22 0.94 0.23 0.76 0.37 0.76	-0.24	0.003 1	-3.76 0.04 -1.39 0.21 0.90 0.23 0.62 0.35 0.62	0.00
${}_{65}\text{Tb}$	0.812±0.016 0.831±0.017 0.837±0.007	[83] [7] [11]	0.8335	0.0056	-1.27 -0.14 0.39	-0.17	0.004 8	-1.29 -0.14 0.41	0.00

	0.839±0.016	[3]			0.32			0.33	
⁶⁶ Dy	0.830±0.012 0.825±0.011 0.827±0.017	[7] [11] [3]	0.8272	0.0073	0.20 -0.17 -0.01	0.01	0.001 6	0.23 -0.20 -0.01	0.00
⁶⁷ Ho	0.82±0.02 0.819±0.012 0.816±0.010 0.796±0.02	[138] [7] [11] [3]	0.8151	0.0068	0.23 0.28 0.07 -0.91	-0.08	0.004 1	0.24 0.31 0.08 -0.94	0.00
⁶⁸ Er	0.811±0.016 0.806±0.008 0.807±0.010	[7] [88] [11]	0.8070	0.0058	0.23 -0.10 0.00	0.04	0.001 2	0.25 -0.12 0.00	0.00
⁷⁰ Yb	0.817±0.011 0.78±0.007 0.773±0.022 0.782±0.016	[113] [86] [105] [11]	0.7886	0.0054	2.32 -0.98 -0.69 -0.39	0.06	0.009 2	1.98 -0.75 -0.66 -0.36	0.01
⁷¹ Lu	0.81±0.05 0.749±0.035 0.776±0.013	[149] [150] [11]	0.7748	0.0118	0.68 -0.70 0.07	0.02	0.008 6	0.69 -0.72 0.08	0.01
⁷² Hf	0.772±0.013 0.778±0.031 0.774±0.012 0.762±0.01 0.756±0.012 0.7549±0.0119	[150] [55] [7] [133] [11] [100]	0.7638	0.0051	0.59 0.45 0.78 -0.16 -0.60 -0.68	0.06	0.003 5	0.61 0.46 0.82 -0.17 -0.62 -0.72	0.00
⁷³ Ta	0.73±0.01 0.746±0.025 0.772±0.029 0.767±0.031 0.749±0.012 0.753±0.012	[115] [150] [135] [55] [11] [90]	0.7446	0.0060	-1.25 0.05 0.92 0.71 0.33 0.62	0.23	0.005 5	-1.28 0.05 0.93 0.71 0.33 0.63	0.01
⁷⁴ W	0.728±0.037 0.755±0.030 0.745±0.011 0.736±0.010	[150] [55] [7] [11]	0.7405	0.0071	-0.33 0.47 0.35 -0.36	0.03	0.003 4	-0.34 0.48 0.39 -0.42	0.00
⁷⁵ Re	0.716±0.043	[150]	0.7160	0.0430	0.00	0.00	-	-	-
⁷⁶ Os	0.71±0.03 0.715±0.011	[150] [11]	0.7144	0.0103	-0.14 0.04	-0.05	0.001 6	-0.15 0.05	0.00
⁷⁷ Ir	0.738±0.036 0.718±0.029	[150] [55]	0.7259	0.0226	0.29 -0.21	0.04	0.009 8	0.33 -0.26	0.01
⁷⁸ Pt	0.683±0.029 0.714±0.007 0.706±0.028 0.710±0.013	[150] [117] [55] [11]	0.7115	0.0059	-0.96 0.27 -0.19 -0.11	-0.25	0.003 6	-0.98 0.31 -0.20 -0.11	0.00
⁷⁹ Au	0.658±0.01 0.76±0.02 0.683±0.025 0.693±0.027 0.68±0.01 0.714±0.007 0.689±0.014 0.69±0.011	[61] [48] [150] [55] [56] [112] [11] [54]	0.6939	0.0041	-3.32 3.24 -0.43 -0.03 -1.29 2.47 -0.34 -0.33	0.00	0.009 1	-2.66 3.01 -0.41 -0.03 -1.03 1.75 -0.29 -0.27	0.01
⁸⁰ Hg	0.633±0.056 0.7±0.01 0.688±0.006 0.669±0.016	[150] [64] [112] [11]	0.6887	0.0049	-0.99 1.02 -0.09 -1.18	-0.31	0.005 5	-0.99 0.99 -0.08 -1.16	0.01

81Tl	0.59±0.05 0.614±0.053 0.694±0.01 0.678±0.005 0.653±0.010 0.660±0.016	[147] [150] [95] [117] [7] [11]	0.6746	0.0039	-1.69 -1.14 1.80 0.53 -2.01 -0.89	-0.57	0.006 6	-1.68 -1.14 1.62 0.41 -1.81 -0.85	0.01
82Pb	0.646±0.028 0.685±0.013 0.654±0.026 0.66±0.007 0.636±0.018 0.631±0.013	[150] [46] [55] [117] [11] [54]	0.6567	0.0051	-0.38 2.02 -0.10 0.38 -1.11 -1.84	-0.17	0.007 4	-0.37 1.89 -0.10 0.32 -1.07 -1.72	0.01
83Bi	0.60±0.05 0.64±0.004 0.638±0.015 0.655±0.018 0.660±0.018 0.680±0.020 0.673±0.020 0.67±0.02 0.68±0.034 0.630±0.010 0.630±0.015	[97] [151] [150] [43] [120] [30] [30] [121] [55] [7] [11]	0.6424	0.0032	-0.85 -0.47 -0.29 0.69 0.96 1.86 1.51 1.36 1.10 -1.18 -0.81	0.35	0.003 8	-0.85 -0.43 -0.28 0.69 0.96 1.85 1.50 1.36 1.10 -1.16 -0.80	0.00
86Rn	0.616±0.02	[122]	0.6160	0.0200	0.00	0.00	-	-	-
88Ra	0.562±0.022 0.592±0.027	[123] [122]	0.5740	0.0171	-0.43 0.56	0.07	0.014 7	-0.45 0.59	0.01
90Th	0.483±0.042 0.57±0.03 0.536±0.014	[150] [62] [11]	0.5371	0.0121	-1.24 1.02 0.06	-0.09	0.014 5	-1.22 0.99 -0.06	0.01
92U	0.5±0.040 0.516±0.029 0.602±0.006 0.56±0.03 0.482±0.013	[150] [126] [117] [62] [11]	0.5768	0.0052	-1.90 -2.06 3.17 -0.55 -6.77	-1.62	0.023 3	-1.66 -1.64 1.05 -0.44 -3.56	0.02
93Np	0.52±0.026	[30]	0.5200	0.0260	0.00	0.00	-	-	-
94Pu	0.491±0.029 0.516±0.017	[122] [123]	0.5096	0.0147	-0.57 0.28	-0.14	0.010 9	-0.60 0.32	0.01
96Cm	0.541±0.012	[117]	0.5410	0.0120	0.00	0.00	-	-	-

Abstract

This thesis presents an exhaustive compilation of data related to Coster-Kronig (C-K) and Auger (A-D) transitions of the L subshell, with 1058 experimental values extracted from 130 scientific articles published between 1955 and 2024. The dataset refers to elements from ^{28}Ni to ^{100}Fm , investigated under photon bombardment. Weighted averages and standard deviations were calculated, followed by the determination of new empirical values. A detailed analysis of transition probabilities was then performed for elements with atomic numbers ranging from 28 to 100. A regression methodology was used to model the behavior of these rates and improve the predictive capability of the model. Numerical interpolation was applied to fill in gaps in the available data. Furthermore, theoretical calculations based on the Dirac-Fock method were carried out for selected elements. Finally, the results were compared with theoretical, experimental, and empirical values reported in the literature.

Keywords: fundamental atomic parameters, Coster Kronig and Auger transition, empirical and MCDF calculation.

Résumé

Cette thèse présente une compilation exhaustive des données relatives aux transitions Coster-Kronig (C-K) et Auger (A-D) des sous-couches L, avec 1058 valeurs expérimentales extraites de 130 articles scientifiques publiés entre 1955 et 2024. L'étude couvre les probabilités de transition non radiative pour des éléments allant de du ^{28}Ni au ^{100}Fm . Les valeurs moyennes pondérées et les écarts-types ont été calculés. Ensuite, de nouvelles valeurs empiriques ont été déterminées, suivies une analyse détaillée des probabilités de transition pour des éléments dont les numéros atomiques varient entre 28 et 100. Une méthodologie de régression a été utilisée pour modéliser le comportement de ces taux et améliorer la capacité prédictive du modèle. L'interpolation numérique a été appliquée pour combler les lacunes dans les données disponibles. De plus, des calculs théoriques basés sur la méthode Dirac-Fock ont été réalisés pour certains éléments sélectionnés. Enfin, les résultats ont été comparés avec les valeurs théoriques, expérimentales et empiriques présentes dans la littérature.

Mots clés : paramètres atomiques fondamentaux, transition Coster Kronig and Auger, calcul empirique et MCDF.

ملخص

تقدم هذه الأطروحة تجميعاً شاملاً للبيانات المتعلقة بانتقالات كوستر-كرونيج (C-K) وأوجير (A-D) للمدارات الذرية من الطبقة L، حيث تم جمع 1058 قيمة تجريبية مستخلصة من 130 مقالاً علمياً نُشرت بين عامي 1955 و2024. تغطي الدراسة احتمالات الانتقال الغير اشعاعية للعناصر من ^{28}Ni إلى ^{100}Fm . تم حساب المتوسطات الموزونة والانحرافات المعيارية، ثم تم تحديد قيم وسطية جديدة. بعد ذلك، تم إجراء تحليل مفصل لاحتمالات الانتقال للعناصر التي تتراوح أرقامها الذرية بين 28 و98. تم استخدام منهجية التوفيق لنمذجة سلوك هذه القيم وتحسين القدرة التنبؤية للنموذج. كما تم تطبيق التداخل العددي لسد الفجوات في البيانات المتاحة. بالإضافة إلى ذلك، تم إجراء حسابات نظرية باستخدام طريقة ديرك-فوك لعناصر مختارة. في النهاية، تمت مقارنة النتائج مع القيم النظرية والتجريبية الموجودة في الأدبيات.

الكلمات المفتاحية: العائلات الذرية الأساسية، انتقالات كوستر كرونيج و اوجر، الحساب التجريبي، MCDF.