



République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique



Universités Des Sciences Et De La Technologie Mohamed Boudiaf Oran

Faculté : Génie Physique

Département: Physique

Option: Physique appliquée : Science Radiologie Et Imagerie

Présenté par : TAIBI Djamila

***Etude des propriétés structural et optique d'un matériau
scintillateur NaI(Tl) et son interaction avec RX
dans un intervalle : [0.001-0.1MeV]***

Rapporteur:
Assma.Saim

Les membres du jury

présidente :Mme N.Bessai

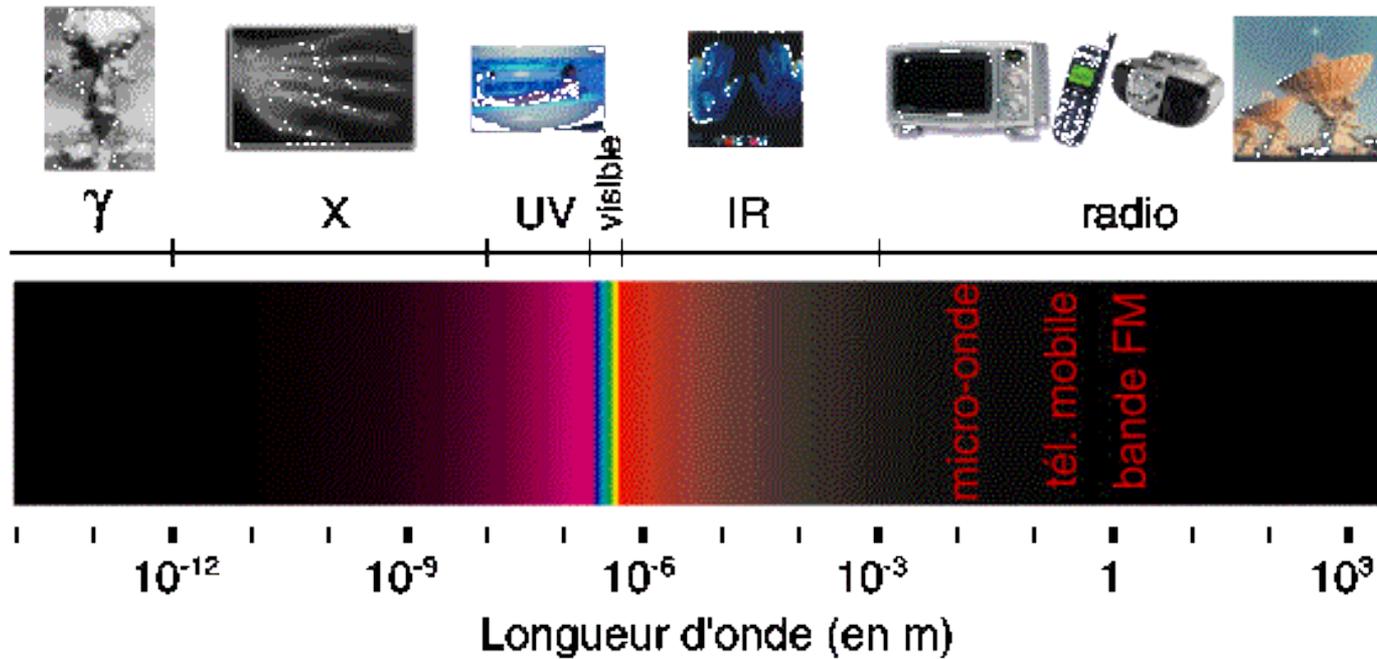
examineur: Mme S.Bahlouli

examineur: Mme S.BELARBI

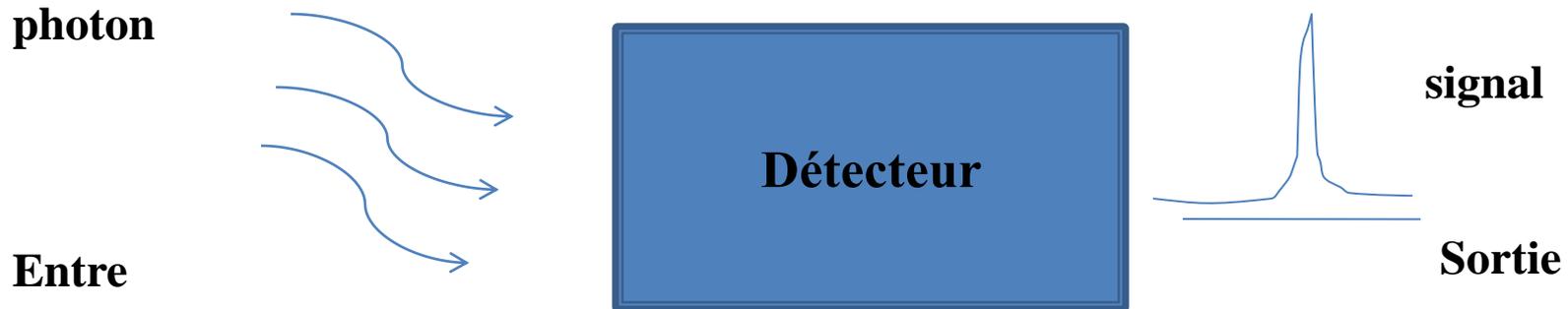
Plan De Travail

- Introduction
- Détecteur et phénomène de détection
- La théorie de la fonctionnel de la densité (DFT)
- Méthodes de calculs
- Conclusion
- Perspectives

Rayonnement électromagnétique



Détecteur de rayonnement



Interaction rayonnement matière

- effet photoélectrique
- Effet Compton
- Création de paire

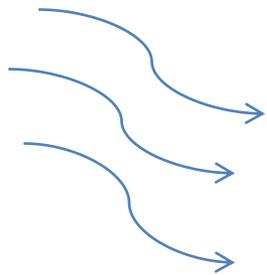
Types de détecteurs

Détecteur à gaz

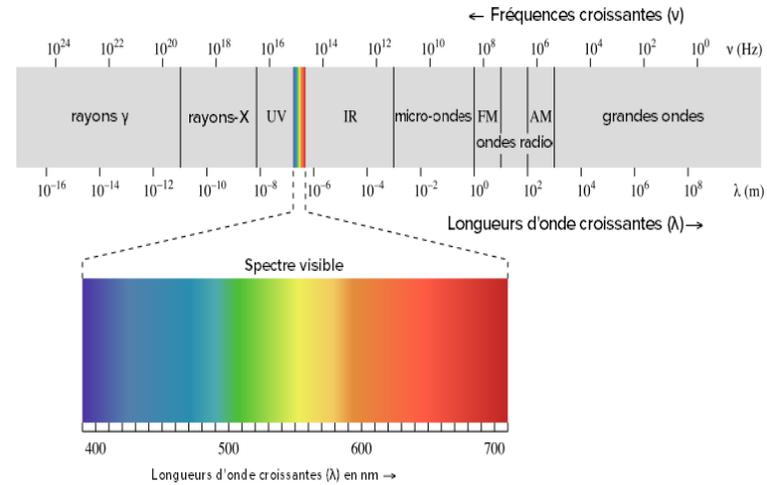
**Détecteur à semi
conducteur**

**Détecteur à
scintillation**

Détecteur à scintillation



Photon



Lumière visible

Matériaux scintillateurs

Scintillateurs

Organiques

Inorganiques

1-liquide

2-plastique

1-Intrinsèque

2-Active → NaI(Tl)



**Robert
Hofstadter [1915_1990]**

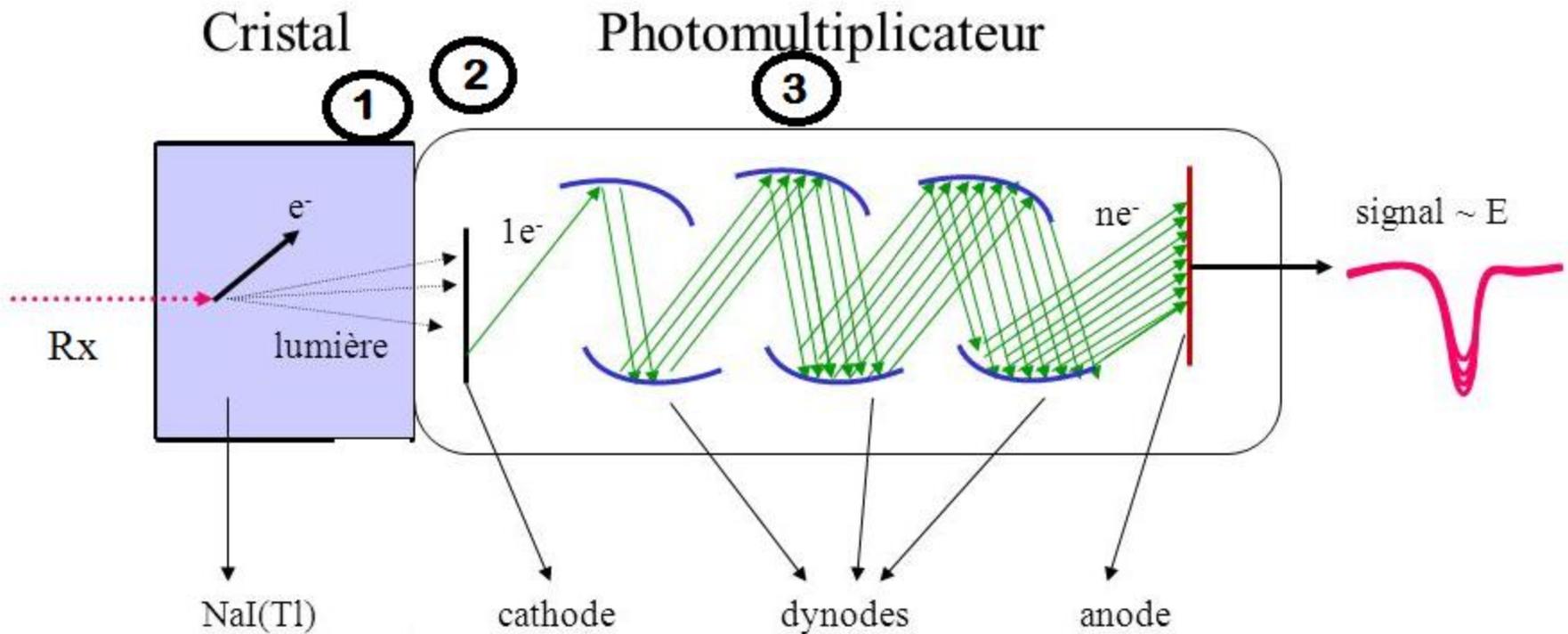


Photomultiplicateur

NaI Tl

Mécanisme de détection

détecteur à scintillations



***Domaine d'applications des détecteurs a
scintillation***

Les Applications dans l'imagerie médicale



Tomographie axiale calculée
(Computed Tomography, CT)

Radiographie X

Théorie de la fonctionnelle de la densité

$$\nearrow \mathbf{H} \psi = \mathbf{E} \psi$$

$$\mathbf{H} = T_e(\mathbf{r}) + T_N(\mathbf{R}) + V_{ee}(\mathbf{r}) + V_{eN}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + V_{NN}(\mathbf{R})$$

$$T_e(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_j \nabla_{\mathbf{r}_j}^2$$

$$T_N(\mathbf{R}) = -\frac{\hbar^2}{2M_I} \sum_I \nabla_I^2$$

$$V_{ee}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|}$$

$$V_{eN}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_{j,I} \frac{Z_I e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_I|}$$

$$V_{NN}(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} \sum_{I \neq k} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_k|}$$

Théorie de la fonctionnelle de la densité

Théorèmes d'Hohenberg -Kohn

une fonctionnel unique de la densité

énergie minimum et la densité de cet état.

- ✓ GGA: approximation du gradient généralisé
- ✓ LDA: approximation de la densité local

$$H \psi = E \psi$$



- ✓ pseudo potentiel
- ✓ FP-LAPW
- ✓ FP-LMTO

XCOM

X-Ray Form Factor, Attenuation, and Scattering Tables

Element:*

1. Hydrogen, H	▲
2. Helium, He	■
3. Lithium, Li	
4. Beryllium, Be	
5. Boron, B	▼

- OR -

Compound* formula or element symbol:

 (e.g., H₂O for water)

Type of Data: ([Database Holdings](#))

Energy Range:

- Energy Range 0.001 - 2.00 keV
 Energy Range 2.00 - 433 keV
 Sub Range - keV

ρ (g cm⁻³) (optional, only used for the linear attenuation coefficient μ):

- No frames.
 Data in HTML tables.

Get Data

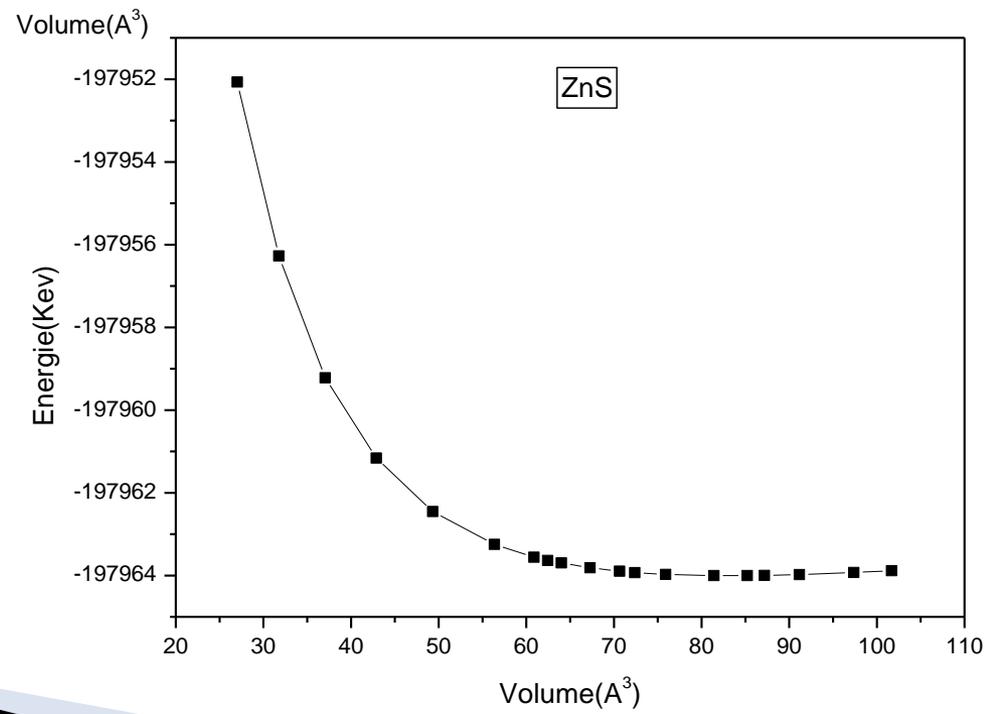
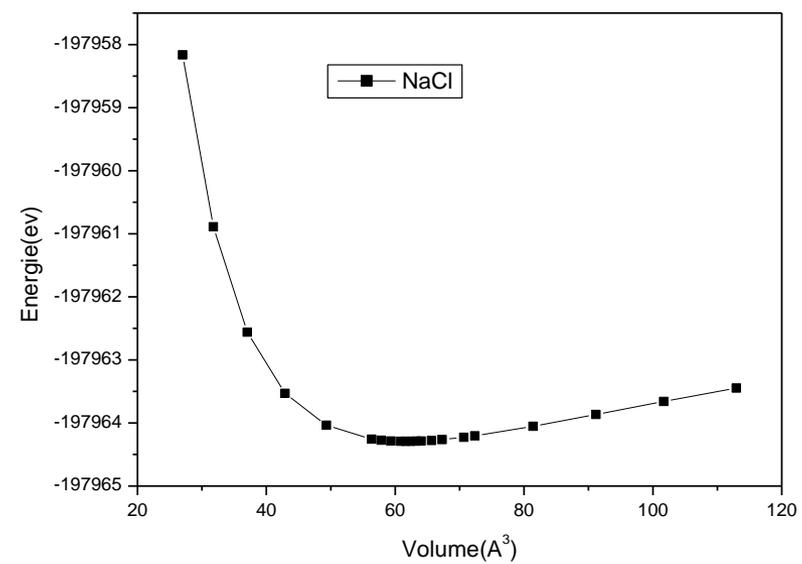
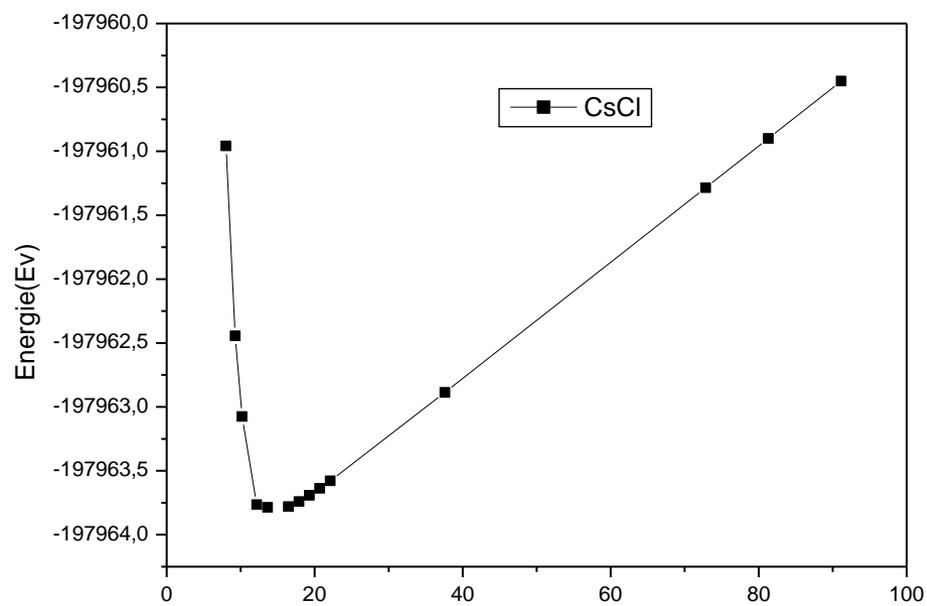
Reset

*High uncertainties at low x-ray energy (<1 keV):

See [estimated uncertainties for elements](#) in Table II of the JPCRD 2000 article.
At low energy, uncertainties may be greater for compounds than elements.

Résultats et discussions

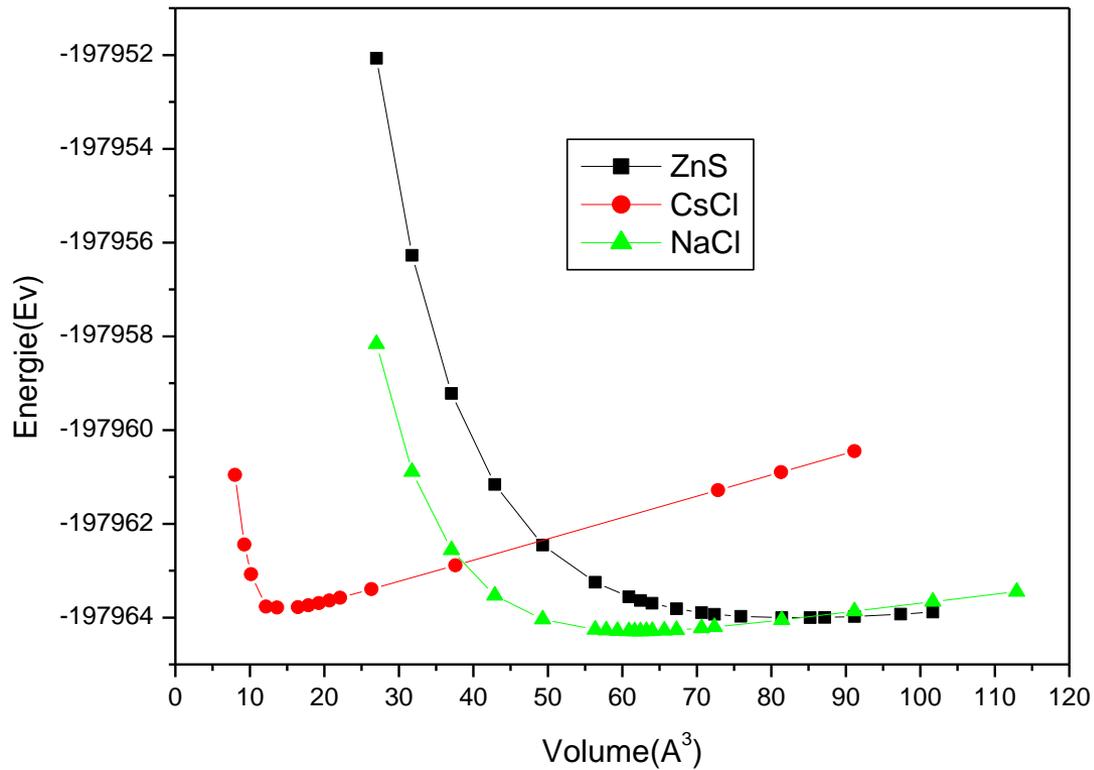
*Les propriétés structurales de
NaI*



La variation de l'énergie en fonction de volume

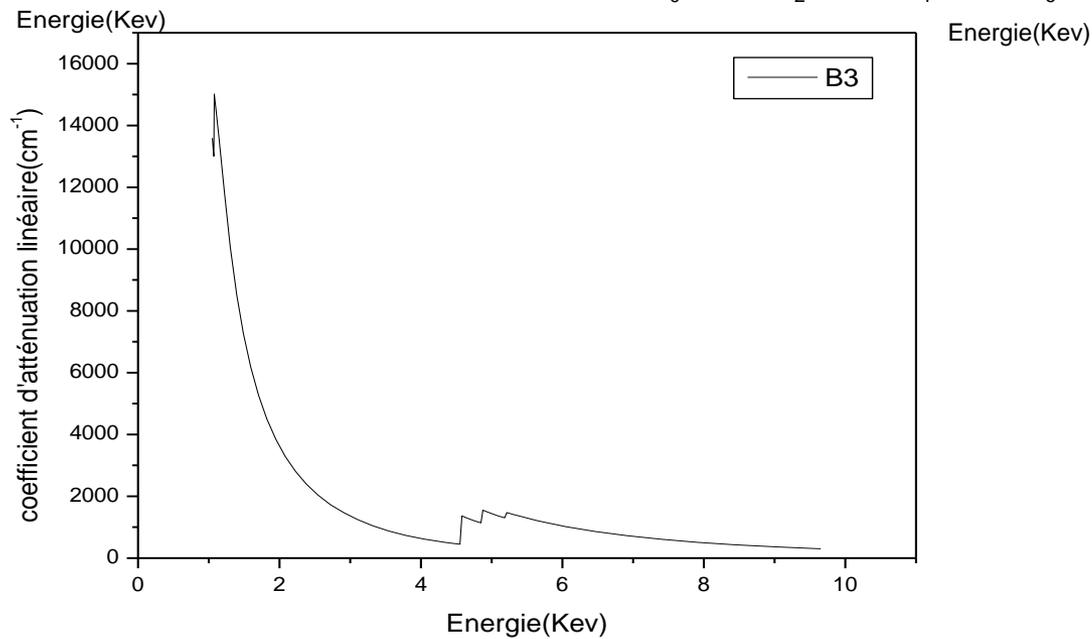
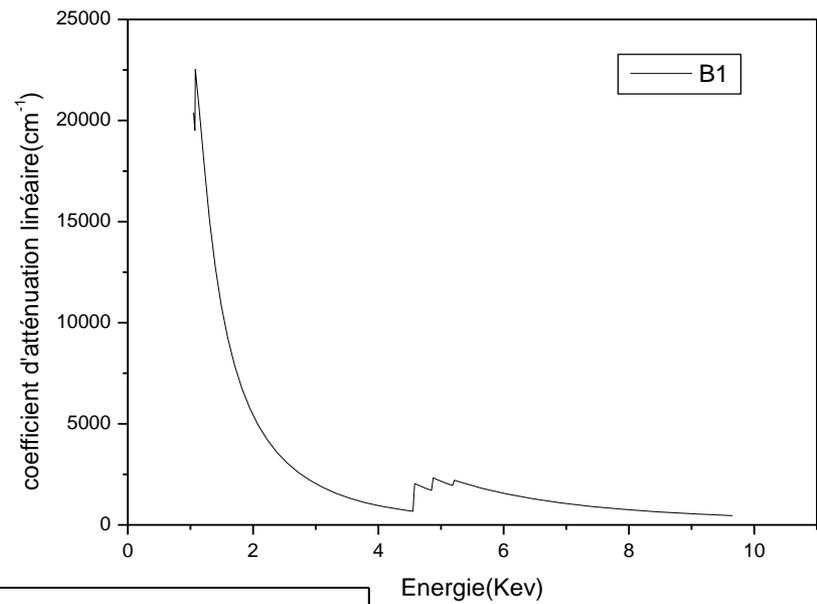
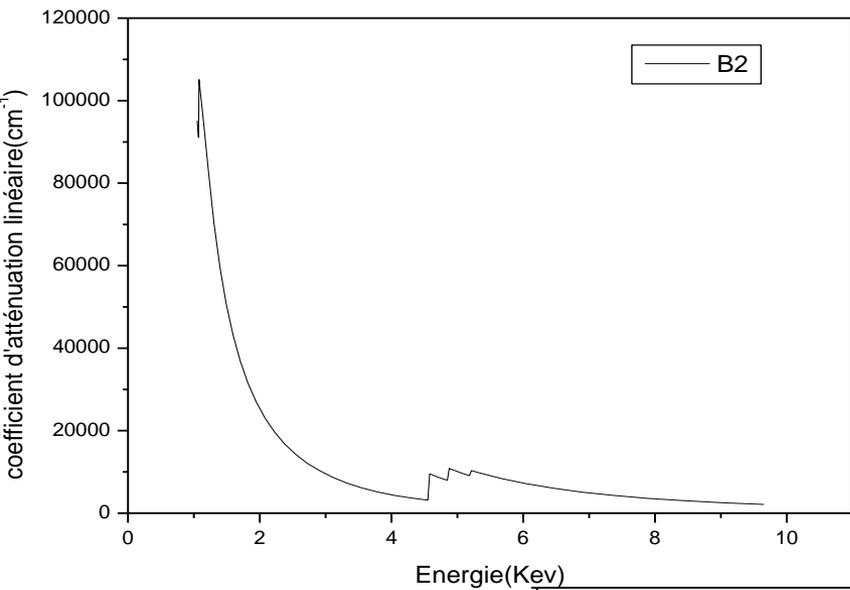
NaI	a_0 (Å)	B(GPa)	B'
NaCl	6.27	18.22	3.91522
Calcu.pres	6.52 ^a	15.62 ^a	3,970 ^a
Autre	6,48 ^f 6,47 ^d .	15.62 ^c	5.59 ^b
ZnS	6.98	19.30	3.09386
Calcu.pres			
CsCl	3,91	42.24	5.70324
Calc.pres			

Les propriétés structurales de NaI dans différentes structure cubique .



La variation de l'énergie en fonction de volume pour les phases NaCl(B1),CsCl(B2),ZnS(B3)

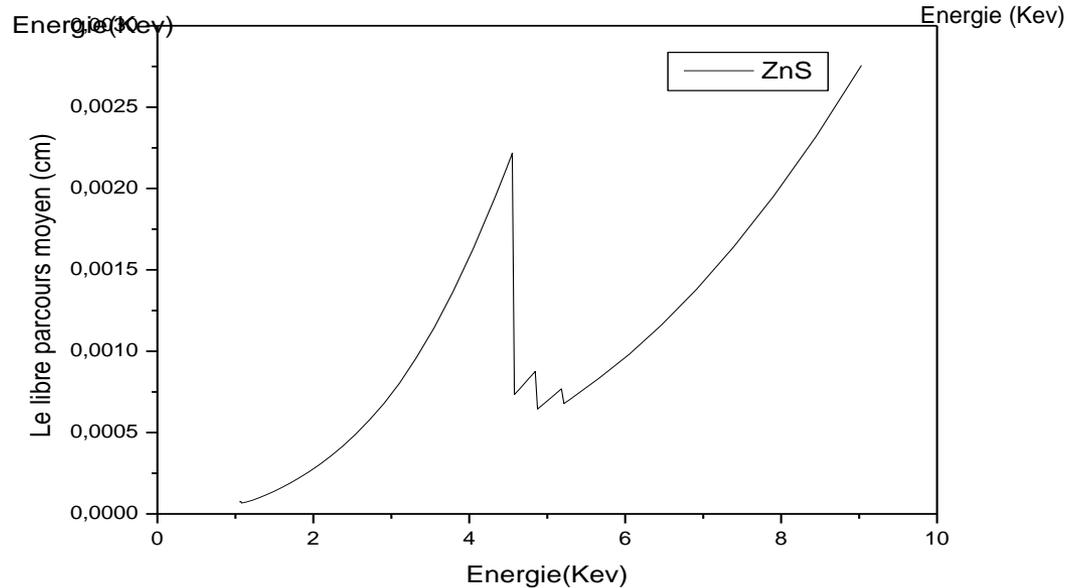
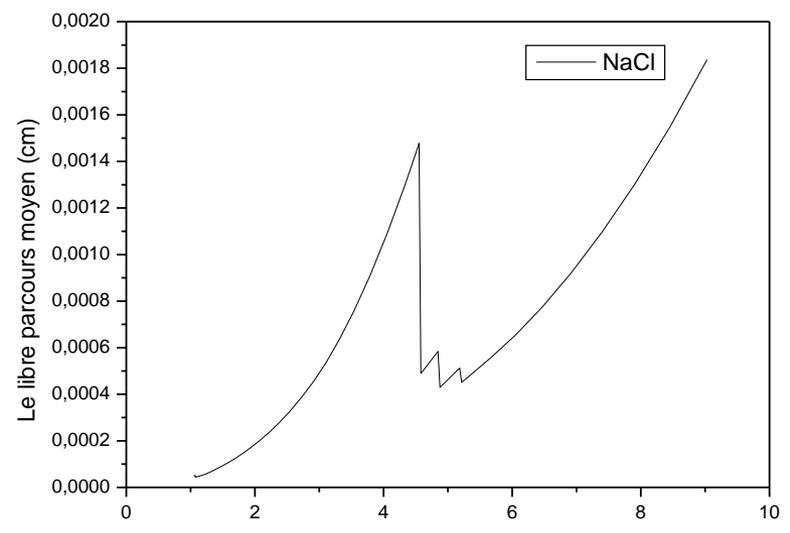
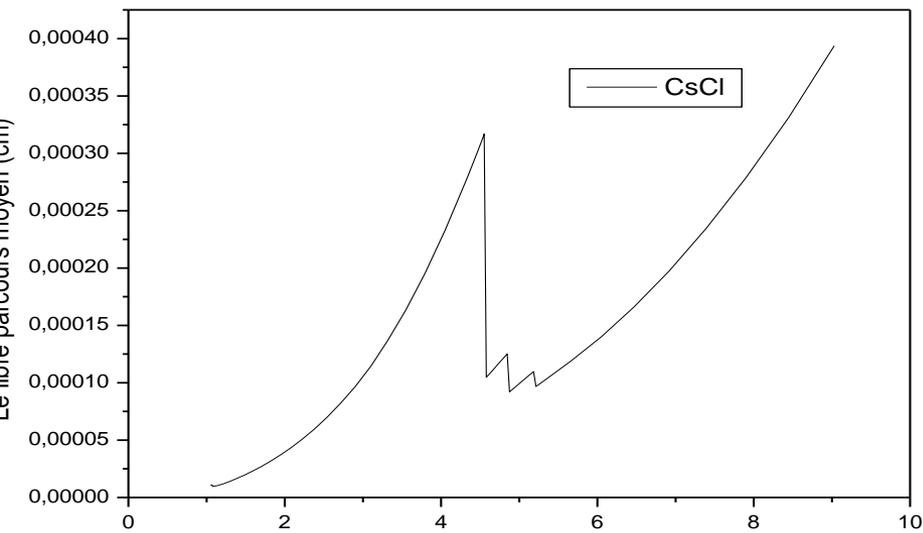
Est-ce que le comportement du détecteur scintillateur change si sa matériau change de structure sous l'effet de pression?



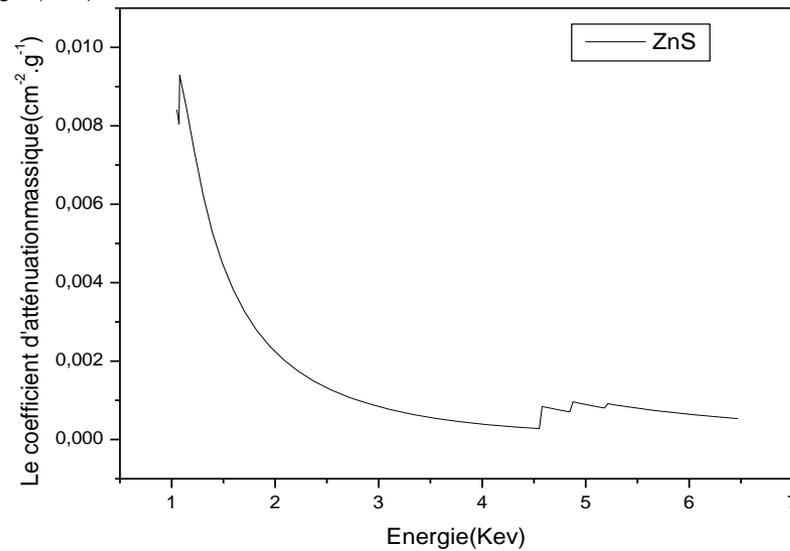
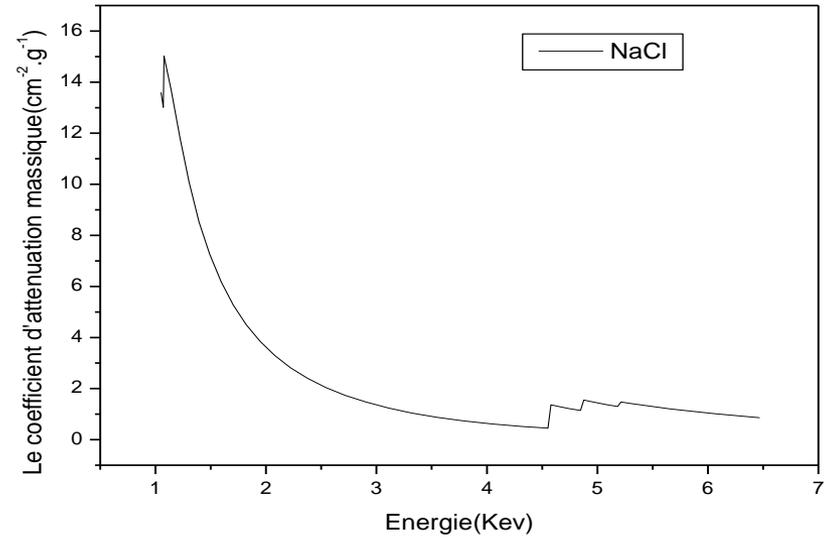
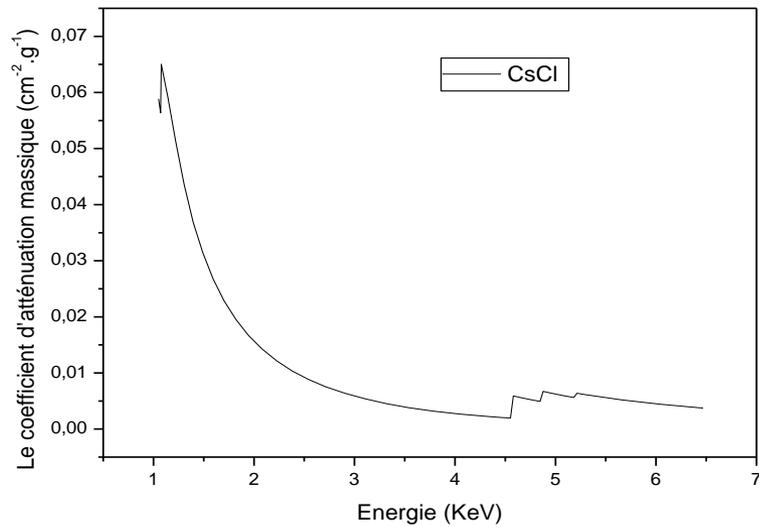
La variation de coefficient atténuation linéaire en fonction d'énergie

Couches	NaCl		CsCl		ZnS	
	E (kev)	μ_1 (cm⁻¹)	E (kev)	μ_1 (cm⁻¹)	E (kev)	μ_1 (cm⁻¹)
K(Na)	1,094	22417,18 14	1,064	104974,7	1,064	14871,42 06
LIII(I)	4,629	2014,317 8	4,6	9668,725	4,6	1369,736 1
LII(I)	4,89	2196,799	4,92	11420,55 03	4,89	1555,867 4
LI(I)	5,25	2105,558	5,22	10982,59 4	5,25	1431,779

Énergie et le coefficient d'atténuation linéaire du chaque résonance des trois structures



Le libre parcours moyen en fonction de l'énergie de rayonnement



La variation de coefficient atténuation massique en fonction d'énergie

Conclusion

- ✓ la phase B1 est la plus stable a l'état fondamentale.
- ✓ sous l'effet d'une pression ; il peut y avoir deux transitions structurales du B1 vers B3 et du B1 vers B2.
- ✓ le matériau scintillateur NaI est un bon absorbeur du rayonnement dans un intervalle d'énergie compris entre [1-6keV].
- ✓ le scintillateur NaI reste un bon détecteur de rayonnement même s'il change sa phase vers la structure B2 .

Perspectives

- ✓ Les propriétés optique: coefficient d'absorption , coefficient d'extinction , indice de réfraction
- ✓ Les propriétés électronique
- ✓ Zeff et Neff

Merci pour votre attention