



LABORATOIRE NATIONAL
HENRI BECQUEREL

Note technique LNHB/04-06

**Calcul détaillé des émissions de photons X et
d'électrons Auger qui suivent la décroissance
radioactive**

M.M. Bé, V. Chisté, C. Dulieu

09 février 2004

Calcul détaillé des émissions de photons X et d'électrons Auger qui suivent la décroissance radioactive

1. INTRODUCTION

Suite à diverses demandes émanant de différentes études :

- Étalonnage de détecteurs pour la spectrométrie X et γ ;
- Mesure d'activité de radionucléides par scintillation liquide ;
- Détermination de la dose absorbée dans des micro volumes pour les usages médicaux ;
- Et de nos besoins propres pour la vérification de la cohérence des schémas de désintégration ;

un programme de calcul a été écrit en vue d'obtenir les intensités des diverses émissions de photons X et d'électrons Auger qui suivent la désintégration radioactive. Ce, si possible pour toutes les émissions en détails, les programmes déjà existants ne donnant que des résultats par groupe, par exemple l'ensemble des électrons Auger KLL.

Le BNM-CEA/LNHB possède une base de données, gérée par l'application NUCLÉIDE (M.M. Bé *et al.*, 2002), qui contient, pour un certain nombre de radionucléides, les données caractéristiques de leur décroissances radioactives : intensités d'émissions des divers rayonnements, coefficients de conversion interne, etc. Par ailleurs, le programme EMISSION (Schönfeld *et al.*, 2000) calcule les intensités des émissions X, associées à la désintégration d'un radionucléide donné.

À partir de ces deux ensembles, le programme, dont les résultats sont décrits ici, a ajouté les tables et codes nécessaires à l'obtention des intensités des émissions des électrons Auger K et L, liées à la décroissance radioactive, ligne par ligne.

Ce document résume les méthodes de vérification entreprises :

- 1) Conservation de l'énergie ;
- 2) Comparaison avec des calculs théoriques pour l'atome libre ;
- 3) Comparaison, pour quelques radionucléides, avec des publications du domaine médical essentiellement, lieu où l'on trouve le plus de travaux sur les émissions d'électrons Auger en particulier.

La difficulté viendra du manque de travaux disponibles pouvant servir de comparaison et donc de validation des calculs effectués ici. De plus, la plupart des publications n'indiquent pas en détails quelles sont les données nucléaires et atomiques utilisées. Or, on verra que les unes et les autres influencent les résultats, diverses tentatives seront faites pour déterminer leur part respective.

2. RESSOURCES INFORMATIQUES UTILISÉES

Préambule :

Le principe de fonctionnement des deux programmes utilisés dans cette application, SAISINUC, qui fait partie de l'application NUCLÉIDE (M.M. Bé *et al.*, 2002), et EMISSION (Schönfeld *et al.*, 2000), est le suivant :

- Calcul du nombre de lacunes créées dans chaque couche électronique à partir du schéma de désintégration ;
- Calcul des intensités des diverses émissions des raies X et des électrons Auger en fonction du nombre de lacunes et des probabilités d'émissions relatives et autres données atomiques issues de publications.

1) Le programme SAISINUC permet de faire le bilan énergétique d'une désintégration radioactive et ainsi de vérifier la cohérence du schéma de désintégration.

On peut distinguer deux phases dans la dépense énergétique :

- Le processus de désintégration lui-même, qui est un phénomène nucléaire et se matérialise par l'émission de photons γ , d'électrons (β ou de conversion), de particules α , quelquefois de neutrons dans le cas d'éléments lourds. Le sous-programme calculant, en détail, le bilan énergétique nucléaire de ce processus existait déjà ; il prend en compte la création de vacances dans le cortège électronique de l'atome fils issu de la désintégration.
- Le processus de ré-arrangement des couches électroniques, qui suit le bouleversement occasionné par la désintégration, et qui est un phénomène atomique. Il se matérialise par l'émission de photons X et d'électrons Auger. Un nouveau sous-programme a été écrit afin de calculer ces diverses émissions en détail (Annexe 1).

2) Le programme EMISSION (Schönfeld *et al.*, 2000) calcule les émissions XK et XL à partir d'un fichier d'entrée décrivant les divers phénomènes qui sont à l'origine de la création de lacunes dans le cortège électronique, i.e. la capture et la conversion. Ce programme a été modifié afin de calculer les électrons Auger L en tenant compte des transitions de Coster-Krönig (version v3.10). Il est à noter que ce programme calcule les intensités des émissions X en détails mais ne fournit que les intensités totales des groupes KLL, KLX, KXY, L1, L2, L3 pour les électrons Auger. L'intensité de chaque ligne particulière, par exemple KL1M1, sera calculée par le programme SAISINUC.

3. RESSOURCES NUMÉRIQUES UTILISÉES

1) Les données nucléaires décrivant la désintégration radioactive sont issues de NUCLÉIDE (M.M. Bé *et al.* 1999). Les données nécessaires aux calculs décrits ci-dessus sont :

- P_{ec} , les probabilités totales de transitions par capture électronique ;
- $P_K, P_{L1} \dots$ les probabilités partielles de capture dans les couches K, L1, L2, L3, M ;
- P_γ , les probabilités de transition gamma ;
- $\alpha_K, \alpha_{L1}, \alpha_{L2}, \dots$ les coefficients de conversion interne dans les diverses sous-couches.

2) Les données atomiques utilisées « en standard » par les programmes EMISSION et SAISINUC sont :

	Publication	Origine
OmegaK	PTB-Ra-37, table 1	(Bambynek, 1984)
OmegaL	PTB-Ra-37, table 7	(n'intervient pas)
nKL	PTB-Ra-37, table 6	

nKL1, nKL2, nKL3	Puri <i>et al.</i> 1993	D'après Chen et Scofield (NIM)
p(KBeta)/p(KAlpha)	PTB-Ra-37, table 2	
p(KAlpha2)/p(KAlpha1)	PTB-Ra-37, table 4	(Scofield, 1974)
p(KBeta2')/p(KBeta1')	Scofield, 1974	
p(KLX)/p(KLL)	PTB-Ra-37, table 5	= $2 \times K\beta/K\alpha$
p(KXY)/p(KLL)	PTB-Ra-37, table 5	= $(K\beta/K\alpha)^2$
Omega1, Omega2, Omega3, f ₁₂ , f ₁₃ and f ₂₃	Puri <i>et al.</i> 1993	
Probabilités relatives des émissions XL	J. L. Campbell, J.-X. Wang, 1989	(interpolées depuis Scofield , incluent les effets de recouvrement et d'échanges)
Probabilités relatives des transitions Auger K, L1, L2, L3	Chen <i>et al.</i> 1979	
Énergie des raies X	Bearden <i>et al.</i> 1967	
Énergie des électrons Auger		Différence des énergies de liaison

Par la suite on verra que les données atomiques de base utilisées peuvent être sensiblement différentes d'une publication à une autre.

Ce qui amène à s'interroger sur la validité de celles qui ont été retenues dans cette application, en particulier les probabilités d'émission relatives des photons XL. Afin de tester leur solidité, elles sont comparées, ci-dessous, avec celles calculées par Madame C. Bonnelle (calculs théoriques *ab-initio* – Annexe 2), de façon totalement indépendante, pour l'atome de *bismuth*.

(NB : les valeurs de Campbell sont également issues de calculs théoriques)

Intitulé	Campbell (1989)	C. Bonnelle (A2)
p(L1-M2) /p(L1-total)	0,360 (4)	} 0,350
p(L1-M3) /p(L1-total)	0,387 (5)	
p(L1-N2) /p(L1-total)	0,0952 (10)	} 0,0924
p(L1-N3) /p(L1-total)	0,1136 (10)	
p(L1-O2,3) /p(L1-total)	0,0422 (5)	0,041
p(L1-P2,3) /p(L1-total)	0,00260 (10)	
p(L2-M1) /p(L2-total)	0,02160 (20)	0,0215
p(L2-M4) /p(L2-total)	0,778 (10)	0,7797
p(L2-N1) /p(L2-total)	0,00570 (10)	0,0056
p(L2-N4) /p(L2-total)	0,1688 (17)	0,1673
p(L2-O1) /p(L2-total)	0,00120 (10)	
p(L2-O4) /p(L2-total)	0,02440 (20)	0,0244
p(L2-P1) /p(L2-total)	0,00020 (10)	
p(L3-M1) /p(L3-total)	0,0411 (4)	0,0412
p(L3-M4) /p(L3-total)	0,0785 (8)	0,0786
p(L3-M5) /p(L3-total)	0,689 (7)	0,6908
p(L3-N1) /p(L3-total)	0,0103 (10)	0,0103
p(L3-N4,5) /p(L3-total)	0,1565 (16)	0,1547
p(L3-O1) /p(L3-total)	0,00220 (10)	
p(L3-O4,5) /p(L3-total)	0,02190 (20)	0,0217
p(L3-P1) /p(L3-total)	0,00040 (10)	

Conclusion : Les valeurs utilisées dans ce programme et celles calculées à titre de comparaison sont en excellent accord.

4. RÉSULTATS OBTENUS

L'enchaînement des deux programmes EMISSION et SAISINUC se fait automatiquement à partir de SAISINUC. Cependant, les résultats de chaque programme sont sauvegardés dans des fichiers indépendants. L'annexe 3 présente le fichier de sortie du programme EMISSION dans le cas du fer 55 se désintégrant par capture électronique vers le manganèse 55. Les résultats finaux obtenus avec le programme SAISINUC figurent dans l'annexe 4.

5. VÉRIFICATION DES RÉSULTATS OBTENUS

L'objet de tous les paragraphes suivants est d'essayer de vérifier les valeurs calculées par l'enchaînement de ces deux programmes par la suite désigné SAISINUC . Ce qui ne s'avère pas très aisé car :

- Hormis les intensités des émissions XK, il y a peu de valeurs expérimentales. Les mesures des XL ont été effectuées essentiellement pour des atomes lourds, américium 241 par exemple. Il y a peu de mesures des intensités des électrons Auger à notre connaissance ;
- Les différents programmes de calcul existants présentent, le plus souvent, des résultats par groupe : les X L γ ou les électrons Auger KLX, etc.

5.1 - Cohérence interne

Un sous-programme de SAISINUC permet de calculer, en fonction du schéma de désintégration, l'énergie résiduelle qui est disponible pour le ré-arrangement atomique. Un second sous-programme calcule le détail des différentes émissions X et électrons Auger pour les énergies et intensités d'émission et fait le bilan de l'énergie utilisée. Un exemple est donné en annexe 4 pour le fer 55.

Les différences observées entre l'énergie totale disponible calculée et l'énergie totale utilisée (qui reste toujours inférieure) pour les émissions des raies XK et XL et des électrons Auger K et L (un calcul complémentaire évalue les XM et les Auger M) sont de l'ordre de :

- 0,5% pour le fer 55
- 1% pour le technétium 99m
- 0,5 % pour le palladium 103
- 1% pour l'iode 125
- 1,8% pour le plomb 203
- 2,2% pour le thallium 204
- 16,8 % pour le plomb 210

L'accord obtenu entre la valeur de l'énergie disponible et celle dissipée est généralement bon, l'écart restant de 2 à 3 % sauf dans le cas du plomb 210.

Il est à noter que :

- Les énergies emportées par les XM et Auger M ont été calculées approximativement en évaluant le nombre de lacunes dans M et en prenant en compte une énergie moyenne ;

- Il n'est pas tenu compte des couches supérieures N, O, P, ce qui, pour les atomes lourds, a une certaine incidence ;
- Une fraction de l'énergie est perdue dans le continuum, cette fraction est faible (100 eV pour le cuivre, par exemple) relativement à l'énergie disponible lorsque les lacunes sont créées dans K (9000 eV, pour le cuivre) mais apparaît comme importante lorsque les lacunes sont créées dans L (1000 eV).
- Ce qui caractérise la désintégration du plomb 210 est le fait qu'il n'y a pas de création de lacunes dans K en raison de la faible énergie de la transition gamma. La conversion a lieu dans les couches L et suivantes.

NOTATIONS

- Dans tout ce qui suit, les premières colonnes des tableaux, notées **S**, reportent les résultats de SAISINUC.
- Toutes les énergies (**E**) sont exprimées en keV et les intensités (**I**) pour 100 désintégrations.

5.2 - Comparaison avec les calculs théoriques

Cette seconde partie a pour but de comparer les résultats de SAISINUC avec ceux obtenus par une méthode totalement indépendante.

La comparaison ne porte *que sur les données atomiques*.

Pour ce faire, on a créé un nucléide fictif qui se désintègre à 100% par capture électronique sur la couche K, le descendant étant un atome de cuivre. Les calculs effectués par SAISINUC ne font donc intervenir que les données tabulées décrites dans le paragraphe « Ressources numériques » ci-dessus.

Par ailleurs, des calculs théoriques ont été effectués par Madame C. Bonnelle avec un code de calcul MCDF (Multi-Configuration Dirac-Fock) afin de déterminer les intensités d'émissions théoriques des rayonnements X et des électrons Auger attendues à partir d'une lacune dans la couche K.

Pour 100 lacunes dans la couche K de l'atome de cuivre :

	S- E (keV)	S- I (%)	C. Bonnelle - E	C. Bonnelle - I (%)
XK Alpha 2	8,028	13,52	8,082	13,65
XK Alpha 1	8,048	26,3		26,63
XK Beta 1	8,941	5,54	8,915	5,06
Total XK		45,36		45,34
XL L3-M1	0,8113	0,0445	0,802	0,0448
XL L3-M4	0,9295	0,0804		} 0,77
XL L3-M5	0,9295	0,7	0,933	
XL L2-M1	0,8312	0,0275	0,822	0,043
XL L3-N1	0,9309	0,00124		
XL L1-M2	1,0225	0,00377		
XL L2-M4	0,9494	0,517	0,953	0,81
XL L1-M3	1,0225	0,0069		
XL L2-N1	0,9508	0,00076		

Auger K				
KM _{1,2,3} -M _{4,5}	8,84	0,048	8,876	0,057
KM ₁ -M _{2,3}	8,79	0,22	8,751	0,20
KL ₁ -M _{2,3}	7,81	1,70		1,61
KL ₁ -M ₁	7,76	1,08	7,728	0,93
KL _{2,3} -M _{2,3}	7,96	6,78	7,937	6,22
KL ₁ -L _{2,3}	6,88	11,22	6,871	12,32
KL _{2,3} -L _{2,3}	7,1	27,24	7,016	28,24
Σ KLL		42,1		43,23
Σ KLM		11,70		10,65
Σ KMM		0,812		0,78
Total Auger K		54,61		54,66
Auger L	E × I		E × I	
Σ eAL	1,167		1,161	

Les résultats qui peuvent être comparés sont en bon accord, les différences tiennent aux rapports $K\beta/K\alpha$, $K\alpha_2/K\alpha_1$ etc. La comparaison concerne essentiellement les émissions XK et électrons Auger K qui ont été calculées en détail. Pour les électrons Auger L seul le bilan énergétique total peut être comparé.

5.3 – Comparaisons avec des valeurs publiées pour quelques radionucléides

Rappel :

Les intensités des émissions X et des électrons Auger qui suivent une décroissance radioactive sont calculées à partir des données nucléaires qui caractérisent cette désintégration particulière et des données atomiques propres à l'atome fils. Par exemple, l'intensité de l'émission totale XK est :

$$I_{XK} = (\sum P_{ec} \times P_K + \sum I_g \times \alpha_K) \omega_K$$

Où :

- P_{ec} et P_K caractérisent la capture électronique dans la couche K (s'il y a lieu) ;
- I_g et α_K caractérisent la conversion électronique des transitions gamma (s'il y a lieu) ;
- et ω_K est le rendement de fluorescence de l'atome fils.

5.3.1 – Fer 55

Le fer 55 se désintègre à 100 % par capture électronique vers le niveau fondamental du manganèse 55. Cette transition est permise, on peut donc penser que les coefficients de capture dans les sous-couches électroniques utilisés par les différents auteurs sont très voisins.

La même remarque peut être faite pour le rendement de fluorescence ω_K .

La comparaison est faite avec les valeurs données par ICRP Publication 38 (ICRP, 1983), Howell (1992 – calculs par méthode de Monte Carlo) et Table of Radioactive Isotopes (TRI, 1986).

Pour SAISINUC, les données nucléaires d'entrée sont :

Pour Fe-55, $P_K = 0,8853$; $P_{L1} = 0,0978$, $P_{L2} = 0,00050$, $P_{L3} = 0$.

Les données atomiques utilisées sont celles de (Schönfeld, 2000), en particulier $\omega_K = 0,321$.

Comparaison pour les X :

	S- E (keV)	S- I (%)	ICRP - I (%)	Howell - I (%)	TRI - I (%)
XK Alpha 2	5,88765	8,45	8,36	8,74	8,2
XK Alpha 1	5,89875	16,57	16,6	15,7	16,2
XK ' Beta 1	6,512825	3,4	2,22	1,92	2,86
			1,13	1,05	
Total XK		28,42	28,31	27,41	27,26
XL L ℓ	0,5564	0,309	0,0177		0,037
XL L2-M1	0,5675	0,204			0,025
XL L1-M2	0,7204	0,00362	0,0689		0,22
XL L1-M3	0,7204	0,0068			
XL L α	0,637		0,0131		0,28
Total XL		0,524	0,1	0,33	0,56

Remarques :

- Les intensités des émissions XK, contrairement à ce que l'on pouvait penser, sont sensiblement différentes d'un auteur à l'autre, or les résultats ci-dessus ont été obtenus par calcul, ils dépendent donc fortement des données d'entrée : P_K , ω_K et des rapports $K\beta/K\alpha$, etc.
- Les intensités des lignes X L diffèrent notablement, ces valeurs dépendent des données de création de lacunes : P_{L1} , P_{L2} , P_{L3} , des constantes atomiques ω_{L1} , ω_{L2} , ω_{L3} , des rapports de probabilités relatives, etc.

Comparaison pour les électrons Auger :

Auger	S- E (keV)	S- I (%)	S- E \times I	ICRP - I (%)	E \times I	Howell - I (%)	E \times I
KLL	5,155	46,584	240,14	49,5	255	48,7	249,8
KLX	5,806	12,677	73,60	11,2	65,3	12,0	69,24
KXY	6,423	0,862	5,54	0,951	6,12	0,82	5,26
Total K		60,123		61,651		61,52	
LLX	0,091	30,2	2,75			31	1,7
LMM	0,57	138,263	78,20	139	83,9	141	78,96
LMX	0,60	1,8	1,09	6,28	4	1,94	1,16
Total L		170,26		145,28		173,94	
Auger M	0,0428	299,4	12,81	300	6,29	277	11,6

Les résultats de SAISINUC et Howell (1992 – Monte Carlo) sont en bon accord, en particulier pour les Auger L. Ces deux méthodes tiennent compte des transitions de Coster-Krönig, ce qui n'est pas le cas de ICRP38.

Remarque :

Des résultats ci-dessus et avec $P_K = I_{XK} + I_{eAK}$ et $I_{XK} = P_K \omega_K$, les valeurs de P_K et ω_K utilisées par chaque auteur peuvent être déduites :

	S- I (%)	ICRP -I (%)	Howell - I (%)
Total XK	28,42	28,31	27,41
Total Auger K	60,123	61,651	61,52
Total K	88,54	89,96	88,93
P_K	0,8854	0,8996	0,8893
ω_K	0,321	0,315	0,308
$K\beta/K\alpha$	0,1359	0,1342	0,1215

Influence respective des données nucléaires et atomiques

Dans ce schéma de désintégration il y a deux données « physiques » qui vont influencer l'intensité d'émission des XK (et donc des électrons Auger K) : P_K (coefficient de capture dans la couche K) et ω_K (rendement de fluorescence).

Le tableau précédent montre des différences notables entre les résultats de SAISINUC et Howell. Différences qui sont dues non au mode de calcul, qui est simple, mais aux données utilisées.

Les calculs suivants essaient de mettre en évidence l'influence respective de P_K et ω_K en « croisant » les données d'entrée.

	S- I (%)	Howell - I (%)	ω_K (S) et P_K (H)	P_K (S) et ω_K (H)
Total XK	28,42	27,41	28,5	27,3
Total Auger K	60,123	61,52	60,4	61,3
Total K	88,54	88,93	88,9	88,6
P_K	0,8854	0,8893	0,8893	0,8854
ω_K	0,321	0,308	0,321	0,308
$K\beta/K\alpha$	0,1359	0,1215	0,1359	0,1215

Ici la valeur de ω_K influence le plus fortement les résultats. Certes la variation relative de ω_K (4 %) est plus importante que pour P_K (0,4 %), cependant les valeurs utilisées de ω_K sont issues de Bambynek (1984) et Krause (1979) respectivement, i.e. de publications connues.

Conclusion pour le fer 55

Bien que ce schéma de désintégration soit un schéma simple, les quelques données physiques utilisées influencent fortement les résultats. Or, les raies XK du fer 55 sont très utilisées pour l'étalonnage des détecteurs X dans la gamme d'énergie inférieure à 10 keV.

5.3.2 - Iode 125

A -

Une première comparaison est faite avec les résultats de Stepanek (2000) qui réalise un calcul par Monte-Carlo comme Howell (1992).

NB : Tous ces résultats dépendent des données nucléaires de création de lacunes, i.e. P_K , P_L , α_K , α_L . Cependant, pour ce radionucléide elles sont peu controversées.

Pour les X :

X	S-I (%)	S-E x I	ICRP -I (%)	E x I	Stepanek -I (%)	E x I
K Alpha 2	39,7	1080	39,8	1080	40,3	1100
K Alpha 1	74	2033	74,1	2044	76,2	2103
K Beta 1	21,2	659	21,34	661	20,36	633
K Beta 2	4,6	146,1	4,3	136	3,96	126
L α	7,43		6,14			
L β	6,01		5,93			
L γ	0,844					
L η	0,108					
L ℓ	0,28					
Total L	14,67	57,9	12,07	47,4	16,1	62,95

Pour les électrons Auger :

Auger	S-I (%)	S-E x I	ICRP -I (%)	E x I	Stepanek -I (%)	E x I
KLL	13,2	297,6	13,2	297	12,6	285
KLX	6,0	159,1	5,97	157	5,8	153,7
KXY	0,68	20,6	0,795	24	0,55	16,7
LLX	27,2	8,9			25,7	6,6
LMM	122,8	380,8	101	311	122	366
LMX	32,89	121,85	51,7	199	33,9	123
LXY	2,18	9,4	7,33	32,1	2,24	9,6
MXY	307	178	299	209	324	123

Les résultats de SAISINUC sont en bon accord avec les valeurs de Stepanek.

B -

Pour avoir une comparaison plus fine on utilise les résultats publiés dans le rapport EDISTR (1980) qui a servi de support à ICRP38 mais détaille quelques exemples. En particulier pour l'iode 125.

Les *données nucléaires* utilisées sont quasi identiques pour EMISSION et EDISTR, les coefficients de conversion interne diffèrent légèrement.

Les *données atomiques* diffèrent quelque peu, en particulier les rapports de probabilités relatives.

Dans la liste ci-dessous, figurent :

- Dans la première colonne (en bleu), les données atomiques d'origine utilisées par EMISSION ;
- Dans la deuxième colonne (en noir), celles de EDISTR :

	EMISSION	EDISTR
OmegaK	0,875 (4)	0,875 (4)
x=p(KBeta)/p(KAlpha)	0,2266 (23)	0,2252 (23)
y=p(KAlpha2)/p(KAlpha1)	0,5370 (25)	0,5370 (25)
r=p(K'Beta2)/p(K'Beta1)	0,217 (5)	0,201 (5)
u=p(KLX)/p(KLL)	0,453 (5)	0,450 (5)
v=p(KXY)/p(KLL)	0,0513 (10)	0,0507 (10)
<OmegaL>	0,086 (4)	0,086 (4)
nKL	0,917 (4)	0,918 (4)
nKL1	0,0540 (20)	0,0540 (20)
nKL2	0,308 (4)	0,308 (4)
nKL3	0,555 (6)	0,555 (6)
Omega1	0,0410 (10)	0,0480 (10)
Omega2	0,0780 (20)	0,0740 (20)
Omega3	0,0810 (20)	0,0680 (20)
f12	0,193 (5)	0,167 (5)
f13	0,328 (7)	0,320 (7)
f23	0,172 (4)	0,159 (4)
p(L1-M2)/p(L1-total)	0,311 (4)	0,309 (4)
p(L1-M3)/p(L1-total)	0,500 (7)	0,509 (7)
p(L1-N2)/p(L1-total)	0,0662 (10)	0,0672 (10)
p(L1-N3)/p(L1-total)	0,1094 (10)	0,1150 (10)
p(L1-O2,3)/p(L1-total)	0,0138 (5)	0 (0)
p(L1-P2,3)/p(L1-total)	0 (0)	0 (0)
p(L2-M1)/p(L2-total)	0,0243 (2)	0,02770 (20)
p(L2-M4)/p(L2-total)	0,844 (10)	0,863 (10)
p(L2-N1)/p(L2-total)	0,0052 (1)	0 (0)
p(L2-N4)/p(L2-total)	0,1259 (13)	0,1096 (13)
p(L2-O1)/p(L2-total)	0,0007 (1)	0 (0)
p(L2-O4)/p(L2-total)	0 (0)	0 (0)
p(L2-P1)/p(L2-total)	0 (0)	0 (0)
p(L3-M1)/p(L3-total)	0,0316 (3)	0,0241 (3)
p(L3-M4)/p(L3-total)	0,0851 (9)	0,0834 (9)
p(L3-M5)/p(L3-total)	0,752 (8)	0,752 (8)
p(L3-N1)/p(L3-total)	0,0067 (1)	0,00570 (10)
p(L3-N4,5)/p(L3-total)	0,1230 (13)	0,1353 (13)
p(L3-O1)/p(L3-total)	0,0010 (1)	0 (0)
p(L3-O4,5)/p(L3-total)	0 (0)	0 (0)
p(L3-P1)/p(L3-total)	0 (0)	0 (0)

Le tableau suivant résume :

- En colonne 2 (bleu), les résultats de SAISINUC avec les données atomiques d'origine de EMISSION ;
- En colonne 3 (vert), les résultats de EDISTR avec les données d'origine de EDISTR ;
- En colonne 4 (noir), les résultats de SAISINUC avec les données atomiques d'origine de EDISTR.

Pour les X :

X	S- I (%)	Edistr - I (%)	S + Edistr -I (%)
K Alpha 2	39,7	39,8	39,8
K Alpha 1	74	74,1	74,1
K Beta 1	21,2	21,34	21,4
K Beta 2	4,6	4,3	4,29
L α 1	6,68	5,66	5,55
L α 2	0,755	0,63	0,615
L β 1	3,74	3,58	3,57
L β 2, 15	1,09	1,02	1,0
L β 3	0,685	0,818	0,817
L β 4	0,426	0,496	0,496
L γ 1	0,558	0,455	0,454
L γ 2	0,0907	0,108	0,108
L γ 3	0,150	0,185	0,185
L γ 4	0,0189		
L γ 5	0,0231		
L η	0,108		0,115
L ℓ	0,28		0,178
Total L	14,67	12,07	13,12

Remarques :

- Lorsque l'on utilise les mêmes données atomiques d'entrée les résultats obtenus par EDISTR et SAISINUC sont identiques (ce qui tend à démontrer que le programme SAISINUC fonctionne correctement) ;
- Les résultats, pour les XL, dépendent assez fortement des constantes atomiques.

Pour les électrons Auger :

Le rapport EDISTR (1980) n'utilise des rapports relatifs que pour les groupes. Ce sont donc les probabilités relatives théoriques calculées par Chen (1979) qui sont utilisées par SAISINUC pour les deux calculs, il est donc normal que les résultats SAISINUC (colonnes 2, bleu) et SAISINUC + EDISTR (colonne 4, noir) soient similaires.

Auger	I (%)	Edistr -I (%)	I (%)
K-L1L1	1,51	1,37	1,52
K-L1L2	1,81	2,0	1,82
K-L1L3	2,25	1,78	2,27
K-L2L2	0,233	0,41	0,235
K-L2L3	4,91	5,32	4,95
K-L3L3	2,49	2,29	2,51
K-L1X	1,72	1,92	1,72
K-L2X	1,58	1,5	1,58
K-L3X	2,70	2,54	2,69
K-XY	0,68	0,78	0,67
L1MM	11,2	9,35	11,8
L1MX	3,24	5,58	3,43
L1XY	0,21	0,78	0,23

L1-LX	17,4		17,4
Total L1 (sans CK)	14,65	15,71	15,46
L2MM	32,74	27,7	32,98
L2MX	9,27	13,5	9,32
L2XY	0,56	1,9	0,56
L2-LX	9,78		9,78
Total L2 (sans CK)	42,57	43,1	42,86
L3MM	78,88	63,6	79,2
L3MX	20,38	32,6	20,45
L3XY	1,41	4,63	1,41
Total L3	100,67	100,83	101

5.3.3 - Technétium 99m

Le technétium 99 métastable se désexcite principalement par une transition gamma de 141 keV dont la probabilité est supérieure à 99%.

Les données nucléaires utilisées pour la raie gamma principale de 141 keV, dans SAISINUC et Howell (déduites de la publication de 1992) sont :

	I _{gamma}	α_K	α_{L1}	α_{L2}	α_{L3}	α_T
SAISINUC	88,5	0,104	0,0114	0,000878	0,000567	0,119
Howell	88,9	0,09	0,0137	0,000985	0,000636	0,109

Dans le tableau suivant, les colonnes **S** indiquent les résultats de SAISINUC, les colonnes Howell les résultats de Howell telles que dans la publication de 1992, et la dernière colonne les résultats de SAISINUC si l'on combine les données nucléaires de Howell (tableau ci-dessus) et les données atomiques utilisées par SAISINUC.

	S- E (keV)	S- I (%)	Howell - E	Howell - I (%)	SAISINUC + Howell - I (%)
XK α 1	18,37	4,21	18,4	3,89	3,88
XK α 2	18,25	2,22	18,3	2,17	2,04
XK β 1	20,67	1,12	20,6	1,03	1,03
XK β 2	21,02	0,177	21	0,15	0,163
Total XK		7,72		7,24	7,12
Total XL	2,1 – 3,0	0,482	2,45	0,49	0,458
Auger KLL	15,349	1,489	15,3	1,26	1,37
Auger KLX	17,855	0,601	17,8	0,47	0,554
Auger KXY	20,23	0,061			0,0559
Total K		2,15		1,73	1,98
CK LLX	0,13	2,11	0,0429	1,93	2,2
Auger LMM	2,06	9,6	2,05	8,68	9,13

Auger LMX	2,33	1,2	2,32	1,37	1,18
Auger LXY	3,41	0,046	2,66	0,012	0,044
Auger M	0,328	105,7	0,226	110	105,9

La dernière colonne met en évidence l'influence des données nucléaires (P_{γ} , α_K) en particulier sur le total des intensités XK, le seul autre paramètre qui change alors étant ω_K . La répartition entre les diverses lignes dépend directement des données atomiques.

Il est plus difficile de comparer les résultats pour les émissions L car toutes les données atomiques liées aux sous-couches interviennent (ω_{L1}, \dots , f_{12}, \dots etc.)

Compte-tenu de toutes les inconnues intrinsèques, les résultats obtenus par le programme SAISINUC utilisant les mêmes données nucléaires que Howell sont en bon accord avec les valeurs calculées par ce dernier.

5.3.4 - Palladium 103

Ce radionucléide se désintègre par capture électronique, principalement vers le niveau à 39,7 keV du rhodium 103, la transition gamma qui suit est fortement convertie.

	S-1 (%)	ICRP - I (%)	NUDAT - I %
XK α 1	22,05	19,8	22,05
XK α 2	41,7	37,5	41,91
XK β 1	11,34	10,08	}
XK β 2	1,88	1,74	}
XL α	5,12	2,23	}
XL β	3,1	1,61	}
Auger KLL	12,47	11,3	
Auger KLX	5,162	4,65	
Auger KXY	0,535	0,58	
Total K	18,17	16,53	18,38
CK LLX	25,53		
Auger LMM	142,712	61,7	
Auger LMX	25,907	27	
Auger LXY	1,206	3,26	
Total L	169,8	91,96	167
Auger M	356	172	

La seule comparaison possible est faite avec ICRP38 : l'accord n'est pas très bon en particulier pour les XK et les Auger L. Cependant ICRP38 ne prend pas en compte les transitions de Coster-Krönig.

Une recherche sur les « bonnes pages » web permet une comparaison avec NUDAT, qui donne les valeurs calculées depuis la base de données ENSDF. Les valeurs globales sont en bon accord avec SAISINUC.

5.3.5 - Plomb 203

Le plomb 203 se désintègre par capture électronique vers des niveaux excités du thallium 203, principalement (95,2 %) vers le niveau de 279 keV. Ce radionucléide a été étudié pour disposer d'une comparaison avec un élément lourd autre que le plomb 210 (paragraphe suivant). Les résultats vont dépendre des probabilités de capture dans les couches électroniques et des coefficients de conversion interne.

Les intensités gamma et coefficients de conversion interne utilisés, pour les raies gamma principales de 279 et 401 keV, par SAISINUC et Howell (1992) sont :

(NB : dans ce cas on ne peut « remonter » aux coefficients de capture utilisés par Howell)

	Igamma (%)	α_K	α_{L1}	α_{L2}	α_{L3}
SAISINUC –279 keV	80,80	0,1640	0,0214	0,0176	0,0086
Howell – 279 keV	79,9	0,1652	0,024	0,0126	0,00576
SAISINUC - 401 keV	3,35	0,155	0,0236	0,00213	0,000171
Howell - 401 keV	3,33	0,1862	0,0236	0,00213	0,000171

Dans le tableau suivant, les colonnes **S** indiquent les résultats de SAISINUC, les colonnes Howell les résultats de Howell telles que dans la publication de 1992, et la dernière colonne les résultats de SAISINUC si l'on prend les données nucléaires de Howell (tableau ci-dessus, sauf les P_K, P_L) et les données atomiques utilisées par SAISINUC.

X	S- I (%)	ICRP – I (%)	Howell – I (%)	SAISINUC + Howell – I (%)
K Alpha 2	25,60	25,5	25,7	25,61
K Alpha 1	43,22	43,1	43	43,2
K Beta 1	14,70	14,96	14,08	14,7
K Beta 2	4,37	4,27	3,45	4,37
Total K	87,5	87,83	86,23	87,9
L α	16,3	15,8		16,3
L β	14,49	15,3		14,37
L γ	2,73	2,83		2,7
L η	0,256			0,252
L ℓ	0,847			0,845
Total L	34,6		34,2	34,4

Il y a peu de différences entre les valeurs calculées par SAISINUC à partir de ses données nucléaires originales et celles calculées à partir des données nucléaires de Howell (dernière colonne), ce qui signifie que la différence provient principalement des données atomiques.

Pour les électrons Auger :

Auger	S- I (%)	ICRP - I (%)	Howell - I (%)	SAISINUC + Howell - I (%)
KLL	2,16	1,82	2,11	2,07
KLX	1,2	1,02	1,07	1,15
KXY	0,166	0,0165	0,14	0,16
Total K	3,5	2,86	3,32	3,38
LLX	19,66		17,6	18,8
LMM	42,73	33,8	41,1	41,1
LMX	18,4	21,9	18	17,7
LXY	1,53	3,68	1,43	1,47
Total L (sans CK)	62,66	59,38	60,13	60,3
MXY	152	139	153	147
N....			2027	

L'accord entre les calculs de SAISINUC et ceux de Howell est bon dans le dernier cas où presque toutes les données nucléaires sont identiques, les données atomiques restant ce qu'elles sont pour chacun.

Bilan énergétique pour le ré-arrangement atomique

	S- E x I (keV %)	Howell - E x I (keV %)
Total X K	6549	6500
Total Auger K	209	203,8
Total X L	393	390
Total Auger L	536	533,7
Total XM	9,2	10,4
Total Auger M	298	317
Autres XK M,N,O		71,3
Total Auger N		75,2
Total Auger O		32
Total N, O		178,5
Total utilisé	7994	8051
Total disponible	8139	8137

Howell calcule les émissions X et électrons Auger impliquant les couches N et O. Le total énergétique de ces émissions est de l'ordre de 2% de l'énergie totale utilisée. Ceci permet d'estimer une part de l'énergie non prise en compte par SAISINUC, dans le cas d'un atome lourd.

5.3.6 - Plomb 210

Le Pb-210 se désintègre par émission bêta moins, essentiellement (85 %) vers le niveau excité de 46,5 keV de Bi-210 ; les 15 % restants allant vers le niveau fondamental. La transition gamma qui suit est énergétiquement trop faible pour provoquer de la conversion électronique dans la couche K du bismuth. Il n'y aura donc des émissions X et électrons Auger qu'à partir de la couche L.

Il n'y a pas de calculs détaillés disponibles pour le plomb 210 autres que ceux de l'ICRP38.

Dans le tableau ci-dessous figurent :

- Les données nucléaires utilisées par SAISINUC dans la suite, telles qu'elles sont au 25/03/2003 ;
- Les données nucléaires utilisées dans ICRP 38, telles que l'on peut les déduire de la publication.

46,5 keV	I _{gamma} (%)	α_{L1}	α_{L2}	α_{L3}	α_M	α_T
SAISINUC	4,25	12,2	1,30	0,111	3,21	19
ICRP 38	4,05	12,84	1,34	0,112	3,36	18,75

Les données nucléaires utilisées sont très voisines. On peut en déduire le nombre de lacunes créées dans les sous-couches L :

	N _L	N _{L1}	N _{L2}	N _{L3}
SAISINUC	57,8	51,8	5,52	0,470
ICRP 38	57,9	52,0	5,43	0,454

Le total des émissions XL et électrons Auger L pour SAISINUC et ICRP est donc quasiment identique.

Dans le tableau suivant, les colonnes **S** indiquent les résultats de SAISINUC, les colonnes **ICRP** les résultats de ICRP 38 telles que dans la publication.

Résultats pour les émissions X :

	S- I (%)	ICRP - I (%)
XL L ℓ	0,55	0,385
XL L α	10,3	9,31
XL L β	9,03	11,2
XL L γ	1,96	2,68
XL L η	0,074	0,0967
Total XL	21,9	23,68

Pour les électrons Auger :

Auger	S- I (%)	ICRP - I (%)
L-MM	24,2	19,2
L-MX	10,8	12,8
L-XY	0,9	2,18
L-LX	40,31	
Total Auger L	35,9	34,18
M-XY	91,1	83,3

Le rendement de fluorescence moyen des couches L utilisé par ICRP peut être déduit des totaux XL et Auger L, $\omega_L = 0,409$. Celui retenu par SAISINUC est $\omega_L = 0,391$. Les données atomiques utilisées par l'un et l'autre sont différentes, ce qui explique les écarts dans la répartition des intensités pour les diverses lignes.

Bilan énergétique total pour le ré-arrangement atomique :

	S- E x I (keV %)	ICRP - E x I (keV %)
Total X L	265	293
Total Auger L	365	336,3
Total XM	8	
Total Auger M	193	240
Total utilisé	831	869,3
Total disponible	999	1001

Le bilan énergétique fait apparaître une nette différence entre l'énergie disponible et l'énergie utilisée. Le même problème existe avec SAISINUC et ICRP. Le faible gain de ICRP est dû aux Auger M, leur apport est peut-être sous estimé dans SAISINUC. Mais cela n'explique pas l'écart constaté. Même en ajoutant les 2% estimés précédemment dans le cas du Pb-203 et dus aux couches N, O, il reste un déficit d'énergie utilisée de l'ordre de 15%.

5.4 - Comparaison avec le programme du PTB

Pour répondre aux mêmes besoins, le PTB (E. Günther, 2003) a développé un programme similaire à SAISINUC. Cependant, il se limite, pour l'instant, aux radionucléides se désintégrant par capture électronique et les résultats sont donnés en valeurs relatives pour une vacance dans K, L1 etc. Ce programme calcule l'énergie moyenne par groupe, par exemple les électrons Auger L1 ; puis l'énergie moyenne les électrons Auger L. Dans ce qui suit, on se limitera à la comparaison des émissions Auger car le calcul des émissions X est identique.

5.4.1 Atome de cuivre et atome de mercure

Pour l'atome de cuivre chacun des deux programmes calculent les intensités résultantes pour 100 vacances dans la couche K.

Pour l'atome de mercure les résultats sont rapportés à 100 désintégrations du thallium 204.

On s'intéresse à la désintégration de Tl-204 vers Hg-204. Les calculs de SAISINUC ont été faits en prenant les valeurs des probabilités de capture électronique de PTB (Günther, 2003) :

$$P_K = 0,5843, P_{L1} = 0,218 ; P_{L2} = 0,0206 ; P_{L3} = 0$$

1) Pour les électrons Auger K

La comparaison avec Table of Radioactive Isotope (TRI), telle que reportée par PTB (Günther, 2003, §4b), des intensités d'émission des électrons Auger K, montre des résultats très voisins, ci-dessous quelques lignes :

Auger	Cuivre		Mercure	
KL1L1	3,61	3,8	0,229	0,216
KL1L2	4,09	4,3	0,366	0,345
KL1M1	1,11	1,08	0,095	0,0876
KL2L3	17,1	18	0,366	0,347
KL2M3	2,1	1,98		
KL3M3	2,37	2,24	0,068	0,0625
KM1M1			0,0123	0,0088
KM1M2			0,0184	0,0129
KM1M3	0,14	0,112		

Les différences observées sont dues aux constantes atomiques utilisées, ω_K , $K\beta/K\alpha$, etc.

Comparaison de l'énergie moyenne par groupe :

Auger	Cuivre		Mercure	
	SAISINUC – E_ave (keV)	TRI – E_ave (keV)	SAISINUC – E_moy (keV)	TRI – E_moy (keV)
KLL	6,975	6,982	55,25	55,25
KLX	7,921	7,873	66,73	66,44
KXY	8,806	8,764	77,40	77,21

2) Pour les électrons Auger L

Les valeurs du PTB (Günther, 2003, §5a) sont des valeurs relatives à une vacance dans L1, L2, L3, la seule comparaison possible porte sur les énergies moyennes.

Dans ce § 5a, les lignes sont détaillées puis l'énergie moyenne est calculée par groupe.

Auger	Cuivre		Mercure	
	SAISINUC – E_moy (keV)	PTB – E_moy (keV)	SAISINUC – E_moy (keV)	PTB – E_moy (keV)
L1L2Xi	0,112	0,112	0,657	0,656

L1L3Xi	0,120	0,120	0,667	0,683
L1XiYj	0,968	0,975	9,88	9,89
L1			2,087	2,082
L2			7,890	7,899
L2LiXj			1,47	1,471
L2XiYj	0,870	0,869	9,537	9,539
L3			7,876	7,879
L3XiYj	0,838	0,850		

Les résultats sont très similaires.

Remarque :

Dans la suite des calculs, le PTB fait une moyenne de chaque groupe, ainsi pour L1, l'énergie moyenne est 0,159 keV pour le cuivre et 2,085 keV pour le mercure. Puis il calcule les lacunes dans L1, etc. pour se ramener à une intensité absolue par désintégration et fait la moyenne en énergie du groupe L, ce qui donne 0,758 keV pour le cuivre et 5,693 keV pour le mercure.

(*NDLR* : en fait il y a deux groupes distincts, les émissions dites de Coster Krönig d'énergie située vers 0,120 keV et qui sont environ 19 fois plus nombreuses que les autres Auger L1 d'énergie 0,850 keV dans le cas du cuivre. De même, pour le mercure, les émissions de Coster Krönig dont l'énergie est de l'ordre de 0,650 keV et qui sont environ 5 fois plus nombreuses que les autres Auger L1 d'énergie 9,89 keV).

6. – CONCLUSIONS :

6.1. - Validation des calculs

1) La première étape de validation des calculs effectués ici a été de les comparer à ceux obtenus dans d'autres publications. Les quelques publications à notre disposition concernent la décroissance radioactive, or la comparaison exacte s'avère difficile car les données d'entrée nucléaires et atomiques utilisées ne sont généralement pas les mêmes. Pour certaines publications, les plus détaillées, on a essayé de déduire quelques-unes des données de base et de refaire les calculs, les résultats sont en bon accord.

La comparaison des énergies moyennes pour les émissions d'électrons Auger avec les résultats du programme du PTB (version de décembre 2003) montre un excellent accord entre les deux programmes.

2) La comparaison détaillée des résultats dans le cas de l'iode 125, où l'on a pu utiliser des données atomiques identiques, permet de vérifier le bon fonctionnement du programme SAISINUC.

3) La comparaison qui a pu être faite, pour l'atome de cuivre, avec les calculs *ab-initio* de Madame C. Bonnelle montre un bon accord. Il est à noter que, aussi bien SAISINUC, que ICRP 38 et Howell (Monte-Carlo) dépendent des données atomiques tabulées. Il est donc important d'effectuer la comparaison avec une méthode totalement indépendante.

4) On note des différences appréciables sur certaines données atomiques utilisées par les différents programmes, en particulier les rapports des raies XL. Pour cette raison les données employées par EMISSION (i.e. Campbell depuis Scofield) ont été comparées à celles calculées par Madame C. Bonnelle (calculs théoriques), pour le bismuth, elles sont en bon accord.

5) La comparaison des énergies disponible et dissipée permet de vérifier la cohérence interne des calculs. On note un bon accord, excepté dans le cas où les lacunes sont créées directement dans la couche L (exemple du plomb 210). Cependant l'examen des résultats de ICRP 38 montre la même divergence, notable.

Une fraction de l'énergie est perdue dans le continuum, cette fraction est faible (100 eV pour le cuivre, par exemple) relativement à l'énergie disponible lorsque les lacunes sont créées dans K (9000 eV, pour le cuivre) mais apparaît comme importante lorsque les lacunes sont créées dans L (1000 eV). Il faudrait savoir quel est l'ordre de grandeur de cette énergie perdue dans le continuum pour des atomes lourds.

6.2. - Autres remarques

1) Les radionucléides choisis présentent des modes de décroissance simples où les données nucléaires semblent peu contestées (excepté le palladium 103). Malgré cela, les résultats obtenus et ceux des divers articles sont assez différents, de même les résultats des divers articles entre eux. Ces différences peuvent être non négligeables compte-tenu de l'usage qui est fait de certains radionucléides, par exemple le fer 55.

2) Les études les plus détaillées concernant le calcul des émissions Auger viennent du milieu médical (Howell, Stepanek, ICRP 38). Les résultats de SAISINUC sont en bon accord avec ceux de Howell, en particulier parce que les calculs tiennent compte des transitions de Coster Krönig pour les émissions L, mais pas toujours avec ICRP 38 qui fait cependant référence dans le milieu de la radioprotection.

RÉFÉRENCES

- J.A. Bearden** and A.F. Burr. *Rev. Mod. Phys.* 39 (1967) 125
- J.H. Scofield.** *Phys. Rev. A* 9 (1974) 1041
- M.H. Chen,** B. Crasemann, K. Mark. *At. Data and Nuclear Data Tables* 24,1 (1979) 13.
- M.O. Krause,** *J. Phys. Chem. Ref. Data* 8 (1979) 307
- EDISTR** – A computer program to obtain a nuclear decay data base for radiation dosimetry. L.T. Dillman. Report ORNL/TM-6689 (1980)
- ICRP Publication 38.** Radionuclide Transformations. Annals of the International Commission on Radiological Protection, vol. 11 – 13, Pergamon Press (1983)
- W. Bambynek.** X-ray and Inner shell processes in atoms, molecules and solids (X-84), Leipzig, August 20-24 (1984), paper P1.
- Table of Radioactive Isotope.** E. Browne, R.B. Firestone, Wiley Publication (1986)
- J. L. Campbell** and J.-X. Wang, *Atomic Data and Nuclear Data; Tables* 43 (1989) 281-298.
- R.W. Howell.** Radiation spectra for Auger-electron emitting radionuclides. *Medical Physics*, 9,6 (1992) 1371
- NUDAT**, l'un des avatars de ENSDF, disponible sur : <http://www.nndc.bnl.gov/nndc/nudat/>
- Puri et al.,** *X-Ray Spectrometry* 22 (1993) 358-361
- Puri et al.** *Nucl. Instrum. Meth. B* 83 (1993) 21-30
- E. Schönfeld,** H. Janssen, report PTB-Ra-37, (1995), ISBN 3-89429-624-0.
- M.M. Bé,** J. Lamé, F.Piton, F. Lagoutine, N. Coursol, J. Legrand, B. Duchemin, C. Morillon, E. Browne, V. Chechev, R. Helmer, E. Schönfeld. **NUCLÉIDE**, Table de Radionucléides sur CD-Rom, Version 1-98, (1999) CEA/DAMRI, 91191 Gif-sur-Yvette, France.
- M.M. Bé,** E.Browne, V.Chechev, N.Coursol, B.Duchemin, R.Helmer, J.Lamé, C.Morillon, F.Piton, E. Schönfeld. Table de Radionucléides, Volume 5, (1999) CEA/DAMRI, 91191 Gif-sur-Yvette, France. ISBN 2 7272 0200 8
- J.Stepanek.** *Med. Phys.* 27(7) (2000) 1544
- E. Schönfeld,** H. Janssen. Calculation of emission probabilities of X-rays and Auger electrons emitted in radioactive disintegration processes. *Applied Radiation and Isotopes* 52 (2000) 595.
- M.M. Bé,** R. Helmer, V. Chisté. The **NUCLÉIDE** database for decay data and the “International Decay Data Evaluation Project”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, Supplement 2 (August 2002) 481
- E. Günther.** PTB. Program “Atomic Data” (December, 2003)

Annexe A1

Améliorations aux calculs de conservation de l'énergie dans Saisinuc_2000

**Energy Conservation (3)
(Nuclear process)**

Par rapport à la version précédente, le calcul des incertitudes a été ajouté ainsi que le détail des L1, L2, etc. pour la conversion.

Comparaisons faites en détails avec le Pd-103, le Fe-55, le Tl-204, l'I-125.

**Energy Conservation (4 et 5)
(Atomic process)**

Pour réaliser les programmes décrits ci-après les tables suivantes ont été ajoutées dans Données.mdb :

- Intensité Chen L1, L2, L3 respectivement

Ces tables contiennent les intensités relatives de Atomic Data and Nuclear Data Tables 24,1 (1979). Ces données ont d'abord été saisies en Word puis transférées en Access (via Excel) une interpolation linéaire brutale a été effectuée pour renseigner tous les Z.

- Intensité Auger L1, L2, L3 respectivement

Ces tables contiennent les intensités relatives pour 1 vacance dans L1 (L2, L3). Elles ont été créées à partir des précédentes en appliquant la formule :

$$I_{L1-X Y} = P_{L1-X Y} / \text{somme} (P_{L1-XiYj})$$

Remarque : il est inutile de multiplier par $100 \times (1 - \omega_L)$ car ensuite ces coefficients sont divisés par le même facteur.

Avec $\text{somme} (P_{L1-XiYj}) = \text{somme des } L1-XiYj \text{ pour un } Z \text{ donné}$
(vérification ok pour Te et Mn comparé avec calculs Excel)

(Il est même inutile de faire la somme ci-dessus car :

$$(I_{L1-Xi Yj})_{\text{abs}} = \text{somme} (I_{L1-X Y})_{\text{abs}} \times P_{L1-Xi Yj} / \text{somme} (P_{L1-XiYj})$$

- Energy Auger KXY

Cette table contient les énergies des électrons Auger K calculées à partir de la table « Energie Auger » qui, en fait, contient les énergies de liaison des électrons. Le calcul est simplement :

$$E_{K-XY} = E_K - E_X - E_Y$$

(vérification pour Rh en comparant avec les spectres)

- il apparaît un problème en comparant les deux tables Intensité Auger et Energie Auger car certains champs de Intensité Auger sont renseignés alors que l'énergie de liaison correspondante n'existe pas, par exemple pour le Mn la probabilité KL1N1 existe mais il n'y a pas d'énergie N1. Cela perturbe le calcul lors de la conservation de l'énergie donc les deux tables sont « ajustées ».

Suppression de champs dans Intensité Auger pour : Ca

Ajout d'énergie de liaison dans Energie Auger pour : Sc, Ti, V, Cr, Mn,... Zn, Kr, Rb, Sr,

- Energy Auger L1, L2, L3 respectivement

Ces tables contiennent les énergies des électrons Auger L1 calculées à partir de la table « Energie Auger » qui, en fait, contient les énergies de liaison des électrons. Le calcul est simplement :

$$E_{L1-XY} = E_{L1} - E_X - E_Y$$

(vérification pour Rh en calculant avec Excel)

Dans Saisinuc, le formulaire « Calculation Energy Auger » permet de mettre à jour les 7 tables décrites ci-dessus.

Dans le formulaire « Conservation 5 », un bouton permet de sauver des tables (par défaut la table LooseEnergy qui correspond au formulaire 5) en format .txt. (Pour le formulaire 3 : Vérif LAMé tbl tempo 3).

Toutes les modifications et ajouts sont dans le module "Fonctions de vérifications"

Le programme EMISSION (PTB) a été modifié (version du 05/02/03) pour inclure dans le calcul des intensités des électrons Auger L1, L2, L3 les transitions de Coster Kronig.

Première partie : calcul de l'énergie disponible (4)

I- Dans le cas de la capture seulement, i.e. IDENT GAUCHE présent et table Transition Capture Electronique (TCE) non vide

Pour les K

Wording : Elk(capt)

Energy : table Energie Auger .[K] pour le fils

P : table TCE. [Intensité] × TCE.[Pk]

E × P : idem

Uc : calcul fonction incertitudePr sur TCE.[Intensite], TCE.[Intensite erreur] et TCE.[Pk]

TCE.[Pk erreur]

Pour les L (L1, L2, L3)

Ce calcul n'est valide que si PL1, PL2, PL3 existent, sinon prendre TCE.[PL] et calcul idem à K.

Wording : ELL1(capt), (L2, L3 respectivement)

Puis calcul idem à K avec TCE2.[PL1] (PL2, PL3 respectivement)

Uc : IncertitudePr (TCE.[Intensite], TCE.[Intensite erreur] et TCE2.[PL1] TCE.[PL1 erreur])

Pour M

Idem K

Pour N

Idem K

Appliquer partout les fonctions d'arrondis

Afficher la somme partielle = Q1

(vérification en comparant avec le calcul fait en Excel pour Pd-103)

II - Pour tous les cas

IDENT GAUCHE ou CENTRE ou ALPHA ou DROIT

(calculs en partie idem au cas (3))

pour K

Wording : Elk(conv)

Energy : table Energie Auger .[K] pour le fils

P : TTEG.[Emssion intensité] × TTEG.[Ak]

E × P : idem

Uc : calcul fonction incertitudePr sur TTEG.[Emssion Intensite], TTEG.[Emssion Intensite erreur] et TTEG.[Ak] TTEG.[Ak erreur]

Pour les L (L1, L2, L3)

Wording : ELL1(conv), (L2, L3 respectivement)

Puis calcul idem à K avec TTEG2.[Al1] (AL2, AL3 respectivement)

Uc : calcul fonction incertitudePr sur TTEG.[Emssion Intensite], TTEG.[Emssion Intensite erreur] et TTEG2.[Al1] TTEG.[Al1 erreur]

Appliquer partout les fonctions d'arrondis

Afficher la somme partielle.

Pour M

Idem L (détails)

Pour N

Idem K

Appliquer partout les fonctions d'arrondis

Afficher la somme partielle = Q2

A ce point, calculer la somme totale, → $Q = Q1 + Q2$

Uc sur la somme → $Q(Uc)$

(Vérification de cette 1^{ère} partie ok cas Pd-103, comparaison avec le calcul Excel)

Deuxième partie : calcul de l'énergie dissipée

Prévoir des « boutons » pour sortir les résultats dans un fichier ASCII avec séparateurs (;).
Formulaire externe pour cela : "Exportation Table"

I- Calcul des XK

Tous les champs (Energie Ka2 , Intensité absolue Ka2, etc.) sont dans les tables Photons X

Formulaire identique

Kα2 Energy P Uc(P) E × P Uc(E × P) Sum
Etc.

Uc (E × P) : Photons X.[Intensite absolue erreur Ka2]

Sommes partielles

(vérification avec calculs Excel, cas du Pd-103)

II- Calcul des électrons Auger K

Cette partie sera aussi utilisée pour le tracé des spectres Auger K.

1) calcul des énergies

à partir de la table Energie Auger (recherche sur le fils i.e. IDENT GAUCHE ou CENTRE ou ALPHA ou DROIT)

$$E(K-Li Lj) = EK - ELi - ELj - 0,70 (EL3+ - EL3)$$

Avec EK, ELi, EL3 : énergies de liaison de l'élément considéré et EL3+ l'énergie de liaison à Z+1.) ce calcul est en commentaires.

Ce calcul approché a été fait pour tenir compte de la différence des énergies de liaison de l'atome excité et de l'atome dans son état fondamental. Cette formule a été établie par comparaison avec les tables de Schönfeld (i.e. Larkins).

$$E(K-Li X) = EK - ELi - EM3 - 0,75(EM3+ - EM3)$$

$$E(K- X Y) = EK - 2(EM3) - 0,75(EM3+ - EM3) \text{ (dans TRI)}$$

Créer une table Energie Auger KXY, de même structure que Intensité Auger, pour éviter de calculer à chaque fois (i.e. autant de champs que de colonnes déjà existantes).

$$Uc (\text{energie Auger K}) = 1 \%$$

2) Calcul des intensités (pour 100 désintégrations)

A la place des valeurs issues des tables, l'intensité est calculée par :

$$(I = I_{KLLabs} * I_{KLLrela} / (\text{somme proba relatives}))$$

$$K-Li L_j = \text{PhotonsX2.[X2]} \times \text{Intensité Auger.[K- Li Lj]} / (\text{somme des K- Li Lj de [Intensité Auger]})$$

Uc sur le ratio = 3%

$$Uc(K- Li L_j) = \text{IncertitudePr} (\text{PhotonsX2.[Uc X2]}, 3\% \text{ Intensité Auger.[K- Li Lj]} / (\text{somme des K- Li Lj de [Intensité Auger]})$$

$$Uc (E \times P) = \text{IncertitudePr} (\text{Energie, 1\%, K-Li Lj, Uc(K- Li Lj)})$$

Idem pour K-Li X_j et K-Xi Y_j avec PhotonsX2.[X3] et PhotonsX2.[X4] respectivement.

Pour les tables Intensité Auger et Energie Auger la clé est le Z du fils

Formulaire et état identiques aux précédents. Affichage sous-total partiel

(Vérification en calculant quelques cas « à la main » et en vérifiant les sous-totaux avec ceux issus de Schönfeld)

III- Calcul des XL

Tous les champs intensités (P) sont dans la table Photons X2

Formulaire identique

Li - X _j	Energy	P	Uc(P)	E × P	Uc(E × P)	Sum
Etc.						

Champs : L3-M1, UC L3-M1 etc. pour les intensités (P)

Pour les énergies : table Energie Auger.[Li] -[X_j] pour le fils

$$Uc (E \times P) = Uc (P)$$

Sommes partielles

(vérification avec calculs Excel, cas du Pd-103)

IV- Calcul des électrons Auger L

Cette partie sera aussi utilisée pour le tracé des spectres Auger L.

1) Calculer les énergies

à partir de la table Energie Auger (recherche sur le fils i.e. IDENT GAUCHE ou CENTRE ou ALPHA ou DROIT)

$$E(Li- L_j L_k) = E_{Li} - E_{L_j} - E_{L_k} \quad \text{Calcul actuel}$$

$$[E(L1-Li X_j) = E_{L1} - E_{Li} - E_{X_j}$$

$$E(Li-M_j X_g) = E_{Li} - E_{M_j} - E_{X_g+}$$

$$E(Li- X_g Y) = E_{Li} - E_{X_g} - E_{Y+}$$

Avec, E_{Li}, E_{M_j}, E_{X_g} : énergies de liaison de l'élément considéré et E_{X_g+} l'énergie de liaison de la même couche à Z+1.

Et :

$$E(Li- MjMk) = E_{Mi} - E_{Mj} - E_{Mk} - \Delta E_{jk}$$

Avec :

$$\Delta E_{jk} = (EM_{5+} - EM_5) \times [0,69 + 0,85(71 - Z)/35] \quad \text{si } 36 < Z < 71$$

$$\Delta E_{jk} = (EM_{5+} - EM_5) \times 0,69 \quad \text{si } Z \geq 71$$

$$\Delta E_{jk} = 0 \quad \text{si } Z \leq 36] \quad \text{pour l'instant ce calcul est en commentaire}$$

Création des tables Energie Auger L1 (L2, L3 respectivement) de même structure que Intensité Auger L1 (L2, L3).

$$U_c (\text{Energie Li- LjXg}) = 1\%$$

2) Calcul des intensités (pour 100 désintégrations)

A la place des valeurs issues des tables, l'intensité est calculée par :

Pour les Coster Kronig :

$$L1-Li Lj = \text{PhotonsX.}[\text{Energie erreur La2}] \times \text{Intensité Auger L.}[L1- Li Lj]$$

$$(\text{Intensité Auger L.}[L1- Li Lj] = \text{Intensité Auger Chen.}[L1- Li Lj] / (\text{somme des L1- Li Lj de } [\text{Intensité Auger Chen L}]))$$

et :

$$L1-Xi Yj = \text{PhotonsX.}[\text{Energie erreur La2}] \times \text{Intensité Auger L.}[L1- Xi Yj]$$

$$(\text{Intensité Auger L.}[L1- Xi Yj] = \text{Intensité Auger Chen.}[L1- Xi Yj] / (\text{somme des L1- Xi Yj de } [\text{Intensité Auger Chen L}]))$$

Pour les tables Intensité Auger L et Energie Auger la clé est le Z du fils

Calcul des incertitudes fonction IncertitudeR

$$U_c \text{ ratio} = 5\%$$

$$U_c (\text{intensité L1- Li Lj}) = \text{Incertitude (PhotonsX.}[\text{Energie erreur La2}], [\text{Energie erreur La1}], \text{ratio}, 5\% \text{ ratio)}$$

Idem pour L2 et L3

$$\text{Avec } I(L2) = \text{PhotonsX.}[\text{Intensité absolue La1}] \text{ et } U_c = \text{PhotonsX.}[\text{Intensité absolue erreur La1}]$$

$$\text{Et } I(L3) = \text{Electrons Auger.}[\text{Somme}] \text{ et } U_c = \text{Electrons Auger.}[\text{Somme erreur}]$$

Champs permanents pour les sommes partielles

Formulaire et état identiques aux précédent

(Vérification en calculant quelques cas « à la main » et les sous-totaux avec ceux de Sch)

V- calcul des XM

(Apparemment la plus intense, voir X-ray data Booklet I- 14)

Energie = Energie Auger [EM5 – EN7] (Z du fils)

Uc (energie = 5%)

Ou Energie = Energie Auger [EM5 – ENi] avec ENi = 1^{ere} couche non nulle

Si il n'y a pas de couche N, alors Energie = 0

Calcul de l'intensité :

(clé sur TCE = Ident du père, clé sur TTEG = père + fils)

Nombre de vacances créées directement dans M

V1 = TCE.[PM] × [Intensite] + somme des TTEG.[Emission Intensite M]

Uc(V1) = incertitudePr sur chaque produit puis IncertitudeS sur la somme

Nombre de vacances créées dans M à la suite d'une vacance dans L

V2 = CA.[Multiplicateur L] × CA.[WLM]

(clé table CA = père + fils)

Uc(V2) = IncertitudePr (CA.[Multiplicateur L], [Indice L], CA.[WLM], [WLM erreur])

Nombre de vacances créées dans M à la suite d'une vacance dans K

$N_{KM} = \omega_K \times K\beta / (K\alpha + K\beta) + (1 - \omega_K) \times (KXY + KLX) / (KLL + KLX + KXY)$

V3 = TCE.[PK] × [Intensite] × N_{KM}

V = V1 + V2 + V3

Uc(V) = IncertitudeS (V1, V2, V3)

E × P = Energie M × V × CA.[WM]

Uc (E × P) = IncertitudePr(Energie M × V × CA.[WM])

VI- Calcul des électrons Auger M

(Apparemment la plus intense, voir X-ray data Booklet)

Energie M = (EM1 + EM5)/2 – (EN1 + EN7)/2 – (EN1 + EN7)/2

pour le fils

Uc (énergie = 10%)

Calcul de l'intensité (pour 100 désintégrations) :

Nombre de vacances créées directement dans M

V1 = TCE.[PM] × [Intensite] + somme des TTEG.[Emission Intensite M]

Nombre de vacances créées dans M à la suite d'une vacance dans L

V2 = CA.[Multiplicateur L] × CA.[WLM]

Nombre de vacances créées dans M à la suite d'une vacance dans K

$N_{KM} = \omega_K \times K\beta / (K\alpha + K\beta) + (1 - \omega_K) \times (KXY + KLX) / (KLL + KLX + KXY)$

V3 = TCE.[PK] × [Intensite] × N_{KM}

V = V1 + V2 + V3

$Uc(V) = \text{idem calcul XM}$

$E \times P = \text{Energie M} \times V \times (1 - CA.[WM])$

$Uc(E \times P) = \text{IncertitudePr}(\text{Energie M} \times V \times CA.[WM])$

NB : dans l'état (5) ce qui est affiché dans la rubrique $E \times P$ = nombre de vacances total dans M

Annexe A2

Probabilités relatives des émissions des photons XL
pour l'atome de bismuth

Madame C. Bonnelle

Bi neutre $6s^2 6p^3$

$2p_{1/2} - nd_{3/2}$ état i : 10 états $\Sigma(2J+1) = 40$ 123 raies
 $2p_{3/2} - nd_{3/2}$ 18 " = 80 195 "
 $- nd_{5/2}$ 198 "

	$\frac{\Sigma(2J+1)P}{\Sigma(2J+1)} \times 10^4$	E_{ev}	$E_{max\ ev}$	
L_2				
$- 2p_{1/2} - 3d_{3/2}$	300 012, 11	12 382 - 13 049	13 015, 9	γ_1
$- 4d_{3/2}$	64 375, 30	15 227 - 15 239	15 233, 9	γ_1
$- 5d_{3/2}$	<u>9 390, 25</u>	15 668 - 15 680	15 674, 3	γ_2
	373 777, 66			
L_3				
$- 2p_{3/2} - 3d_{3/2}$	26 114, 19	10 687 - 10 754	10 720, 8	γ_2
$- 4d_{3/2}$	5 139, 25	12 932 - 12 945	12 938, 8	β_{15}
$- 5d_{3/2}$	<u>739, 26</u>	13 372 - 13 385	13 379, 2	β_{15}
	31 992, 70			
$- 3d_{5/2}$	229 587, 77	10 755 - 10 862	10 828, 8	γ_1
$- 4d_{5/2}$	46 286, 87	12 956 - 12 968	12 962, 8	γ_2
$- 5d_{5/2}$	<u>6 462, 53</u>	13 375 - 13 388	13 382, 3	β_{15}
	282 337, 22			

$\Delta 2p_{1/2}^{3/2}$	$3d_{3/2}$	2 295, 1	$I 2p_{3/2}$	3d	0, 852
	$4d_{3/2}$	2 295, 1	$I 2p_{1/2}$	4d	0, 799
	$5d_{3/2}$	2 295, 1		5d	0, 767

Bi neutre $Gd^2 Gp^3$

$2s - np$
L₁

état initial : 10 états $\Sigma 2J+1 = 40$
204 raies

L ₁	$\frac{\Sigma(2J+1)P \cdot 10^{10}}{\Sigma 2J+1}$	<u>E_{ev}</u>	<u>E_{max} eV</u>		<u>ΔE_{ev}</u>
2s - 2p	7 186,8	650,8 - 3013,1	685,2	2979,5	2294,3
3p	151 606,6	12654 - 13239,7	^{F₄} 12687,4	^{F₃} 13206,4	519,0
4p	42 001,9	15568 - 15708	^{F₄} 15574,0	^{F₃} 15702,0	128,0
5p	<u>8 621,3</u>	16259,7 - 16296	^{F₄} 16285,6	^{F₃} 16289,5	23,9
	209416,6				

ΔE np	calc.	B.B.	diff.
2p	2294,3	2164,8	129,5
3p	519,0	487,8	31,2
4p	128,0	119,4	8,6
5p	23,9	18,8	5,1

Bi neutre $68^2 6p^3$

L: $2p_{1/2} - 2d$ état L: 10 états $\sum 2J+1 = 40$ 81 raies
 I: $2p_{3/2} - nd$ 18 " " 80 123 raies

	$\frac{\sum(2J+1)P \cdot 10^{10}}{\sum 2J+1}$	E_{ev}	E_{maxcv}	
L_2				
- $2p_{1/2} - 3d$ 1^1_2	8 283,16	11 663 - 11 730	11 696,6	0
- " - $4d$ 1^1_2	2 168,59	14 749 - 14 761	14 755,5	5
- " - $5d$ 1^1_2	480,56	15 526 - 15 538	15 532,7	6
- " - $6d$ 1^1_2	<u>80,65</u>	15 682 - 15 699	15 691,6	
	11 013,36			
L_3				
- $2p_{3/2} - 3d$ 1^3_2	13 691,31	9 368 - 9 435	9 401,5	0
- " - $4d$ 1^3_2	3 428,60	12 454 - 12 466	12 460,5	1
- " - $5d$ 1^3_2	752,34	13 231 - 13 244	13 237,7	0
- " - $6d$ 1^3_2	<u>125,70</u>	13 387 - 13 404	13 396,6	
	17 997,95			

$\Delta 2p_{1/2, 3/2}$	3d	2 295,1	$I 2p_{3/2}$	3d	1,653
	4d	2 295,0	$I 2p_{1/2}$	4d	1,581
	5d	2 295,0		5d	1,564
	6d	2 295,0		6d	1,559

Annexe A3

Exemple de fichier de résultats du programme EMISSION

EMISSION, V3.10, 28-Jan-2003

=====

Date of calculation: 20.11.2003 16:41
 Atomic shell data from file: EMISSION.101
 Radionuclide data from file: d:\codes\emi-X\Fe55.102

Nuclide: Fe-55
 Z(Daughter): 25

Radionuclide data:

 pEC, pK, pL1, pL2, pL3:
 100,000000(0) 0,8853(16) 0,0978(12) 0,00050(10) 0(0)
 0,000000130(10) 0(0) 0(0) 0(0) 0(0)

E, pGamma, Alpha(K, L1, L2, L3)

Atomic shell data:

 OmegaK: 0,321(5)
 x=p(KBeta)/p(KAlpha): 0,1359(14)
 y=p(KAlpha2)/p(KAlpha1): 0,5099(25)
 r=p(K'Beta2)/p(K'Betal): 0(0)
 u=p(KLX)/p(KLL): 0,272(3)
 v=p(KXY)/p(KLL): 0,0185(4)

 <OmegaL>: 0,0047(7)
 nKL: 1,478(4)
 nKL1: 0,246(5)
 nKL2: 0,581(6)
 nKL3: 0,651(7)
 Omega1: 0,000330(20)
 Omega2: 0,00340(20)
 Omega3: 0,00390(20)
 f12: 0,268(6)
 f13: 0,688(14)
 f23: 0(0)

p(L1-M2)/p(L1-total): 0,347(4)
 p(L1-M3)/p(L1-total): 0,653(7)
 p(L1-N2)/p(L1-total): 0(0)
 p(L1-N3)/p(L1-total): 0(0)
 p(L1-O2,3)/p(L1-total): 0(0)
 p(L1-P2,3)/p(L1-total): 0(0)

p(L2-M1)/p(L2-total): 1,000000(0)
 p(L2-M4)/p(L2-total): 0(0)
 p(L2-N1)/p(L2-total): 0(0)
 p(L2-N4)/p(L2-total): 0(0)
 p(L2-O1)/p(L2-total): 0(0)
 p(L2-O4)/p(L2-total): 0(0)
 p(L2-P1)/p(L2-total): 0(0)

p(L3-M1)/p(L3-total): 1,000000(0)
 p(L3-M4)/p(L3-total): 0(0)
 p(L3-M5)/p(L3-total): 0(0)
 p(L3-N1)/p(L3-total): 0(0)
 p(L3-N4,5)/p(L3-total): 0(0)
 p(L3-O1)/p(L3-total): 0(0)
 p(L3-O4,5)/p(L3-total): 0(0)
 p(L3-P1)/p(L3-total): 0(0)

Results:

```

-----
N(K) ..... : 88,53(16)
p(eaK) ..... : 60,1(5)
p(KLL) ..... : 46,6(4)
p(KLX) ..... : 12,67(18)
p(KXY) ..... : 0,862(20)

p(XK) ..... : 28,4(5)
p(KAlpha2) ..... : 8,45(14)
p(KAlpha1) ..... : 16,57(27)
p(KAlpha) ..... : 25,0(4)
p(K'Beta1) ..... : 3,40(7)
p(K'Beta2) ..... : 0(0)
p(KBeta) ..... : 3,40(7)

N(L) ..... : 140,7(10)
N(L1) ..... : 31,6(5)
N(L2) ..... : 51,5(6)
N(L3) ..... : 57,6(7)
p(eaL) ..... : 140,2(8)
p(eaL)=N(L)*(1-<OmegaL>) ..... : 140,0(10)
p(eaL1) ..... : 1,4(5)
p(eaL2) ..... : 59,7(6)
p(eaL3) ..... : 79,036(17)

p(XL)=p(XL1)+p(XL2)+p(XL3) ..... : 0,524(21)
p(XL)=N(L)*<OmegaL> ..... : 0,66(10)
p(XL1) ..... : 0,0104(7)
p(XL2) ..... : 0,204(13)
p(XL3) ..... : 0,309(17)

..... p(XLAlpha) ..... : 0(0)
..... p(XLBeta) ..... : 0,0104(5)
..... p(XLGamma) ..... : 0(0)
..... p(XLEta) ..... : 0,204(13)
..... p(XLl) ..... : 0,309(17)

p(L1-M2) ..... p(XLBeta4) ..... : 0,00362(23)
p(L1-M3) ..... p(XLBeta3) ..... : 0,0068(5)
p(L1-N2) ..... p(XLGamma2) ..... : 0(0)
p(L1-N3) ..... p(XLGamma3) ..... : 0(0)
p(L1-O2,3) ..... p(XLGamma4',4) ..... : 0(0)
p(L1-P2,3) ..... : 0(0)

p(L2-M1) ..... p(XLEta) ..... : 0,204(13)
p(L2-M4) ..... p(XLBeta1) ..... : 0(0)
p(L2-N1) ..... p(XLGamma5) ..... : 0(0)
p(L2-N4) ..... p(XLGamma1) ..... : 0(0)
p(L2-O1) ..... p(XLGamma8) ..... : 0(0)
p(L2-O4) ..... p(XLGamma6) ..... : 0(0)
p(L2-P1) ..... : 0(0)

p(L3-M1) ..... p(XLl) ..... : 0,309(17)
p(L3-M4) ..... p(XLAlpha2) ..... : 0(0)
p(L3-M5) ..... p(XLAlpha1) ..... : 0(0)
p(L3-N1) ..... p(XLBeta6) ..... : 0(0)
p(L3-N4,5) ..... p(XLBeta2,15) ..... : 0(0)
p(L3-O1) ..... p(XLBeta7) ..... : 0(0)
p(L3-O4,5) ..... p(XLBeta5) ..... : 0(0)
p(L3-P1) ..... : 0(0)

```


Annexe A4

Conservation de l'énergie - Exemple

Energy Conservation (4)
Atomic process - available energy

Fe55 --> Mn55

09-févr-2004

Decay rate (%)

100

Q At. (keV)

586,52

Uc

0,17

N°	Wording	Energy (keV)	Probability	E x P	Uc	Summation	Summation Uc	relative error (%)
1	El. K (Capt)	6,539	88,53	578,9	0,14	578,9	0,14	
2	El L1 (Capt)	0,769	9,78	7,52	0,09			
3	El L2 (Capt)	0,6514	0,05	0,033	0,007	7,55	0,09	
4	El. M (Capt)	0,0436	1,63	0,0711	0,0013	0,0711	0,0013	

Energy Conservation (5)

Atomic process - consumed energy

09-févr-2004

Fe55 --> Mn55

Decay rate (%)				Q At. (keV)	Uc		
100				583,9	4,9		
Wording	Energy (keV)	Probability	E x P	Uc	Summation	Sum Uc	relative error (%)
K Alpha 2	5,88765	8,45	49,8	0,8			
K Alpha 1	5,89875	16,57	97,7	1,6			
K Beta 1	6,5128	3,4	22,14	0,46			
K Beta 2	0	0	0	0	169,6	1,9	
Auger K-L1L1	4,954	3,89	19,3	0,6			
Auger K-L1L2	5,07	4,31	21,9	0,7			
Auger K-L1L3	5,08	7,94	40,4	1,3			
Auger K-L1M1	5,69	1,173	6,67	0,23			
Auger K-L1M2	5,72	0,62	3,55	0,12			
Auger K-L1M3	5,72	1,135	6,49	0,23			
Auger K-L1M4	5,77	0,0286	0,165	0,006			
Auger K-L1M5	5,77	0,00725	0,0418	0,0014			
Auger K-L1N1	5,77	0,1078	0,622	0,022			
Auger K-L2L2	5,19	0,794	4,12	0,14			
Auger K-L2L3	5,2	19	98,9	3,2			
Auger K-L2M1	5,8	0,563	3,27	0,11			
Auger K-L2M2	5,84	0,214	1,248	0,043			
Auger K-L2M3	5,84	2,35	13,7	0,47			
Auger K-L2M4	5,88	0,041	0,241	0,008			
Auger K-L2M5	5,88	0,0267	0,157	0,005			
Auger K-L2N1	5,89	0,0506	0,298	0,01			
Auger K-L3L3	5,21	10,65	55,5	1,8			
Auger K-L3M1	5,81	1,03	5,99	0,21			
Auger K-L3M2	5,85	2,35	13,73	0,48			
Auger K-L3M3	5,85	2,67	15,6	0,5			
Auger K-L3M4	5,9	0,185	1,091	0,038			
Auger K-L3M5	5,9	0,0315	0,186	0,006			
Auger K-L3N1	5,9	0,0935	0,551	0,019			
Auger K-M1M1	6,37	0,09	0,574	0,023			
Auger K-M1M2	6,41	0,0834	0,534	0,021			
Auger K-M1M3	6,41	0,151	0,969	0,038			
Auger K-M1N1	6,45	0,0168	0,1083	0,0042			
Auger K-M2M3	6,44	0,3	1,93	0,08			
Auger K-M2N1	6,49	0,00845	0,0548	0,0022			
Auger K-M3M3	6,44	0,176	1,131	0,044			
Auger K-M3M4	6,49	0,0196	0,1269	0,005			
Auger K-M3M5	6,49	0,0028	0,0182	0,0007			
Auger K-M3N1	6,49	0,014	0,0909	0,0036	319,1	4,2	
XL L3-M1	0,5564	0,309	0,172	0,009			
XL L2-M1	0,5675	0,204	0,116	0,007			
XL L1-M2	0,7204	0,00362	0,00261	0,00017			
XL L1-M3	0,7204	0,0068	0,0049	0,00036	0,295	0,012	

Decay rate (%)

100

Q At. (keV)

583,9

Uc

4,9

Wording	Energy (keV)	Probability	E x P	Uc	Summation	Sum Uc	relative error (%)
Auger L1 L2M2	0,069	1,94	0,134	0,008			
Auger L1 L2M3	0,069	2,36	0,163	0,01			
Auger L1 L2M4	0,1143	3,09	0,353	0,021			
Auger L1 L2M5	0,1143	0,855	0,098	0,006			
Auger L1 L2N1	0,1172	0,233	0,0273	0,0016			
Auger L1 L3M1	0,0448	5,22	0,234	0,014			
Auger L1 L3M2	0,0801	2,32	0,186	0,011			
Auger L1 L3M3	0,0801	4,95	0,397	0,023			
Auger L1 L3M4	0,1254	7,13	0,89	0,05			
Auger L1 L3M5	0,1254	1,67	0,21	0,012			
Auger L1 L3N1	0,1283	0,432	0,0554	0,0033			
Auger L1 M1M1	0,601	0,135	0,081	0,029			
Auger L1 M1M2	0,636	0,24	0,15	0,06			
Auger L1 M1M3	0,636	0,47	0,3	0,11			
Auger L1 M1M4	0,682	0,24	0,16	0,06			
Auger L1 M1M5	0,682	0,058	0,04	0,014			
Auger L1 M1N1	0,685	0,022	0,015	0,005			
Auger L1 M2M3	0,672	0,0056	0,0038	0,0014			
Auger L1 M2M4	0,717	0,0032	0,0023	0,0008			
Auger L1 M2M5	0,717	0,0099	0,0071	0,0026			
Auger L1 M2N1	0,72	0,017	0,0123	0,0044			
Auger L1 M3M3	0,672	0,012	0,0081	0,0029			
Auger L1 M3M4	0,717	0,062	0,045	0,016			
Auger L1 M3M5	0,717	0,0076	0,0054	0,002			
Auger L1 M3N1	0,72	0,033	0,024	0,009			
Auger L1 M4M4	0,762	0,0059	0,0045	0,0016			
Auger L1 M4M5	0,762	0,057	0,044	0,016			
Auger L1 M4N1	0,765	0,016	0,0125	0,0045			
Auger L1 M5N1	0,765	0,0041	0,0031	0,0011			
Auger L1 N1N1	0,768	0,00084	0,00065	0,00023	3,674	0,024	
Auger L2 M1M1	0,4836	0,352	0,17	0,009			
Auger L2 M1M2	0,519	6,58	3,42	0,18			
Auger L2 M1M3	0,519	0,501	0,26	0,014			
Auger L2 M1M4	0,564	0,424	0,239	0,012			
Auger L2 M1M5	0,564	0,107	0,0606	0,0032			
Auger L2 M2M2	0,554	5,58	3,09	0,16			
Auger L2 M2M3	0,554	19,4	10,7	0,6			
Auger L2 M2M4	0,6	6,58	3,94	0,2			
Auger L2 M2M5	0,6	2,14	1,28	0,07			
Auger L2 M2N1	0,602	0,603	0,363	0,019			
Auger L2 M3M3	0,554	0,531	0,294	0,015			
Auger L2 M3M4	0,6	7,46	4,47	0,23			
Auger L2 M3M5	0,6	0,191	0,115	0,006			
Auger L2 M3N1	0,602	0,0418	0,0252	0,0013			
Auger L2 M4M4	0,645	5,22	3,36	0,17			
Auger L2 M4M5	0,645	3,97	2,56	0,13			
Auger L2 M4N1	0,648	0,0358	0,0232	0,0012	34,4	0,5	

Decay rate (%)

100

Q At. (keV)

583,9

Uc

4,9

Wording	Energy (keV)	Probability	E x P	Uc	Summation	Sum Uc	relative error (%)
Auger L3 M1M1	0,4725	0,553	0,261	0,013			
Auger L3 M1M2	0,508	0,364	0,185	0,009			
Auger L3 M1M3	0,508	10,5	5,35	0,27			
Auger L3 M1M4	0,553	0,696	0,385	0,02			
Auger L3 M1M5	0,553	0,174	0,0962	0,0049			
Auger L3 M2M3	0,543	15,9	8,65	0,44			
Auger L3 M2M4	0,588	0,624	0,367	0,019			
Auger L3 M2M5	0,588	1,01	0,595	0,03			
Auger L3 M3M3	0,543	23,4	12,7	0,6			
Auger L3 M3M4	0,588	14,9	8,79	0,45			
Auger L3 M3M5	0,588	3,71	2,18	0,11			
Auger L3 M3N1	0,591	0,964	0,57	0,029			
Auger L3 M4M4	0,634	1,39	0,881	0,045			
Auger L3 M4M5	0,634	4,7	2,98	0,15			
Auger L3 M4N1	0,637	0,0632	0,0403	0,0021	44	1	
Xm	0,0029	299,4	0,0000234	0,0000012	0,0000234	0,0000012	
Auger M	0,0428	299,4	12,8	1,3	12,8	1,3	
Sum KLL	5,155	46,584	240,12				
Sum KLX	5,806	12,677	73,601				
Sum KXY	6,423	0,862	5,537				
Sum L1LiXj	0,091	30,2	2,748				
Sum L1MiMj	0,652	1,306	0,851				
Sum L1MiXj	0,726	0,092	0,067				
Sum L1XiYj	0,774	0,001	0,001				
Sum L2MiMj	0,575	59,036	33,959				
Sum L2MiXj	0,604	0,681	0,411				
Sum L3MiMj	0,557	77,921	43,42				
Sum L3MiXj	0,594	1,027	0,61				

