

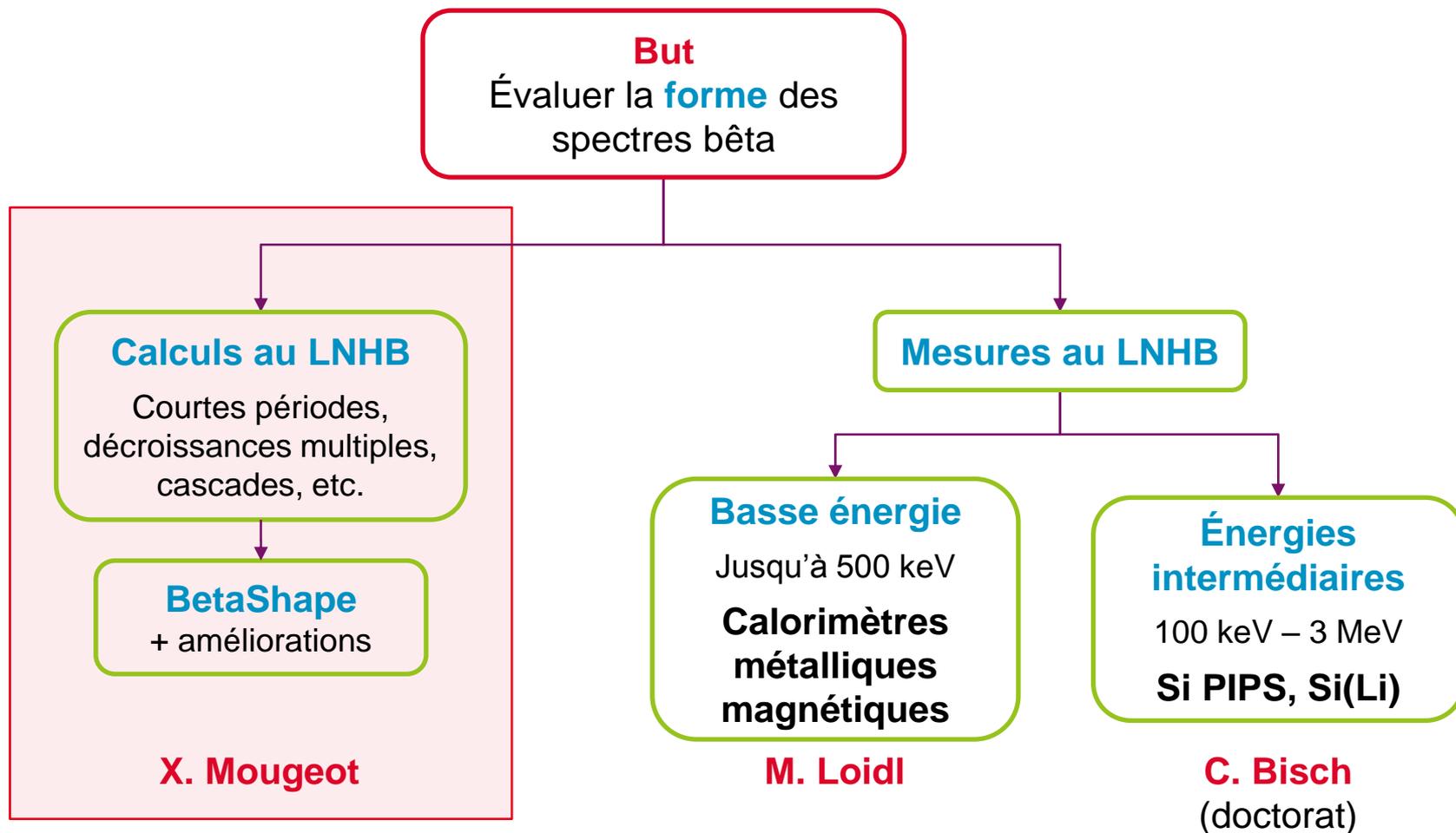
# Calcul de la forme des spectres bêta

- ✓ Influence des électrons de basse énergie
- ✓ Calculs analytiques dans BetaShape
- ✓ Écrantage et effet d'échange atomique
- ✓ Résultats pour les spectres du  $^{63}\text{Ni}$  et du  $^{241}\text{Pu}$
- ✓ Comparaison systématique

list

CEA Saclay – LNHB : M.-M. Bé, C. Bisch, **X. Mougeot**

CEA Saclay – LNHB : M.-M. Bé, C. Bisch, X. Mougeot



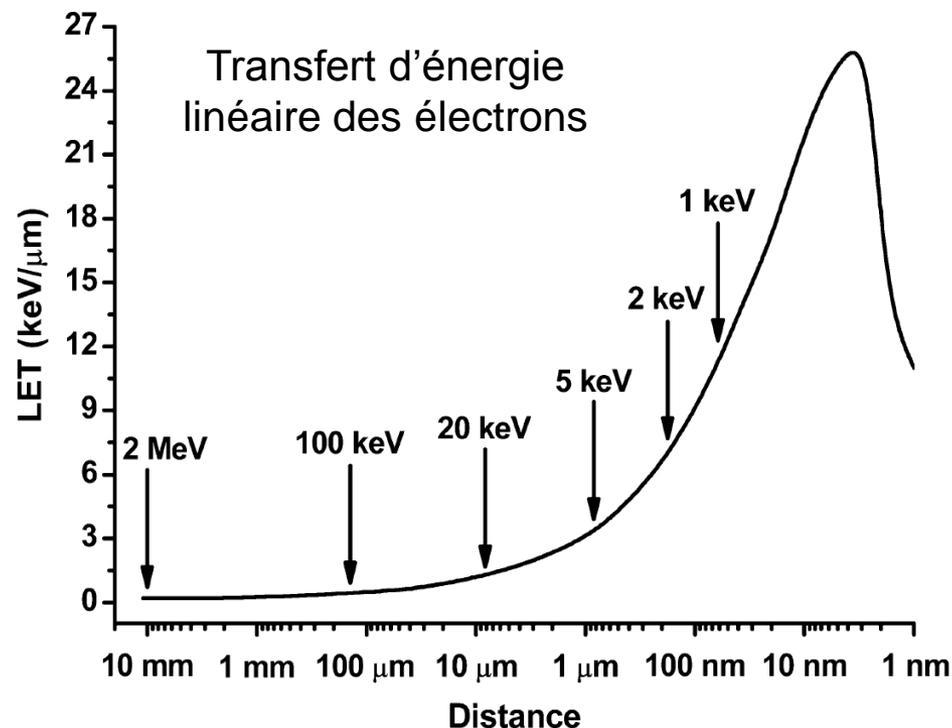
- **Mesures d'activité par Scintillation Liquide**

R. Broda, P. Cassette, K. Kossert, Metrologia 44, S36-S52 (2007)

- Évaluation de la **dose déposée** dans les cellules du patient

M. Bardiès, J.-F. Chatal, Phys. Med. Biol. 39, 961-981 (1994)

→ e.g. 1 électron de 2 keV  
≠  
2 électrons de 1 keV



A.I. Kassis, Int. J. Radiat. Biol. 80, 789 (2004)

Il est nécessaire de connaître précisément la forme des spectres bêta à basse énergie

## Espace des phases

Spectre bêta

$$N(W) \propto pW(W_0 - W)^2 S_n(Z, W)$$

Partie coulombienne  
+ facteur de forme

ordre de la  
transition ( $n$ )

$$S_n(Z, W) = \sum_{k=1}^{n+1} \lambda_k \frac{p^{2(k-1)} (W_0 - W)^{2(n-k+1)}}{(2k-1)! [2(n-k+1) + 1]!}$$

$$\lambda_k = \frac{g_{-k}^2(R) + f_k^2(R)}{2p^2} \left[ \frac{(2k-1)!!}{(pR)^{k-1}} \right]^2$$

Fonctions d'ondes radiales relativistes  
et analytiques de l'électron

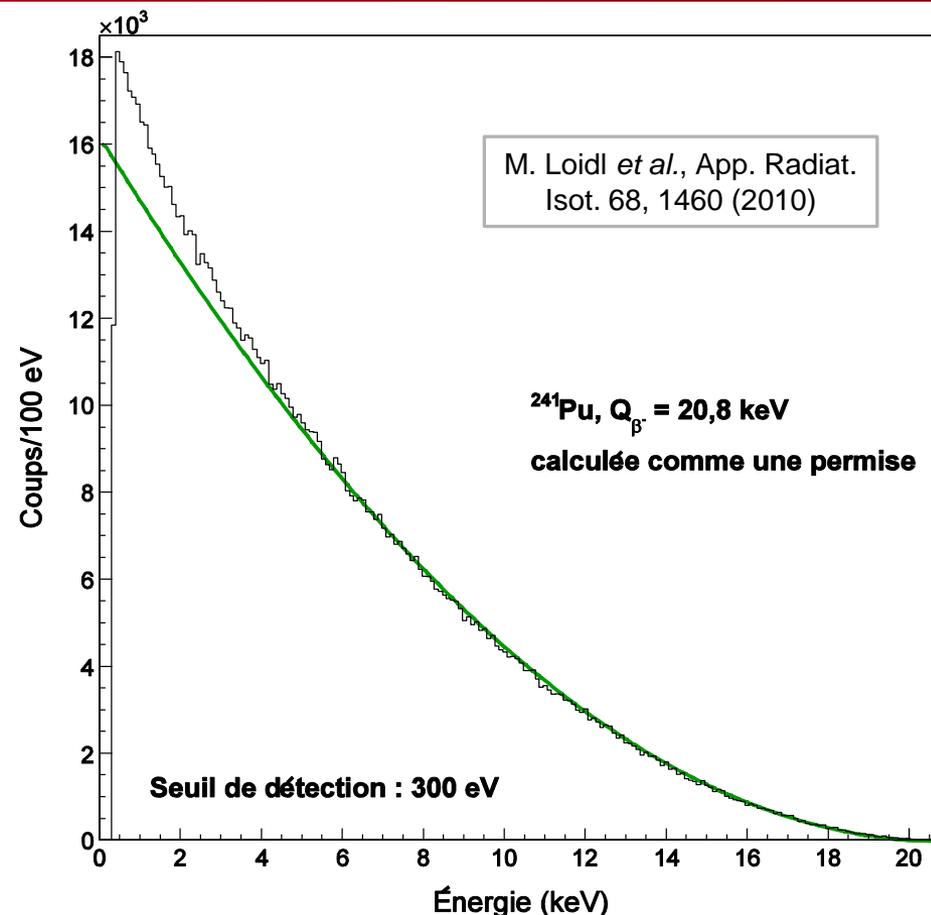
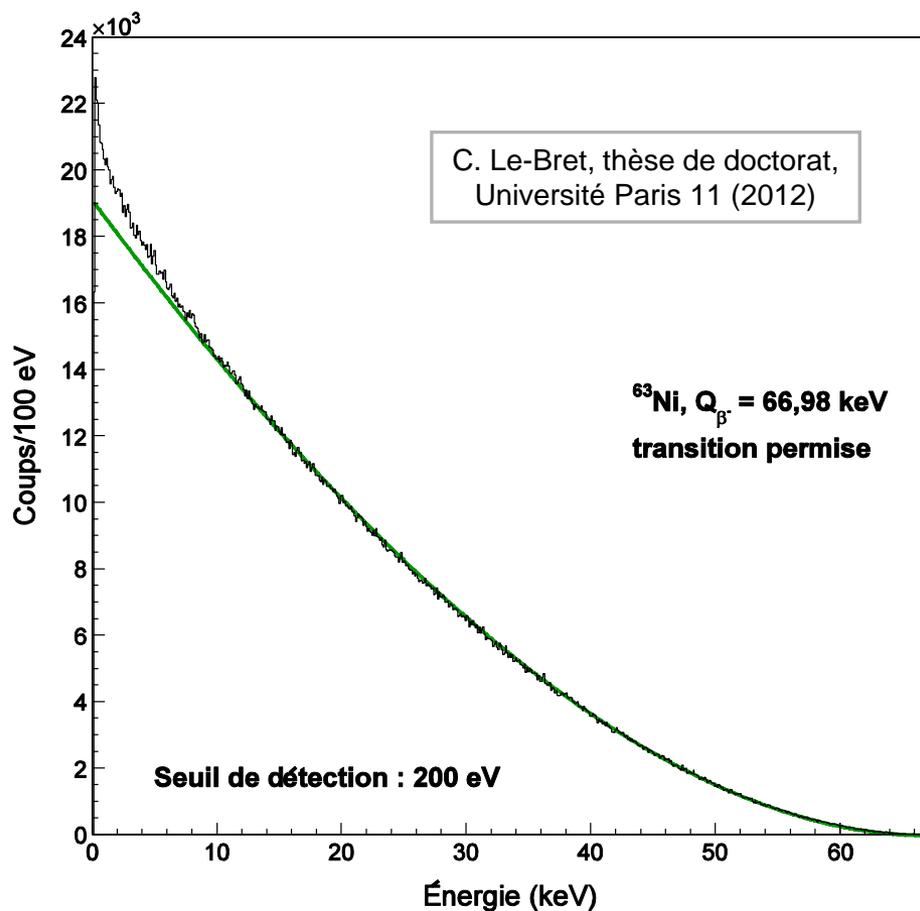
?

↓

$\lambda_k = 1$

- Transitions **permises** et **interdites uniques**
- Transitions **interdites non-uniques** traitées selon l'**approximation  $\xi$**   
si  $2\xi = \alpha Z/R \gg E_0$ , non unique  $\rightarrow$  unique de même  $\Delta J$
- **Écrantage** :  $W \rightarrow W - V_0(\beta^-)$  ou  $W \rightarrow W + V_0(\beta^+)$  où  $V_0$  ne dépend que de  $Z$
- **Taille finie du noyau** :  $\lambda_1 \rightarrow \lambda_1(1 + \Delta\lambda_1)$
- **Corrections radiatives** (photons virtuels, bremsstrahlung interne)

X. Mougeot *et al.*, Proceedings of the LSC2010 International Conference, Paris, France, p. 249 (2010)



Les calculs analytiques usuels ne parviennent pas à reproduire pas ces spectres « simples »

Transition 1<sup>ère</sup> interdite non-unique  
calculable comme une permise

$$2\xi = \alpha Z/R \gg E_0 = 20,8 \text{ keV} \ll 19,8 \text{ MeV}$$

## Écrantage

Évaluer les **fonctions d'ondes à la surface du noyau** ne donne pas un bon résultat à cause de la **faiblesse des potentiels d'écrantage** dans cette région

→ Une **nouvelle correction d'écrantage** a été définie :

- elle évite le calcul complet des éléments de matrices nucléaires et leptoniques
- elle est valable uniquement pour les transitions permises, pour l'instant

## Effet d'échange atomique

→ Indiscernable de la désintégration directe vers un état final libre

→ Dépend du **recouvrement des fonctions d'ondes libres et liées des électrons**

→ **Transitions permises** : seules les **orbitales ns** sont atteignables par l'électron bêta

M.R. Harston, N.C. Pyper,  
Phys. Rev. A 45, 6282 (1992)

X. Mougeot *et al.*, Phys. Rev.  
A 86, 042506 (2012)



Équations de Dirac → **développement en séries entières** (solutions exactes)

singulier régulier  $r = 0$  → ordinaire  $r = r_0$  → singulier irrégulier  $r = \infty$

$$\begin{aligned} \begin{cases} f(r) \\ g(r) \end{cases} &= \frac{(pr)^{k-1}}{(2k-1)!!} \sum_{n=0}^{\infty} \begin{Bmatrix} a_n \\ b_n \end{Bmatrix} r^n & \begin{cases} rf(r) \\ rg(r) \end{cases} &= \sum_{n=0}^{\infty} \begin{Bmatrix} a_n \\ b_n \end{Bmatrix} (r-r_0)^n & \begin{cases} f_{\infty j}(r) \\ g_{\infty j}(r) \end{cases} &= \frac{r^{-1+yt_0/p}}{W(W+1)} e^{t_0 r} \sum_{n=0}^{\infty} \begin{Bmatrix} a_n \\ b_n \end{Bmatrix} r^{-n} \end{aligned}$$

H. Behrens, W. Bühring, *Electron Radial Wave functions and Nuclear Beta Decay*, Oxford Science Publications (1982)

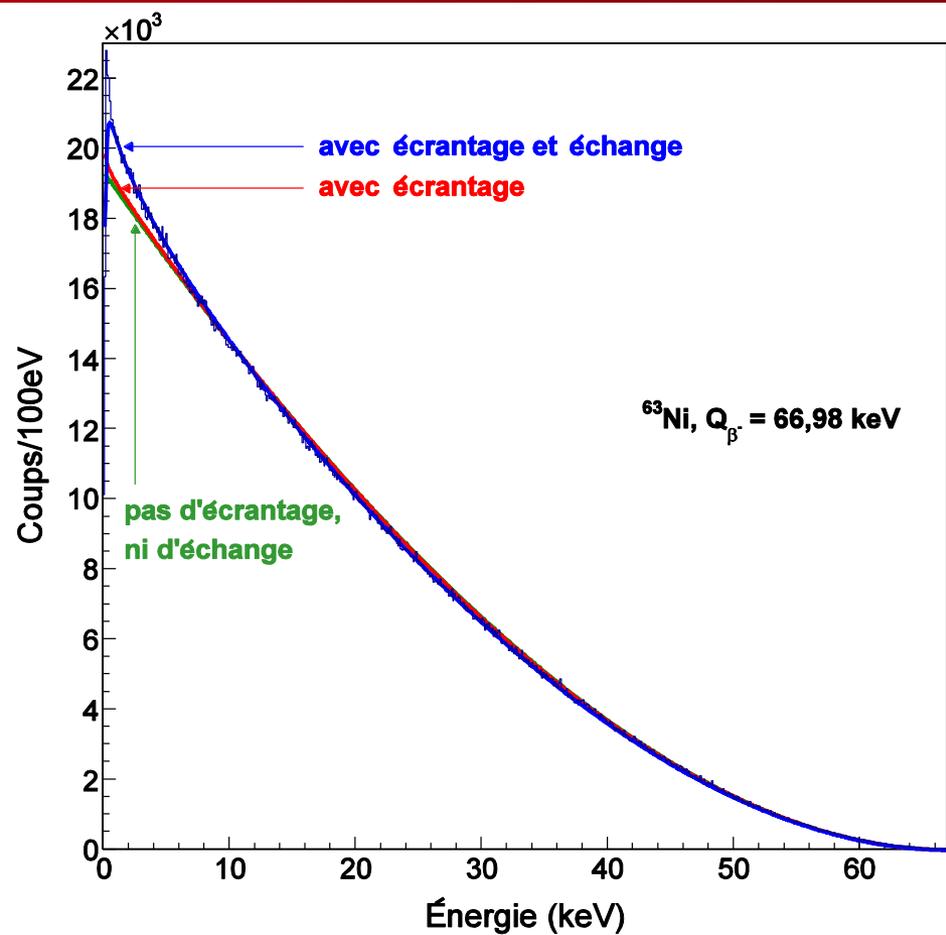
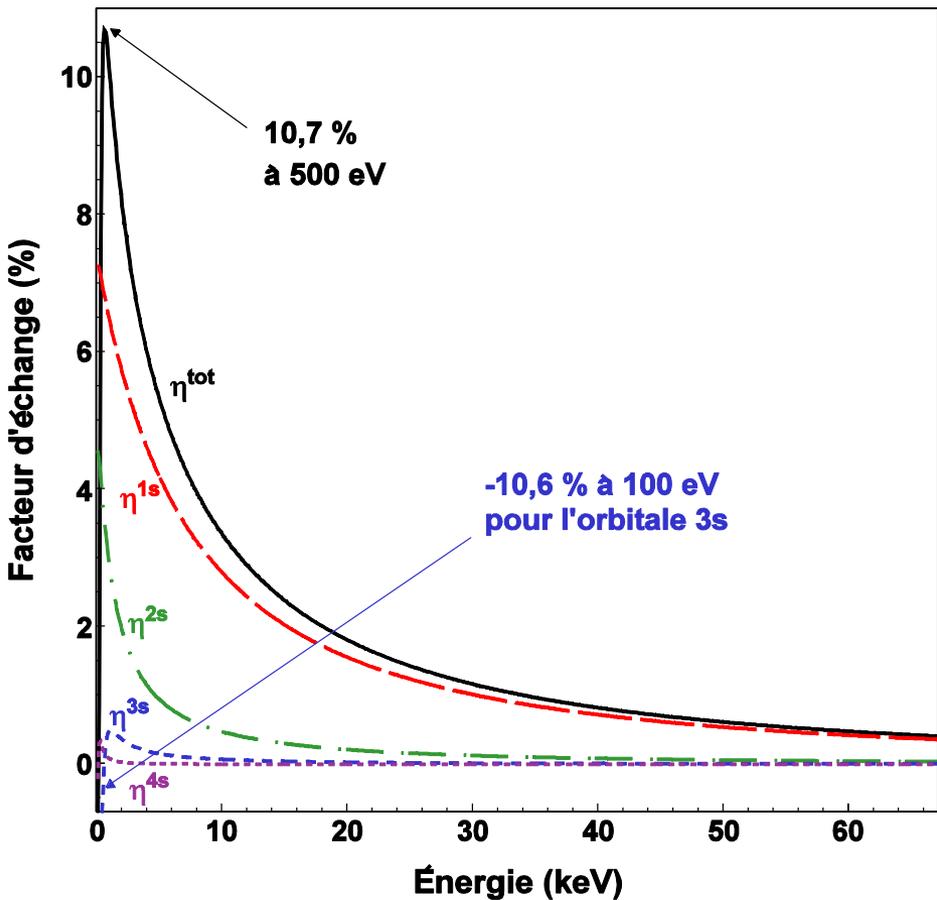
## Potentiel coulombien

- généré par une **sphère uniformément chargée** → taille finie du noyau
- inclus un **potentiel d'écrantage** F. Salvat *et al.*, Phys. Rev. A 36, 467 (1987)
- inclus un potentiel **d'échange** pour les électrons atomiques (**corrélations**)

## Vérification

Bonne reproduction des **paramètres tabulés** de Behrens pour le calcul des transitions bêta et des captures électroniques (spectres en énergie, polarisation des électrons, corrélations angulaires  $\beta - \gamma$ , etc.)

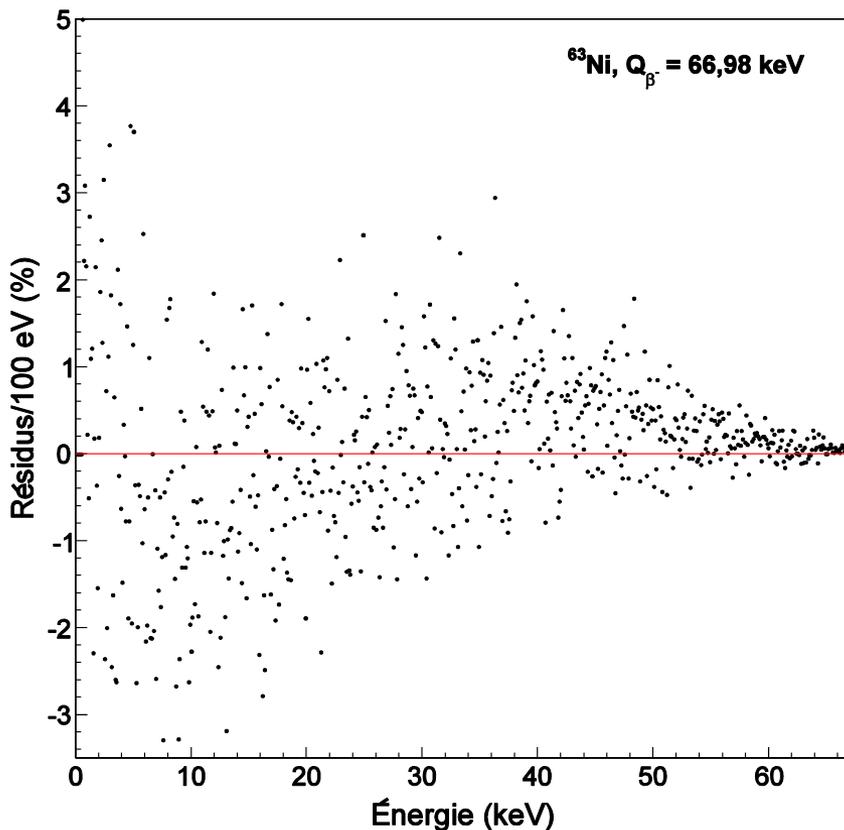
H. Behrens, J. Jänecke, Landolt-Börnstein, New Series, Group I, vol. 4, Springer Verlag, Berlin (1969)



Analytique :  $\bar{E} = 17,45$  keV  
 Avec écrantage :  $\bar{E} = 17,40$  keV  
 Avec écrantage et échange :  $\bar{E} = 17,14$  keV

L'énergie moyenne du spectre est plus faible de 1,8 %

**Transition permise**  
 Spectre expérimental  
 C. Le-Bret, thèse de doctorat, Université Paris 11 (2012)



Erreur de modélisation  $\hat{e}_i = y_i - y_i^{th}$

Qualité d'ajustement  $R^2 = 1 - \frac{\text{var}(\hat{e}_i)}{\text{var}(y_i)}$

Ici, deux paramètres : énergie maximale et normalisation sur le spectre mesuré

Résidus standardisés  $r_i = \frac{\hat{e}_i}{\sqrt{\text{var}(\hat{e}_i)}}$

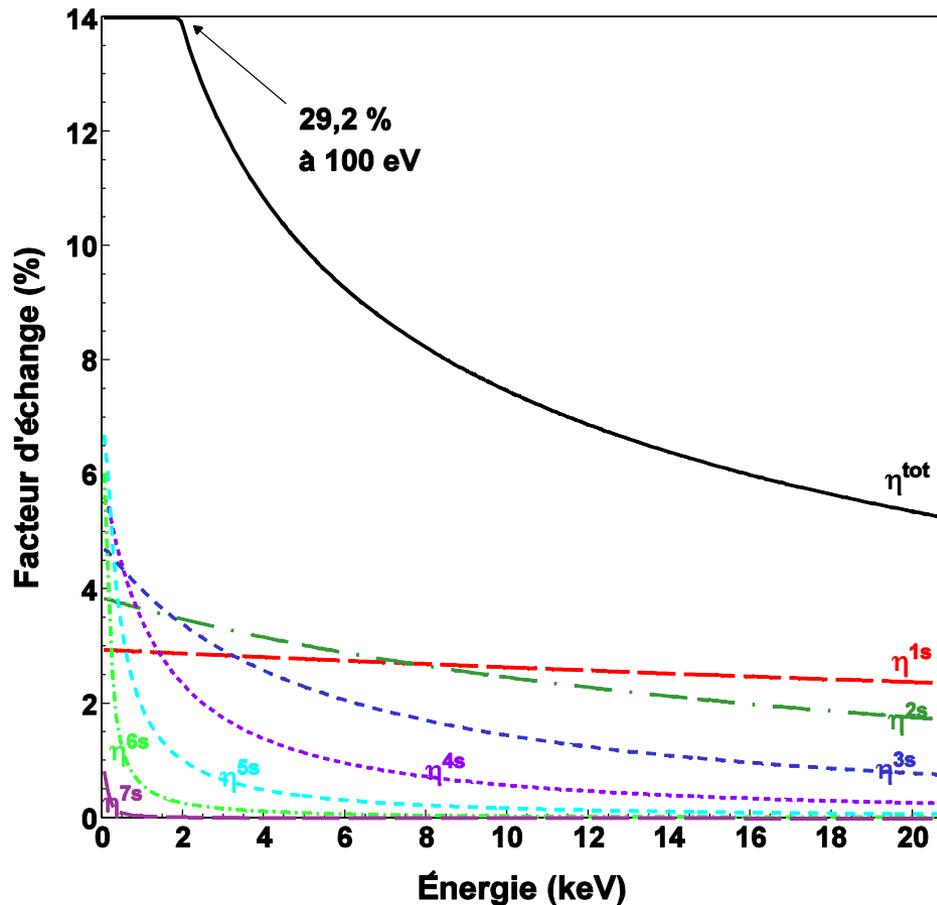
Si à peu près équirépartis autour de zéro

$$\sigma_{r_i} = \sqrt{\text{var}(r_i)}$$

est une estimation de l'incertitude globale du spectre calculé

Entre  $[500 \text{ eV}, E_{\max}]$

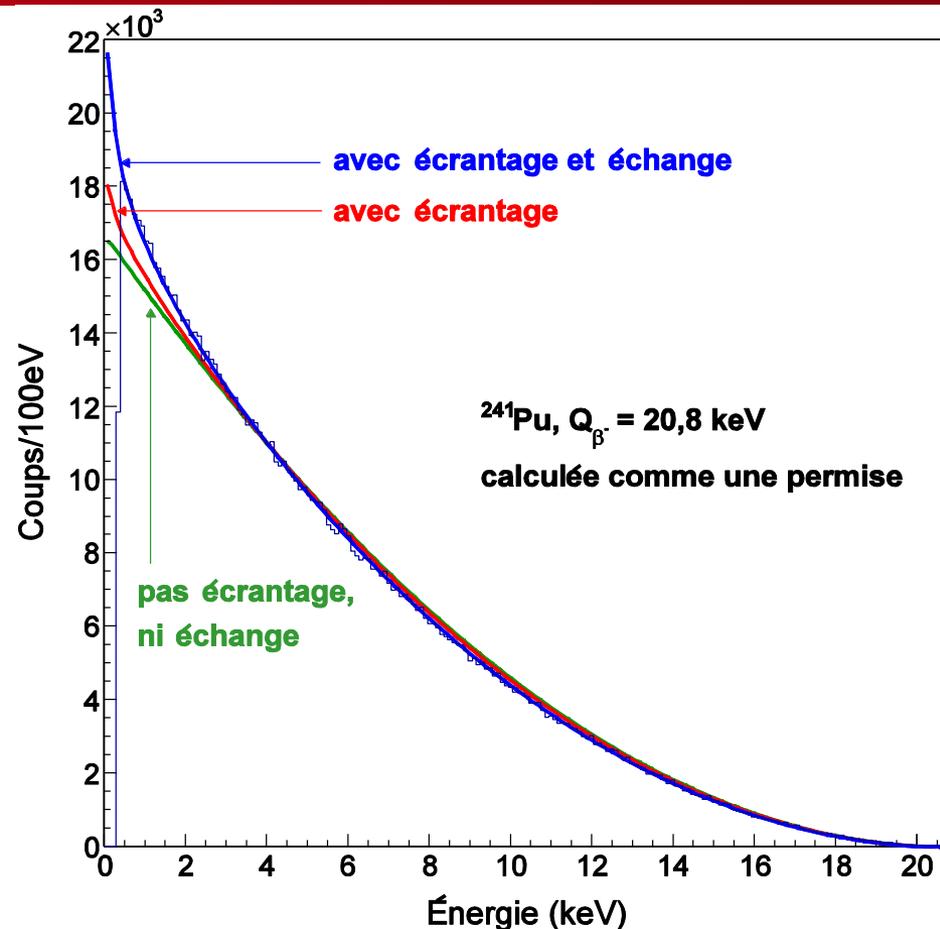
- moyenne des résidus  $\bar{r}_i = 0,093 \%$
- désaccord théorie – expérience  $(1 - R^2) = 0,028 \%$
- incertitude globale  $\sigma_{r_i} = 1,03 \%$



Analytique :  $\bar{E} = 5,24 \text{ keV}$

Avec écrantage :  $\bar{E} = 5,18 \text{ keV}$

Avec écrantage et échange :  $\bar{E} = 5,03 \text{ keV}$

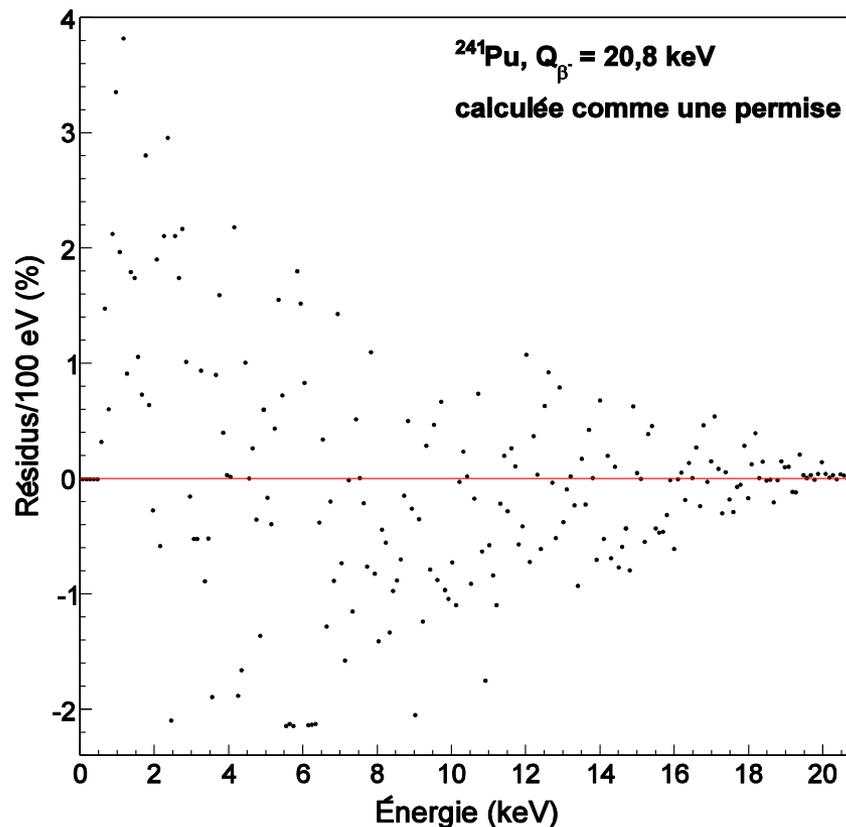


L'énergie moyenne du spectre est plus faible de 4 %

Transition calculée comme une **permise**

Spectre expérimental

M. Loidl *et al.*, App. Radiat. Isot. 68, 1460 (2010)



Erreur de modélisation  $\hat{e}_i = y_i - y_i^{th}$   
 Qualité d'ajustement  $R^2 = 1 - \frac{\text{var}(\hat{e}_i)}{\text{var}(y_i)}$

Ici, deux paramètres : énergie maximale et normalisation sur le spectre mesuré

Résidus standardisés  $r_i = \frac{\hat{e}_i}{\sqrt{\text{var}(\hat{e}_i)}}$

Si à peu près équirépartis autour de zéro

$$\sigma_{r_i} = \sqrt{\text{var}(r_i)}$$

est une estimation de l'incertitude globale du spectre calculé

Entre  $[500 \text{ eV}, E_{\text{max}}]$

- moyenne des résidus  $\bar{r}_i = 0,0019 \%$
- désaccord théorie – expérience  $(1 - R^2) = 0,040 \%$
- incertitude globale  $\sigma_{r_i} = 0,99 \%$

Petite base de données de **130 facteurs de formes expérimentaux**

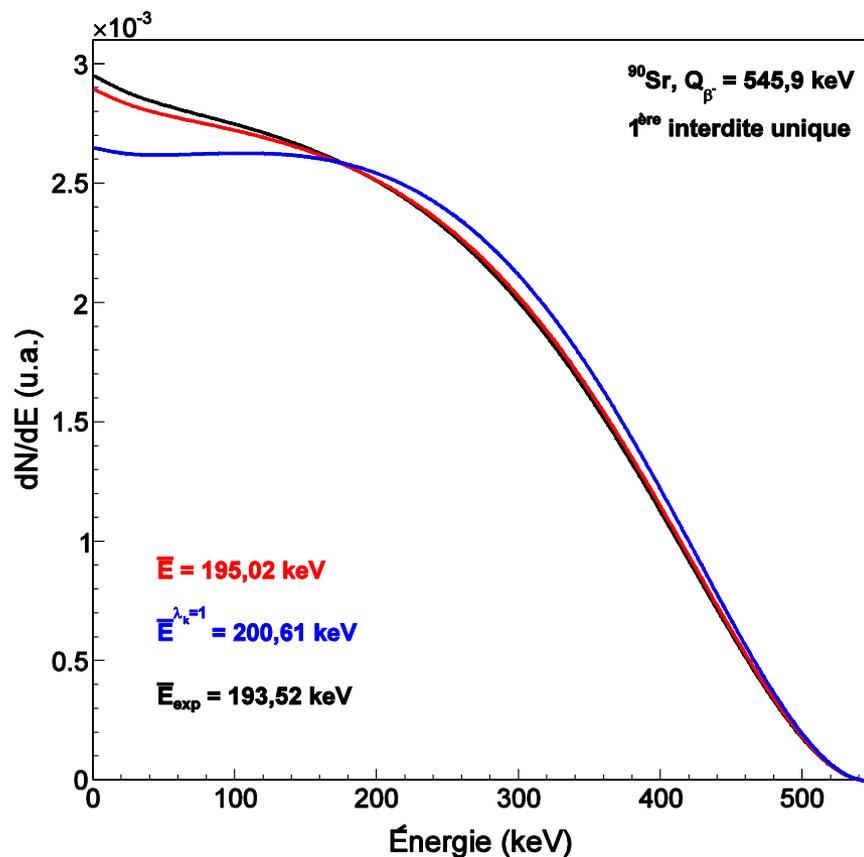
- Permisses : 36
- Interdites uniques : 25 (1<sup>ère</sup>), 4 (2<sup>nde</sup>), 1 (3<sup>ème</sup>)
- Interdites non-unesiques : 53 (1<sup>ère</sup>), 9 (2<sup>nde</sup>), 1 (3<sup>ème</sup>), 1 (4<sup>ème</sup>)

mais presque exhaustive !

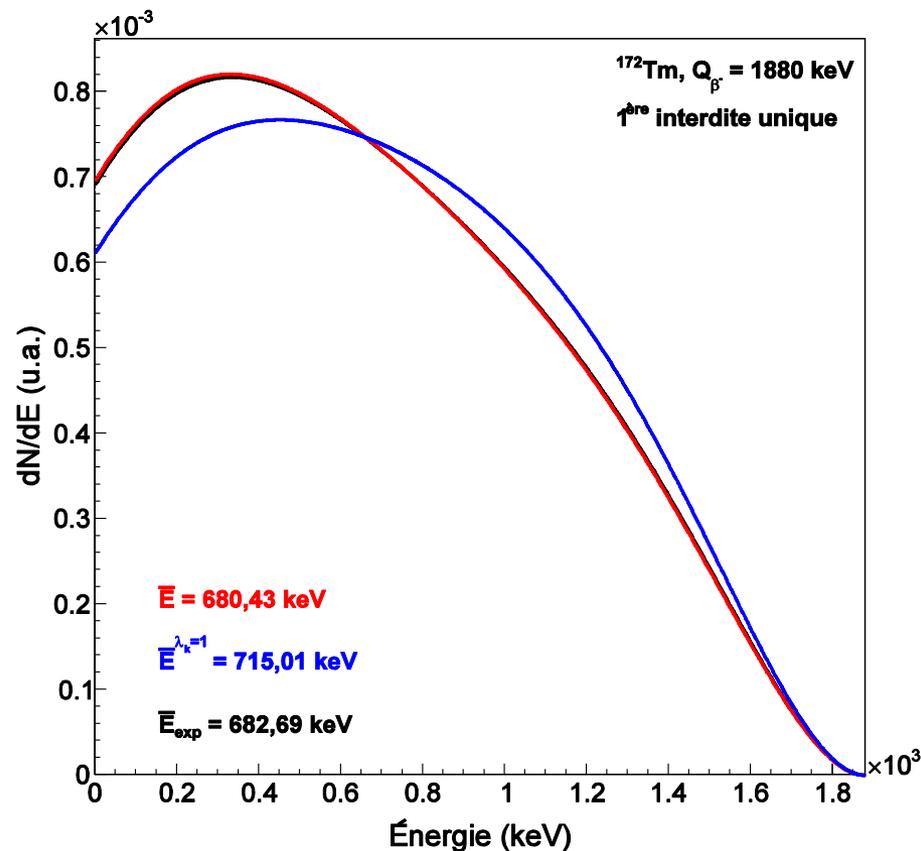
### Comparaison systématique avec les calculs

- Très peu de mesures sous 50 keV
- Très peu de transitions de haut degré d'interdiction
- $\lambda_k = 1$  est en général une mauvaise approximation
- Les spectres des transitions permises et interdites uniques sont en général bien reproduits
- L'approximation  $\xi$  n'est correcte que pour **seulement** ~ 50 % des transitions 1<sup>ères</sup> interdites non-unesiques, et fausse dans tous les autres cas

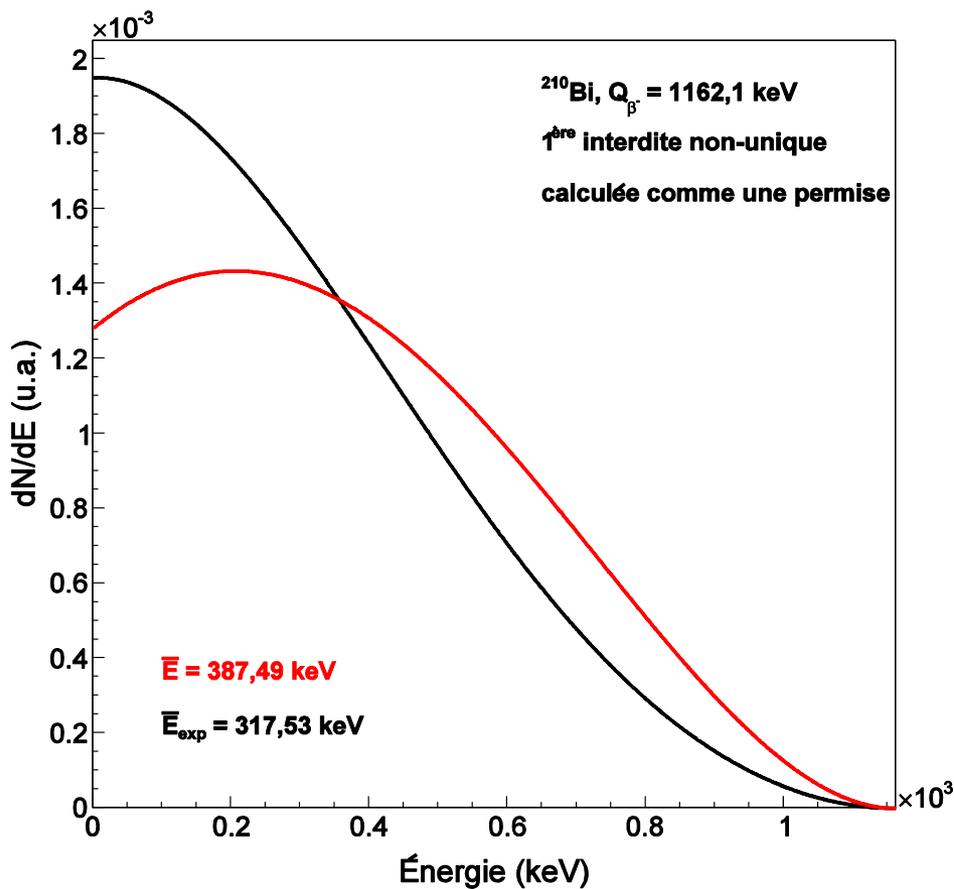
De nouvelles mesures sont nécessaires pour tester les prédictions théoriques



Écart de **3,6 %** sur l'énergie moyenne  
Impact important à basse énergie

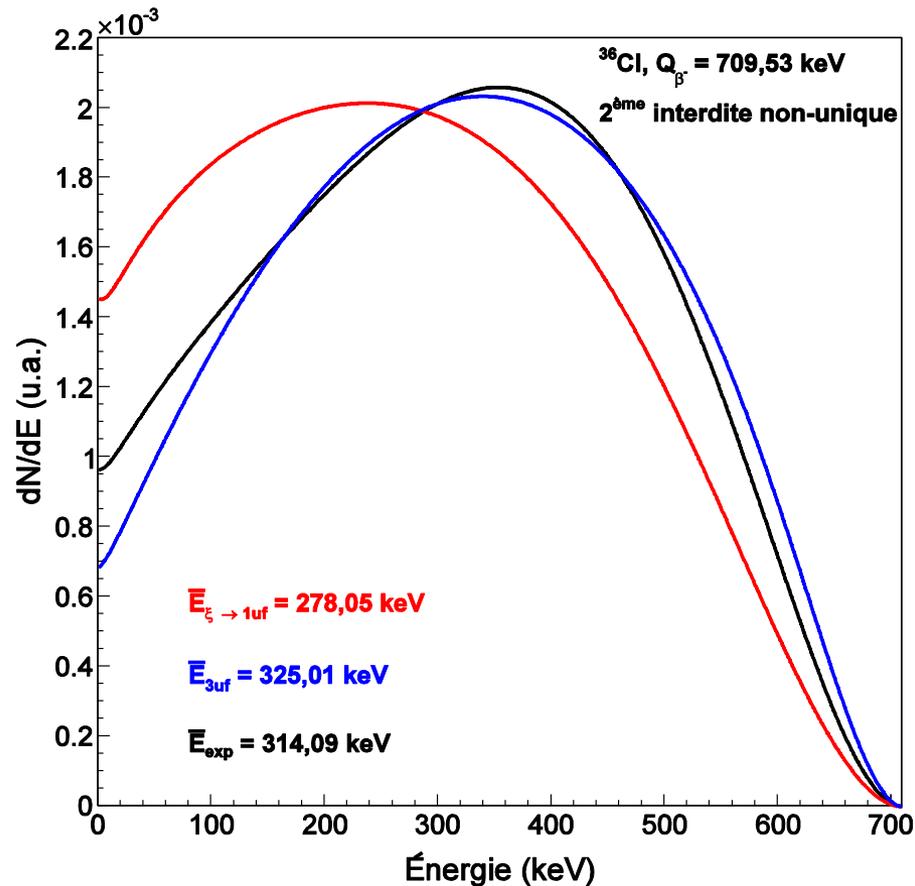


Écart de **4,6 %** sur l'énergie moyenne  
Impact important à basse énergie et sur  
l'ensemble du spectre



Calculée comme une **permise**, cette transition **n'est pas reproduite**

Écart de **20 % (!)** sur l'énergie moyenne



Calculée comme une **1<sup>ère</sup> interdite unique**, cette transition **n'est pas reproduite**

Écart de **14 % (!)** sur l'énergie moyenne

C'est mieux comme une **3<sup>ème</sup> interdite unique** (seulement **3,4 %** d'écart) → **justification ??**

Les effets atomiques d'**écranage** et d'**échange** ont une **influence majeure** sur la **forme** des **spectres bêta** à **basse énergie**.

Un **très bon accord** est **obtenu** avec les spectres expérimentaux si ces effets sont pris en compte dans les modèles.

La **partie atomique** est **sous contrôle** dans les transitions **permises**. Nous devons **généraliser** ces corrections aux **transitions interdites**.

L'approximation usuelle  $\lambda_k = 1$  est en général une **mauvaise approximation**.

L'approximation  $\xi$  n'est **valable** que pour ~ **50 %** des transitions **1<sup>ères</sup> interdites non-unique**s, et **fausse dans tous les autres cas**.

Nous prévoyons d'évaluer l'**influence** des **éléments de matrices nucléaires** afin de **calculer spécifiquement** les transitions **interdites non-unique**s.

→ Des **comparaisons** seront menées avec de **nouvelles mesures** effectuées au LNHB

Nous prévoyons également de nous intéresser aux transitions par **capture électronique**.

Dans le cadre du projet européen **MetroMRT** (*Metrology for Molecular Radiation Therapy*), un **workshop** est organisé les **21 et 22 mai prochains** sur Paris sur les codes de calculs :

- Spectres bêta
- Reconstruction d'images (imagerie quantitative)
- Simulations Monte-Carlo

L'accent sera mis sur la confiance que l'on peut avoir dans ces codes.

Le workshop est ouvert à tous (nombre de places limité).

Programme et inscriptions :

<http://www.nucleide.org/MetroMRT-2014/>