

Calcul empirique du rapport d'intensité (K_{β}/K_{α}) pour les éléments légers de ${}_{11}\text{Na}$ à ${}_{30}\text{Zn}$

Salim Daoudi^{1,2*}, Houria Rakhroukh¹, Yazid Kasri³, Abdelhalim Kahoul^{1,2}

¹ Department of Matter Sciences, Faculty of Sciences and Technology, Mohamed El Bachir El Ibrahim University, Bordj-Bou-Argeridj 34030, Algeria

² Laboratory of Materials Physics, Radiation and Nanostructures (LPMRN), University of Mohamed, El Bachir El Ibrahim, Bordj-Bou-Argeridj 34030, Algeria

³Theoretical Physics Laboratory, Physics Department, University of Bejaia, 06000 Bejaia, Algeria.

* Corresponding author: S. Daoudi . E-mail address: s.daoudi@univ-bba.dz

DOI: <https://doi.org/10.58452/jpcr.v1i2.25>

Article history

Received April 08, 2022

Accepted for publication July 14, 2022

Abstract

Dans ce travail, sur la base des données expérimentales publiées dans la littérature, nous proposons une fonction analytique qui permettra de déduire les valeurs empiriques du rapport d'intensité K_{β}/K_{α} pour des éléments de $Z = 11$ à 30 . Les résultats obtenus ont été présentés sous forme tabulaire et ont été comparés aux travaux théoriques, empiriques et expérimentaux.

Keywords: Rapport d'intensité K_{β}/K_{α} , calcul empirique, elements légers.

1. Introduction

Les rapports d'intensité K_{β}/K_{α} sont des quantités importantes en spectroscopie nucléaire et en physique atomique. Ces quantités ont été résumées dans plusieurs articles de synthèse dans différents domaines de recherche. L'étude de ces paramètres pour les éléments du tableau périodique a fait l'objet de plusieurs travaux expérimentaux et également des études théoriques, en vue de leurs applications pour l'analyse élémentaire non-destructive en physique médicale, chimie des surfaces, sciences de l'environnement et de l'industrie. Dans ce travail on a proposé une simple fonction analytique basée sur les données expérimentales compilées par Daoudi et al. [1] pour calculer les valeurs empiriques du rapport d'intensité K_{β}/K_{α} pour des éléments compris entre $Z = 11$ et $Z = 30$. Les résultats obtenus ont été présentés sous forme tabulaire et ont été comparés à des travaux théoriques, empiriques et expérimentaux. Les valeurs mesurées du rapport K_{β}/K_{α} d'intensité induites par les photons publiées dans la littérature de la période 1969 – 2018 (127 articles de 1118 valeurs) ont été présentées par Daoudi et al. [1] pour les éléments atomiques de ${}_{11}\text{Na}$ à ${}_{96}\text{Cm}$, un examen critique de ces données à l'aide des valeurs moyennes pondérées $(K_{\beta}/K_{\alpha})_w$ a été effectué pour chaque élément et des valeurs pondérées recommandées ont été proposés.

Le tableau du "meilleur" rapport du taux d'émission des rayons X (K_{β}/K_{α} , $K_{\beta 2}/K_{\alpha 1}$, $K_{\beta 1}/K_{\alpha 1}$, $(K_{\beta 1} + K_{\beta 3})/K_{\alpha 1}$, $K_{\beta 3}/K_{\beta 1}$ et $K_{\alpha 2}/K_{\alpha 1}$) a été présenté par Nelson et al. [2], en traçant des courbes sur la base des données expérimentales publiées à cette époque pour les éléments atomiques $20 \leq Z \leq 100$. Salam et al. [3] ont calculé les valeurs les plus probables du rapport d'émission de rayons X (K_{β}/K_{α} , $K_{\beta 3}/K_{\beta 1}$, $K_{\beta 5}/K_{\alpha 1}$, $K_{\beta 4}/K_{\alpha 1}$, $K_{\beta 2}/K_{\alpha 1}$, $K_{\beta 1}/K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 3}/K_{\alpha 1}$ et $K_{\alpha 2}/K_{\alpha 1}$) pour les éléments $12 \leq Z \leq 100$ par la

méthode d'interpolation des moindres carré. Scofield dans son célèbre article [4] a calculé les rapports d'émission des rayons X (K_{β}/K_{α} , $K_{\alpha 2}/K_{\alpha 1}$, $K_{\beta 3}/K_{\beta 1}$, $K_{\beta 1}/K_{\alpha 1}$, $K_{\beta 1}/K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 3}/K_{\alpha 1}$, $K_{\beta 1}/K_{\alpha 1}$, $K_{\beta 1}/K_{\beta 1}$ et $K_{\beta 5}/K_{\beta 1}$) basés sur la théorie Hartree-Slater- relativiste pour les éléments $5 \leq Z \leq 104$.

Les valeurs mesurées du rapport d'intensité K_{β}/K_{α} publiées dans la littérature de 1980 à 2011 (41 articles et 369 valeurs) ont été rapportées par Kahoul et al. [5] pour des éléments avec $16 \leq Z \leq 92$, ensuite les valeurs moyennes pondérées et non pondérées des données expérimentales ont été ajustées par une fonction analytique pour déduire de nouveaux rapports d'intensité K_{β}/K_{α} semi-empiriques et empiriques pour un certain nombre d'éléments allant de $Z = 16$ à 92.

2. Méthode

Les méthodes de calcul des sections efficace de production de rayon X, des rapports d'intensités, des probabilités de transfert entre les couches. Les rapports d'intensité radiatives, expérimentales et analytiques sont très importantes en raison du grand nombre de leurs applications dans divers domaines chimiques, physiques et médicales. Plusieurs études ont été réalisées pour mesurer et calculer ces valeurs sur tous les éléments du tableau périodique.

Premièrement, pour calculer empiriquement K_{β}/K_{α} pour les éléments de l'intervalle $11 \leq Z \leq 30$, nous avons présenté la quantité des données expérimentales réduites $\left((K_{\beta}/K_{\alpha})_{\text{exp}} / \left(1 - (K_{\beta}/K_{\alpha})_{\text{exp}} \right) \right)^{1/4}$ en fonction du numéro atomique Z , avec $(K_{\beta}/K_{\alpha})_{\text{exp}}$ sont les valeurs expérimentales tirées des différentes publications. Ces données expérimentales réduites en fonction de Z sont présentées sur la figure 1.

Deuxièmement, nous avons proposé une fonction analytique polynômiale pour interpoler cette quantité. La fonction analytique utilisée pour l'interpolation est la suivante:

$$\left(\frac{(K_{\beta}/K_{\alpha})_{\text{exp}}}{1 - (K_{\beta}/K_{\alpha})_{\text{exp}}} \right)^{1/4} = f(Z) = \sum_i b_i Z^i \quad (1)$$

Cette fonction est illustrée par une ligne continue sur la figure 1.

Pour déduire les valeurs empiriques du rapport d'intensité (K_{β}/K_{α}) pour les éléments de numéros atomique $11 \leq Z \leq 30$, nous avons utilisé la formule ci-dessous:

$$(K_{\beta}/K_{\alpha})_{\text{exp}} = \left(\frac{f^4(Z)}{1 + f^4(Z)} \right) \quad (2)$$

Avec $f(Z)$ est un polynôme déterminé par la méthode des moindres carrés:

$$f(Z) = -1,07447 + 0,19005 \times Z - 0,00709 \times Z^2 + 8,80055 \times 10^{-5} \times Z^3 \quad (3)$$

3. Résultats et discussion:

Le présent calcul des rapports d'intensités K_{β}/K_{α} empirique pour tous les éléments dans la région $11 \leq Z \leq 30$ est présenté dans le tableau 1. Les valeurs théoriques de Scofield [4], les résultats d'interpolation de Salam et al. [3], Kahoul et al. [5], Khan and Karimi [6], et les mesures expérimentales de Kararsiz [7], Chang et al. [8] and Öz [9], sont aussi ajoutés dans le même tableau. Les figures 2, 3 et 4 montrent la comparaison de nos résultats empiriques obtenues des rapports d'intensités avec ceux des valeurs théoriques, interpolés et expérimentales en fonction du nombre atomique Z .

Nous observons qu'en général, les rapports d'intensités calculés en utilisant la formule (3) sont conformes aux valeurs théoriques, interpolées et expérimentales des autres auteurs. La figure 2 montre que nos données diffèrent par un petit pourcentage en comparaison avec les valeurs théoriques de Scofield [4] dans la zone des éléments atomiques avec $18 \leq Z \leq 30$. L'écart entre les deux séries de valeurs varie entre 4.14% à 10.10%. Pour les éléments de $11 \leq Z \leq 17$, on observe un écart important qui atteint la valeur 73.31% pour $Z=11$.

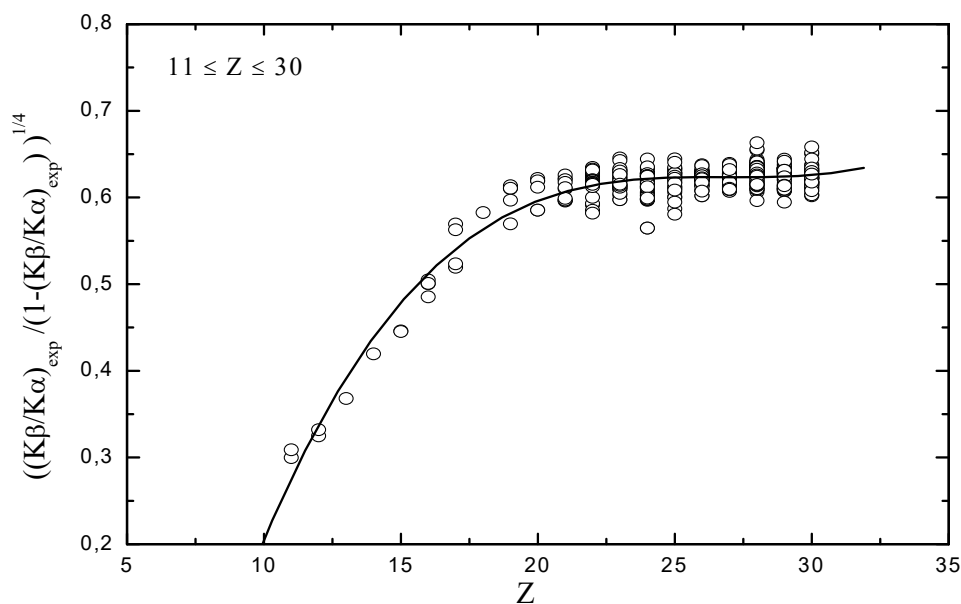


Figure 1: La distribution des valeurs expérimentales réduite des rapports d'intensité: $\left(\frac{(K_{\beta}/K_{\alpha})_{\text{exp}}}{1-(K_{\beta}/K_{\alpha})_{\text{exp}}}\right)^{1/4}$ pour les éléments $11 \leq Z \leq 30$ en fonction du numéro atomique Z . La courbe de l'interpolation est représenté en trait plein.

Table 1. calcul des rapports d'intensités (K_{β}/K_{α}) empirique pour des cibles de $11 \leq Z \leq 30$ Les valeurs théoriques, empiriques et expérimentales des autres auteurs sont aussi présentées dans le même tableau.

Z-élément	This Works		Other Works			Exp.
	Emp.	Theo.	Fitt. (empirique)			
		Scofield [4]	Salem et al. [3]	Khan and Karimi [6]	Kahoul et al. [5]	
Z=11, Na	0.0057	-	-	-	-	-
Z=12, Mg	0.0128	-	0.013	0.013	-	-
Z=13, Al	0.0229	0.00611	-	0.014	-	-
Z=14, Si	0.0355	0.01705	0.027	0.025	-	-
Z=15, P	0.0496	0.0309	-	0.042	-	0.0378 ^a
Z=16, S	0.0642	0.0467	0.059	0.063	0.0524	0.0609 ^a
Z=17, Cl	0.0782	0.0638	-	0.085	0.0693	0.0911 ^a
Z=18, Ar	0.0910	0.0818	0.105	0.110	0.0854	-
Z=19, K	0.1021	0.0956	-	0.120	0.0996	0.122 ^a
Z=20, Ca	0.1111	0.1065	0.128	0.127	0.1113	0.128 ^a
Z=21, Sc	0.1181	0.1106	-	0.131	0.1203	0.129 ^a
Z=22, Ti	0.1231	0.1137	0.134	0.131	0.1266	0.132 ^a
Z=23, V	0.1265	0.1161	-	0.132	0.1305	0.1479 ^b
Z=24, Cr	0.1284	0.1153	0.135	0.133	0.1323	-
Z=25, Mn	0.1292	0.1195	-	0.134	0.1325	0.132 ^c
Z=26, Fe	0.1293	0.1208	0.135	0.134	0.1317	0.1342 ^c
Z=27, Co	0.1291	0.1218	-	0.135	0.1304	0.137 ^c
Z=28, Ni	0.1289	0.1227	0.135	0.136	0.1291	0.138 ^c
Z=29, Cu	0.1292	0.1216	-	0.137	0.1283	0.1392 ^c
Z=30, Zn	0.1303	0.1241	0.138	0.139	0.1285	0.141 ^c

^aZararsiz [7]

^bChang et al. [8]

^cÖz [9]

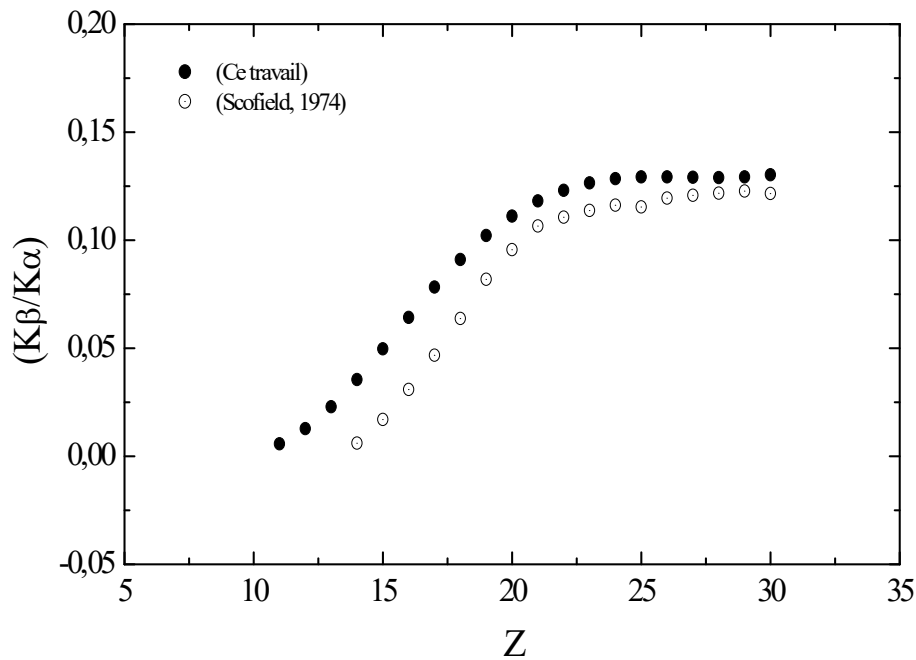


Figure 2 : Nos valeurs empiriques du rapport d'intensité K_{β}/K_{α} comparer aux valeurs théoriques de Scofield [4] en fonction du nombre atomique Z.

Dans la figure 3, on observe que les écarts entre nos valeurs empiriques et celles de Salem et al. [3] varies de 1.56 % jusqu'à 23.94% , mais avec les valeurs de Khan et Karimi [6], on a un ecart de 1.56% à 38.86%. Concernant les valeurs de Kahoul et al. [5] la variation de l'écart se trouve entre 0.15% à 18.38%.

Dans la dernière figure (figure 4) on remarque que nos valeurs empiriques du rapport d'intensités sont bien conformes aux valeurs expérimentales de Kararsiz [7], Chang et al. [8] and Öz [9]. L'accord varie de 5.14% à 23.79% pour Kararsiz [7], 16.91% pour Chang et al. [8] et de 2.16% à 8.21% pour Öz [9].

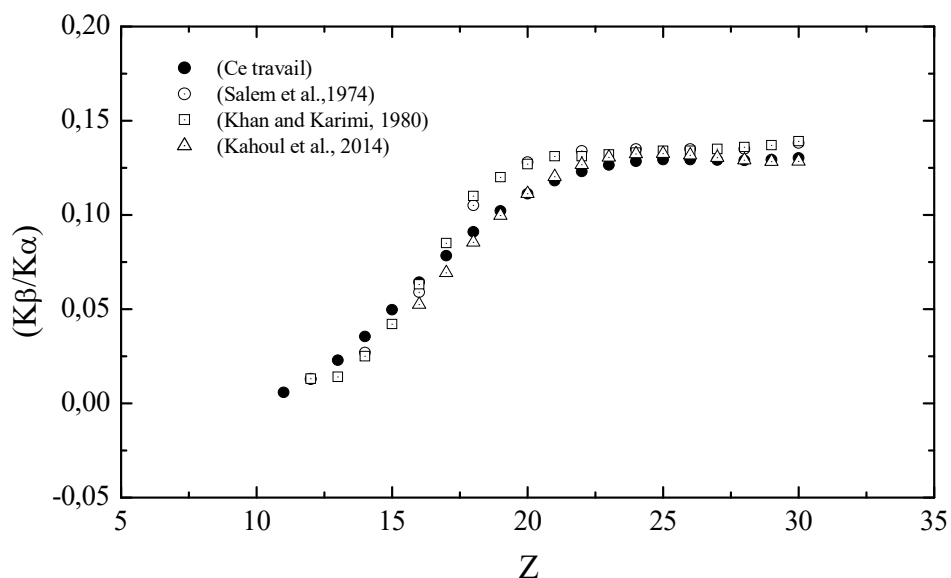


Figure 3 : Valeurs empiriques (présente étude) du rapport d'intensité K_{β} / K_{α} comparées aux résultats empiriques de Salam et al. [3], Kahoul et al. [5] et Khan and Karimi [6] en fonction du Z.

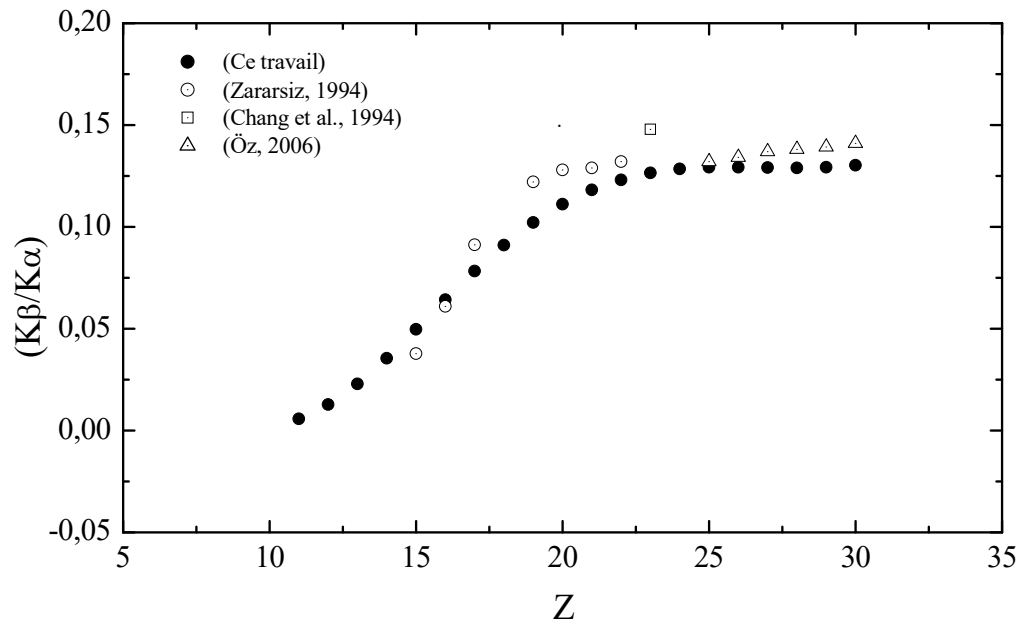


Figure 4 : Valeurs empiriques (présente étude) du rapport d'intensité K_{β}/K_{α} comparer aux valeurs expérimentales de Kararsiz [7], Chang et al. [8] and Öz [9] en fonction du nombre atomique Z.

4. Conclusion

Nous avons présenté dans ce travail les résultats du calcul empirique du rapport d'intensité (K_{β}/K_{α}) pour les éléments atomique légers excités par des photons. On a calculé le rapport d'intensité (K_{β}/K_{α}) pour les éléments de $11 \leq Z \leq 30$ à l'aide de la base de données des valeurs expérimentales compilées par différents auteurs. En se basant sur la méthode des moindres carrés, nous avons déterminé une fonction analytiques qui nous a ensuite permis de déduire des valeurs empiriques du rapport d'intensité (K_{β}/K_{α}). Les résultats obtenus ont été présentés dans un tableau ainsi qu'une étude comparative à des travaux théoriques, empiriques et expérimentaux d'autres auteurs.

References

- [1] S. Daoudi, A. Kahoul, N. Kup Aylikci, J.M. Sampaio, J.P. Marques, V. Aylikci, Y. Sahnoune, Y. Kasri, B. Deghfel. *At. Data Nucl. Data Tables* 132, 101308 (2020).
- [2] G.C. Nelson, B.G. Saunders, S. I. Salem. *At. Data Nucl. Data Tables* 1, 377-384 (1970)
- [3] S. I. Salem, S. L. Panossian, R. A. Krause. *At. Data Nucl. Data Tables* 14, 91-109 (1974).
- [4] J.H. Scofield. *Atom. Data Nucl. Data Tables* 14, 121-137(1974).
- [5] A.Kahoul, N. Kup Aylikci, V. Aylikci, B. Deghfel, Y.Kasri, M. Nekkab. *J. Radiat. Res. Appl. Sci.* 7, 346-362 (2014).
- [6] Md. R. Khan, M. Karimi. *X-ray spectrum.* 9, 32-35 (1980).
- [7] A. Zararsiz. *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 185, 193-197 (1994).
- [8] C. N. Chang, C. T. Chen, C. C. Yen, Y. H. Chiou, C. W. Wu, S. K. Su. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* 27, 5251-5256 (1994).
- [9] E. Öz. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 97, 41-50 (2006).