

33
29



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE CIENCIAS

MEDICION DE COEFICIENTES
MÁSICOS
DE ATENUACION
DE RAYOS-X.

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
F I S I C O
P R E S E N T A:
JAVIER RICARDO PEGUEROS VAZQUEZ

MEXICO, D.F.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

1990



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INDICE.

	PAGINA
RESUMEN.....	1
INTRODUCCION.....	1
CAPITULO PRIMERO.	
INTERACCION RAYOS-X CON MATERIA.....	7
1.1 EFECTO FOTOELECTRICO.....	8
1.2 PRODUCCION DE PARES.....	10
1.3 DISPERSION COMPTON.....	11
1.4 DISPERSION THOMSON.....	15
1.5 DISPERSION RAYLEIGH.....	17
CAPITULO SEGUNDO.	
COEFICIENTE MASICO DE ATENUACION DE RAYOS-X.	
2.1 COEFICIENTE MASICO DE ATENUACION DE RAYOS-X.....	21
2.2 CALCULO DE LA SECCION EFICAZ PARA EL EFECTO FOTOELECTRICO.....	27
2.3 CALCULO DE LA SECCION EFICAZ PARA EL EFECTO FOTOELECTRICO (ATOMO HIDROGENOIDE).....	30
2.4 CALCULO DE LA SECCION EFICAZ PARA LA PRODUCCION DE PARES.....	33
2.5 CALCULO DE LA SECCION EFICAZ PARA LA DISPERSION COMPTON.....	36
2.6 CALCULO DE LA SECCION EFICAZ PARA LA DISPERSION THOMSON.....	38
2.7 CALCULO DE LA SECCION EFICAZ PARA LA DISPERSION RAYLEIGH.....	46
CAPITULO TERCERO.	
MEDICION Y CALCULO DEL COEFICIENTE MASICO DE ATENUACION DE RAYOS-X.	
3.1 DISPOSITIVOS EXPERIMENTALES.....	47
3.2 CALCULOS TEORICOS Y SEMIEMPIRICOS DEL COEFICIENTE (μ/p).....	56
CAPITULO CUARTO.	
DISPOSITIVO EXPERIMENTAL.	
4.1 EXPERIMENTO DE TRANSMISION DE RAYOS-X Y FUENTE DE RAYOS-X.....	61
4.2 SISTEMA DE DETECCION DE RAYOS-X.....	66
4.3 CAMARA DE DISPERSION.....	71

CAPITULO QUINTO.

DESARROLLO EXPERIMENTAL Y RESULTADOS.

5.1 SELECCION DE MATERIALES ATENUADORES.....	75
5.2 COEFICIENTE (μ/ρ), VANADIO.....	77
5.3 COEFICIENTE (μ/ρ) HAFNIO.....	80
CONCLUSIONES.....	90
BIBLIOGRAFIA.....	92



RESUMEN DE TESIS.

El objetivo del trabajo de tesis a desarrollarse, es obtener valores experimentales de los coeficientes másicos de atenuación de rayos-x de los elementos Hafnio y Vanadio, dentro de los intervalos de energía de rayos-x de 6.92 KeV a 9.81 KeV para el Hafnio y de 4.508 KeV a 5.427 KeV para el Vanadio. Una aplicación de los coeficientes másicos de atenuación de rayos-x se presenta en la técnica de análisis PIXE. Primeramente, se presenta un análisis de los procesos físicos de interacción entre átomos y rayos-x cuando estos inciden en materia.

Posteriormente, son presentadas algunas de las diversas teorías que han sido desarrolladas para cuantificar los procesos físicos de interacción en términos del parámetro denominado sección eficaz.

Los valores experimentales obtenidos se comparan con las diversas teorías y expresiones semiempíricas de los coeficientes másicos de atenuación para evaluar la validez de cada una de éstas.

Existe un gran interés de obtener los valores experimentales correspondientes al Hafnio, debido a que en la literatura científica internacional no se han reportado valores experimentales del coeficiente másico de atenuación de rayos-x de este elemento. Para lograr el objetivo planteado, se ha diseñado un procedimiento experimental, el cual estará sujeto a una prueba de confiabilidad, determinando el coeficiente másico de atenuación de rayos-x del Vanadio, para el cual sí hay suficientes datos experimentales reportados. El trabajo experimental será llevado a cabo en el Laboratorio del Acelerador Van de Graaff de 0.7 MeV dentro de las instalaciones del Instituto de Física de la UNAM.

Básicamente, el procedimiento experimental consiste en transmitir un haz de rayos-x a través de las películas atenuadoras de Hafnio y Vanadio para medir las correspondientes intensidades del haz transmitido. Posteriormente, y en ausencia de las películas atenuadoras, se medirá la intensidad del haz sin atenuar. Como sistema de detección y cuantificación de la radiación se utilizará un detector de Si(Li) y un analizador multicanal. Haciendo uso de estas dos intensidades del haz de rayos-x, midiendo el espesor de las películas atenuadoras y aplicando la ley de Beer-Lambert de atenuación de rayos-x, se obtendrán los valores experimentales de los coeficientes respectivos.

Para la producción de rayos-x se empleará el acelerador electrostático Van de Graaff de 0.7 MeV. Este dispositivo hará incidir un haz de protones, sobre muestras de los elementos (Co, Zn, Ni, Cu, Hf, Ta y W) y (Ti, V, Cr), los cuales inducirán por ionización, las respectivas líneas K α y K β de rayos-x que cubren los intervalos de energía citados anteriormente.

INTRODUCCION

Todo desarrollo tecnológico creado por el ser humano, requiere de un conjunto de conocimientos básicos que describan el comportamiento y las relaciones existentes entre las diversas variables que dan origen a dichos avances. La ciencia en términos generales, constituye el método de estudio analítico que permite fundamentalmente, proporcionar las bases científicas en las cuales se sustente la comprensión y descripción de las leyes naturales que rigen el universo y que son, esencialmente, las que dan origen al avance tecnológico.

Este estudio de las leyes naturales, da origen a una división de la ciencia en diversas áreas científicas como lo son: Física, Química, Biología, Arqueología, Medicina, entre otras, de tal forma que nace una relación interdisciplinaria entre ellas, trayendo como consecuencia, que muchos de los avances tecnológicos o científicos que se logren en un área específica, se sustenten en conocimientos básicos desarrollados en otra área científica muy distinta.

Como resultado de estas relaciones interdisciplinarias, surge la necesidad de que cada área científica cree técnicas o métodos que sean aplicables a diversos campos de investigación.

Por supuesto, estas técnicas deben ser desarrolladas de tal modo que su aplicación sea lo más versátil posible y a la vez su aplicación sea directa y sencilla.

Dentro de la Física, como ciencia que se avoca al estudio de las leyes naturales, que rigen el micro y macrouniverso, han sido desarrolladas técnicas, a partir de principios físicos básicos, que han permitido no solo resolver problemas específicos de otros campos científicos, sino que también han ampliado el panorama de investigación de estas mismas.

Técnicas de análisis cuantitativo y cualitativo que hacen uso de la radiación denominada como rayos-x, son un claro ejemplo de los principios físicos básicos aplicados a la solución de

Problemas de análisis que se originan en los diversos campos de investigación.

Por citar sólo algunas de las muchas técnicas de análisis que emplean rayos-x, se pueden mencionar: la técnica de cristalografía por rayos-x, fluorescencia de rayos-x y actualmente una técnica muy versátil, conocida como PIXE (Emisión de rayos-X Inducida por Protones).

El principal campo de aplicación de la técnica conocida como cristalografía por rayos-x, se encuentra en el análisis del ordenamiento que guardan los átomos en la gran cantidad de estructuras cristalinas que presenta la materia en estado sólido.

Estas estructuras cristalinas, y su análisis, son de gran interés, debido a que muchas propiedades físicas y químicas de los materiales empleados en diversas aplicaciones industriales y de investigación, dependen del ordenamiento regular atómico.

Fundamentalmente, el proceso físico en que se basa la cristalografía por rayos-x consiste en irradiar la estructura cristalina con un haz de rayos-x de longitud de onda adecuada.

Estos rayos-x, si su longitud de onda es la apropiada, serán difractados por la red cristalina de acuerdo a las predicciones de la ley de Bragg de difracción de rayos-x. Esta ley de difracción, involucra un parámetro característico de la red cristalina y representa la separación entre planos atómicos que conforman la red cristalina, parámetro que está relacionado estrechamente con las propiedades del material.

Por lo que respecta a la técnica PIXE, el principio básico en que sustenta sus análisis, consiste en hacer incidir, por lo general, un haz de protones en el material de interés de tal forma que, por el proceso de ionización, estos protones excitan a los átomos del material para que posteriormente éstos emitan rayos-x característicos de los elementos que conforman el material, y que proporcionan la información de dichos elementos.

Como aplicaciones de esta técnica, podemos citar el análisis elemental que se ha efectuado en aerosoles conteniendo muestras de

aire atmosférico de las grandes ciudades. Por medio de los rayos-x característicos inducidos, de los diversos constituyentes de la muestra de aire se puede determinar si la atmósfera está impregnada de algún elemento dañino al organismo humano, como lo puede ser el plomo.

Un análisis semejante se puede efectuar con el aire inhalado y exhalado por el ser humano, para determinar la calidad del aire respirado y determinar no tan solo los elementos perjudiciales sino también sus concentraciones.

La técnica de fluorescencia de rayos-x (siglas en inglés XRF) se fundamenta, al igual que la técnica PIXE, en el proceso de ionización de los átomos, aunque en esta técnica es producido por fotones de rayos-x.

La intensidad de la radiación inducida en el material blanco depende de éste, y de la cantidad en que se halle presente, como consecuencia de las propiedades de emisión y absorción del material.

Debido a esta dependencia de la radiación inducida en el material blanco, así como también la propiedad de ser característicos de él, el método de fluorescencia de rayos-x permite efectuar análisis cuantitativos y cualitativos de la misma naturaleza a los que se realizan con la técnica PIXE. Incluso, esta analogía en la naturaleza de los análisis con ambas técnicas, las convierte en competidoras.

Las técnicas de rayos-x y sus aplicaciones mencionadas, están enfocadas principalmente a problemas sobre análisis de materiales inertes. Sin embargo, la radiación también tiene aplicaciones en un campo muy importante como lo es el área médica.

Sin lugar a dudas la aplicación más conocida de los rayos-x en medicina, es la obtención de radiografías que muestran órganos y huesos del cuerpo humano. Esta obtención de imágenes por medio de rayos-x, consiste en irradiar un área de interés del cuerpo del paciente, con un haz de rayos-x y grabar la imagen producida en

una película cubierta con papel negro. La imagen se produce, como aquellas que muestran huesos, debido a que los tejidos del cuerpo humano poseen un poder de absorción de rayos-x menor al que poseen aquellos. Debido a esto, los tejidos son más transparentes a los rayos-x que los huesos, y por tanto, se produce una sombra de éstos últimos que es finalmente la imagen obtenida.

Los rayos-x también son usados para obtener imágenes de órganos humanos que poseen un movimiento como los pulmones, el corazón y el estómago. La técnica que permite obtener este tipo de imágenes, se conoce como fluoroscopia. El proceso básico de esta técnica, consiste en irradiar el órgano de interés con un haz de rayos-x y las imágenes producidas pueden ser vistas directamente sobre una lámina cubierta con un material fluorescente, o una pantalla fluorescente. De este modo, se obtiene una secuencia del movimiento del órgano, lo cual permite, para efectos de diagnóstico, determinar alteraciones en el funcionamiento orgánico.

De la descripción de las diversas técnicas, y sus correspondientes aplicaciones, que hacen uso de los rayos-x se puede concluir que éste tipo de radiación siempre se ve sujeto a penetrar una cierta cantidad de materia.

Al profundizar en los fundamentos físicos de estas técnicas, se encuentra que la penetración de los rayos-x a través de la materia, es un parámetro que se debe cuantificar y manejar de una manera muy precisa, puesto que el grado de precisión y de confiabilidad de cada método depende estrechamente de este dominio.

Por tanto, se ha caracterizado a cada material con un parámetro característico, conocido como coeficiente másico de atenuación de rayos-x. Este coeficiente permite cuantificar el poder de penetración y la intensidad de un haz de rayos-x, de cierta energía, cuando atraviesa un material dado.

El coeficiente másico de atenuación de rayos-x, tiene como características principales su dependencia con la energía del haz

de rayos-x, del número atómico del material, así como de su densidad.

De lo antes expuesto, es inmediato el proveer métodos que permitan calcular los coeficientes másicos de atenuación de rayos-x para los diversos elementos químicos. Como respuesta a esta necesidad, han sido desarrollados cálculos teóricos y semiempíricos, así como trabajos experimentales, que produzcan coeficientes de atenuación de gran confiabilidad.

El presente trabajo de tesis, tiene como objetivos: desarrollar un procedimiento experimental para la medición de coeficientes másicos de atenuación de rayos-x, realizar medidas de este coeficiente y, como principal objetivo, hacer una evaluación de las diversas expresiones teóricas y semiempíricas, así como de las tablas existentes, que sirven para calcular valores del coeficiente de atenuación de rayos-x, que nos permita señalar aquellas expresiones que puedan ser empleadas en el análisis cuantitativo con la técnica PIXE.

Con base en lo anterior, este trabajo de tesis se dividió en cinco partes, cuyo contenido se expresa a continuación.

En el capítulo primero, se presenta un análisis de los principales procesos físicos de interacción que suceden cuando un haz de rayos-x interactúa con los átomos de un material. Posteriormente, el capítulo segundo presenta la definición del coeficiente másico de atenuación de rayos-x en términos de las secciones eficaces asociadas a cada uno de los principales procesos físicos de interacción. También son presentadas las principales características del coeficiente másico de atenuación de rayos-x, entre las que destacan su dependencia con la energía de los rayos-x y el número atómico del material atenuador. Como consecuencia de la relación entre el coeficiente y las secciones eficaces, se presentan un conjunto de métodos encaminados a calcular las secciones eficaces correspondientes a cada proceso físico de interacción.

El capítulo tercero tiene como finalidad mostrar un análisis cualitativo de los métodos experimentales, más generales, que se emplean en la medición de coeficientes másicos de atenuación de rayos-x, resaltando las ventajas y limitaciones de cada uno de ellos. También son analizados algunos trabajos teóricos y semiempíricos que han sido desarrollados para calcular valores del coeficiente de atenuación de rayos-x.

El dispositivo experimental se describe en detalle en el capítulo cuarto, donde también se explica el procedimiento para efectuar el experimento de transmisión de rayos-x que nos permite medir el coeficiente de atenuación de rayos-x.

Finalmente, en el capítulo cinco se justifica la selección de los elementos Hafnio y Vanadio para los cuales se midieron sus respectivos coeficientes de atenuación de rayos-x. Para cada uno de estos materiales se describe el tratamiento a que fueron sometidos los datos experimentales que se derivan de los respectivos experimentos de transmisión. Cada conjunto de valores del coeficiente de atenuación, son comparados con los resultados que se derivan de modelos matemáticos, permitiendo esta comparación determinar cual de estas expresiones es la más confiable para usarse en el análisis cuantitativo con la técnica PIXE.

CAPITULO PRIMERO

Cuando un haz de rayos-x, radiación electromagnética de energía E, en el intervalo $1 \text{ KeV} < E < 100 \text{ KeV}$, pasa a través de un material, una fracción o el total de su energía es absorbida por los átomos del material.

Un parámetro característico de cada material, que nos brinda información de qué tan eficaz o poco eficaz es éste para absorber la energía de los rayos-x, es el llamado coeficiente másico de atenuación de rayos-x.

Para definir con toda propiedad el coeficiente másico de atenuación de rayos-x y mencionar sus principales características, es necesario analizar los procesos físicos de interacción que acontecen entre los fotones que constituyen el haz de rayos-x y los átomos que forman el material. Los principales procesos son cinco:

- a) Efecto fotoeléctrico
- b) Producción de pares
- c) Dispersión Compton
- d) Dispersión Thomson
- e) Dispersión Rayleigh

Los procesos anteriores pueden clasificarse en los siguientes dos grupos, más generales:

- | | |
|--|---|
| 1.-Procesos de absorción total del fotón | Efecto fotoeléctrico
Producción de pares |
| 2.-Procesos de dispersión del fotón | Dispersión Compton
Dispersión Thomson
Dispersión Rayleigh |

Se mostrará posteriormente que los procesos pertenecientes al primer grupo se caracterizan porque el fotón de rayos-x transfiere toda su energía a los átomos del material, dando como resultado la desaparición del fotón.

Por otro lado, en los procesos del segundo grupo, el fotón incidente sólo transfiere una fracción de su energía al átomo. Por tanto, el fotón original desaparece, produciéndose un nuevo fotón con energía distinta a la del fotón original. A continuación se presenta un análisis de los procesos mencionados.

1.1 Efecto fotoeléctrico.

Para que se realice el efecto fotoeléctrico, la energía $h\nu$ del fotón incidente debe ser mayor a la energía de enlace electrón-núcleo, pues sólo de esta forma el electrón podrá desligarse del potencial coulombiano que lo une al núcleo. Cuando esto sucede, una parte de la energía del fotón es utilizada para expulsar al electrón de su capa electrónica que ocupa. A este electrón se le denomina fotoelectrón. El resto de la energía del fotón se transfiere como energía cinética al fotoelectrón. Por medio de estos procesos la energía del fotón incidente es totalmente absorbida y por tanto, el fotón incidente desaparece.

La absorción fotoeléctrica es con el átomo como un todo, y no puede llevarse a efecto con electrones libres.

Como consecuencia de la creación del fotoelectrón, es producida una vacante en la capa electrónica de la cual proviene. Esto trae como resultado que el átomo cambie de su estado inicial a un estado de mayor energía o estado excitado. Sin embargo, existe una tendencia natural del átomo a retornar a su estado original, esto es efectuado por varios procesos de desexcitación.

Uno de estos procesos es la emisión de rayos-x por parte del átomo. Consiste en que, una vez creada la vacante en la capa electrónica de la cual proviene el fotoelectrón, alguno de los electrones de capas electrónicas más externas a aquella en que se creó la vacante, ocupará a ésta, llevándose así a efecto la transición del estado excitado al estado inicial del átomo. La energía liberada en esta transición toma la forma de un fotón de rayos-x característico del elemento al cual pertenece el átomo. La energía E , de este fotón, es igual a la diferencia entre la energía E_1 de enlace correspondiente a la capa electrónica en la cual se creó la vacante y la energía E_2 de enlace correspondiente a la capa electrónica de la cual proviene el electrón que ocupa la vacante, es decir:

$$E = E_1 - E_2 \quad \text{ó} \quad h\nu = E_1 - E_2 \quad (1.1)$$

donde ν es la frecuencia del fotón emitido y h es la constante de Planck (6.6256×10^{-34} Js).

Por lo que se refiere al fotoelectrón, es expulsado del átomo con una energía cinética T dada por la ecuación (1.2)

$$T = h\nu - E \quad (1.2)$$

donde T = energía cinética del fotoelectrón

$h\nu$ = energía del fotón de rayos-x incidente

E = energía del fotón emitido

En adición al efecto fotoeléctrico, la vacante producida provoca un reordenamiento de los demás electrones en las diferentes capas electrónicas del átomo. Por tanto, uno o más fotones de rayos-x pueden ser también generados debido al reordenamiento por medio de transiciones de los electrones de capas externas a capas internas. La mayor parte de estos rayos-x son reabsorbidos por otros átomos del material vía el proceso fotoeléctrico antes mencionado. Algunos de estos fotones pueden tener la suficiente energía para ser capaces de emerger del material.

Existe otro proceso de desexcitación por el cual el átomo en estado excitado (o átomo ionizado) regresa a su estado inicial. Este proceso consiste en lo siguiente: la vacante creada en una capa electrónica interna del átomo es ocupada por un electrón de una capa electrónica más externa que la capa en la cual existe la vacante, y el átomo en vez de emitir un fotón de rayos-x, expulsa un electrón de alguna capa electrónica más externa a las anteriores. A este electrón, que emerge con cierta cantidad de energía cinética, se le conoce como electrón Auger. La cantidad de energía cinética T' , con que es expulsado este electrón está dada por la ecuación

$$T' = (E_1 - E_2) - E_3 \quad (1.3)$$

donde $(E_1 - E_2)$ es la pérdida de energía del electrón que ocupa la vacante. Siendo E_1 la energía de ligadura correspondiente a la capa electrónica donde se creó la vacante, E_2 la energía de ligadura de la capa de donde proviene el electrón ocupante. Y E_3

es la energía de ligadura que el electrón Auger poseía antes de ser expulsado de su capa electrónica.

Los electrones Auger tendrán, al igual que los fotones de rayos-x característicos emitidos en el efecto fotoeléctrico, energías características exclusivas del elemento químico al cual el átomo pertenece. Esto se debe a que todos los elementos poseen una estructura atómica particular que define, para los electrones de capas electrónicas, niveles de energía únicos y exclusivos del átomo correspondiente a dicho elemento.

El efecto fotoeléctrico es la forma predominante de interacción para rayos-x de energía relativamente baja, energías menores a 0.1 MeV . El efecto es también favorecido en materiales atenuadores de número atómico Z alto debido a que existe una cantidad mayor de electrones en las capas electrónicas.

Debido a esta dependencia de la absorción fotoeléctrica en términos del número atómico, se seleccionan materiales de alto número atómico como blindajes contra rayos-x.

1.2 Producción de pares.

Si la energía de los rayos-x, que pasan a través del material, excede por dos veces o más la energía de masa en reposo de un electrón, $m_0c^2 = 1.02 \text{ MeV}$, el proceso de producción de pares es energéticamente posible.

El proceso de producción de pares consiste en la producción de un par electrón-positrón* mediante la aniquilación de un fotón. Este proceso se puede escribir como

$$h\nu \longrightarrow e^- + e^+ \quad (1.4)$$

Para que en el proceso se conserve la energía y el momento, el proceso debe ocurrir cerca de un núcleo atómico, que por su acoplamiento con el par producido, tomará la energía y el momento necesarios para la conservación de ambas cantidades.

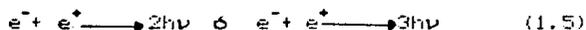
La producción de pares electrón-positrón es más intensa en los

* El positrón es una partícula que posee la misma masa y espín que el electrón, y su carga es en magnitud igual a la carga del electrón aunque de signo contrario.

elementos que tienen número atómico alto, como el plomo, ya que los núcleos atómicos de estos materiales provocan un acoplamiento electromagnético más intenso con el par electrón-positrón.

El par electrón-positrón puede formar un positronio, que es un sistema compuesto de un electrón y un positrón girando ambos alrededor del centro de masa del sistema, similar al sistema electrón-protrón del átomo de hidrógeno.

El positronio tiene una vida efímera a causa de la posibilidad de aniquilación del par conforme a las ecuaciones (1.5):



Si el sistema electrón-positrón se mueve con momento angular orbital nulo (como el estado fundamental $1s$) y sus espines correspondientes son antiparalelos (estado singulete 1S), las dos partículas se aniquilan produciendo dos fotones. La vida media del estado singulete es de 1.2×10^{-10} seg.

Si los espines correspondientes son paralelos (estado triplete 3S) la conservación del momento angular y otras reglas de selección relacionadas con la simetría del sistema prohíben la desintegración en dos fotones. En este caso, el par electrón-positrón se aniquila produciendo tres fotones. En ambos casos las energías de los fotones deben sumar 1.02 Mev, que es la energía total en reposo de las dos partículas que se aniquilan. La vida media del estado triplete es de 1.4×10^{-7} seg.

De lo anterior notamos que la producción de pares electrónicos es uno de los principales procesos que producen la absorción total de fotones de rayos-x de altas energías, en el intervalo de 1.02 Mev a 100 Mev, el exceso de energía es transferida al electrón y positrón como energía cinética.

1.3 Dispersión Compton.

El proceso de interacción de dispersión Compton se lleva a cabo entre el fotón de rayos-x incidente y un electrón en el material.

Este proceso es el mecanismo de interacción dominante, para rayos-x de energías en el intervalo de 0.1 Mev a 1 Mev.

En la dispersión Compton, el fotón de rayos-x es desviado un ángulo θ con respecto a su dirección original. El fotón transfiere una fracción de su energía al electrón, donde se hace la suposición de que el electrón está libre y en reposo, el cual es entonces puesto en movimiento. Debido a que todos los ángulos de dispersión son posibles, la energía transferida al electrón puede variar de cero a una gran parte de la energía del fotón.

La expresión que relaciona la transferencia de energía y el ángulo de dispersión puede derivarse fácilmente escribiendo ecuaciones simultáneas para la conservación de la energía y momento, antes y después de la dispersión. Usando los símbolos definidos en la fig. 1.1 podemos escribir: llamemos E y E' a la energía del fotón antes y después de la dispersión y $p=E/c$ y $p'=E'/c$ a los valores correspondientes del momento.

Si p_e es el momento del electrón después del choque, los principios de conservación de la energía y el momento producen las ecuaciones

$$\vec{p} = \vec{p}' + \vec{p}_e \quad (1.6)$$

$$E + m_0c^2 = E' + c(m_0^2c^2 + p_e^2)^{1/2} \quad (1.7)$$

De la ecuación (1.6) obtenemos $\vec{p}_e = \vec{p} - \vec{p}'$. Efectuando el producto escalar $\vec{p}_e \cdot \vec{p}_e$ obtenemos

$$p_e^2 = p^2 + p'^2 - 2\vec{p}\vec{p}' = (1/c^2)(E^2 - E'^2 - 2EE'\cos\theta) \quad (1.8)$$

donde θ es el ángulo que se ha dispersado el fotón incidente.

Despejando p_e^2 de la ecuación (1.7) encontramos:

$$p_e^2 = (E + m_0c^2 - E')^2/c^2 - m_0c^2 \quad (1.9)$$

Igualando las ecuaciones (1.8) y (1.9) y cancelando los términos comunes, obtenemos

$E - E' = (EE'/m_0c^2)(1 - \cos\theta)$ y dividiendo por EE' se transforma en

$$\frac{1}{E'} - \frac{1}{E} = (1/m_0c^2)(1 - \cos\theta) \quad (1.10)$$

Recordando que $E = h\nu$ y $E' = h\nu'$ la ecuación (1.10) se convierte en

$$(1/h\nu') - (1/h\nu) = (1/m_0c^2)(1 - \cos\theta) \quad (1.11)$$

o

$$(1/\nu') - (1/\nu) = (h/m_0c^2)(1 - \cos\theta) \quad (1.12)$$

donde

ν' = frecuencia del fotón dispersado

ν = frecuencia del fotón incidente

θ = ángulo de dispersión del fotón incidente

$\lambda_c = (h/mec)$ es la longitud de onda Compton del electrón

($\lambda_c = 2.42 \times 10^{-12} \text{ m}$)

De la ecuación (1.11) podemos obtener la energía E' del fotón dispersado

$$E' = h\nu [1 + (h\nu/mec^2)(1 - \cos\theta)]^{-1} \quad (1.13)$$

Para pequeños ángulos θ de dispersión, observamos de la ecuación (1.13), que el fotón transfiere una pequeña cantidad de energía al electrón.

El fotón dispersado siempre retiene algo de la energía del fotón incidente aún en el caso extremo $\theta = \pi$ (colisión frontal).

La energía cinética E_e transferida al electrón está dada por la ecuación (1.14).

$$E_e = h\nu - h\nu' = h\nu (h\nu/mec^2)(1 - \cos\theta) [1 + (h\nu/mec^2)(1 - \cos\theta)]^{-1} \quad (1.14)$$

Dos casos extremos de dispersión pueden ser identificados.

Caso a). Ángulo θ de dispersión mínima ($\theta = 0$).

En este caso las ecuaciones (1.13) y (1.14) predicen que $h\nu' = h\nu$ y $E_e = 0$.

El electrón dispersor adquiere una energía cinética nula y el fotón dispersado resulta con una energía igual a la energía del fotón incidente. Por lo anterior se dice que no ha habido dispersión Compton.

Caso b). Ángulo θ de dispersión máxima ($\theta = \pi$).

El tipo de colisión entre fotón y electrón es frontal. El fotón de rayos-x incidente es retrodispersado en la dirección de incidencia, mientras que el electrón dispersor es desplazado a lo largo de la dirección de incidencia.

Este caso representa la situación de energía máxima que puede ser transferida al electrón en la interacción Compton. Las ecuaciones (1.13) y (1.14) evaluadas en $\theta = \pi$ producen:

$$E'_{\min} = h\nu'_{\theta=\pi} = h\nu (1 + 2h\nu/mec^2)^{-1} \quad (1.15)$$

$$E_{\text{máx}} = h\nu(2h\nu/m_0c^2)^{-1} \quad (1.16)$$

Debido a que el fotón puede ser dispersado en cualquier ángulo en el intervalo $[0, \pi]$, se obtiene un continuo de energías transferidas al electrón dispersor.

La diferencia entre el máximo de la energía transferida al electrón dispersor y la energía del fotón de rayos-x incidente está dada por

$$E_c = h\nu - E_{\text{máx}} = h\nu(1 + 2h\nu/m_0c^2)^{-1} \quad (1.17)$$

En el caso límite en que la energía del fotón incidente es muy grande, esta diferencia de energía tiende hacia un valor constante dado por $E_c = (m_0c^2/2) = 0.256$ Mev.

El análisis precedente está basado en la suposición de que la dispersión Compton involucra electrones que están inicialmente libres o sin enlace a algún átomo. Lo anterior es equivalente a decir que la energía de un cuanto de rayos-x es grande respecto a la energía de amarre o enlace de los electrones atómicos.

La probabilidad de dispersión Compton por átomo del material atenuador, depende del número de electrones disponibles como blancos dispersores y por tanto se incrementa linealmente con el número atómico del material.

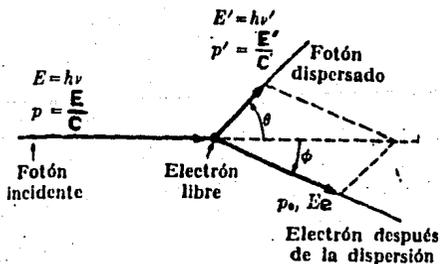


Fig. 1.1. Geometría y relaciones de energía y momento en la dispersión Compton.

1.4 Dispersión Thomson.

Se presenta en seguida un análisis clásico electromagnético del proceso de dispersión, de rayos-x por electrones, hecho por Thomson. Este análisis se basa en las siguientes tres hipótesis:

1.- La longitud de onda de los rayos-x es pequeña comparada con las dimensiones características de los átomos:

$$\lambda \ll 10^{-8} \text{ cm} \quad (1.18)$$

2.- La energía de un cuanto de rayos-x es grande respecto a la energía de enlace ($E.E$) de los electrones atómicos:

$$h\nu \gg E.E \quad (1.19)$$

3.- La energía de un cuanto de rayos-x es pequeña en comparación con la energía de masa en reposo de un electrón:

$$h\nu \ll mc^2 \quad (1.20)$$

La primera hipótesis implica que la relación de la fase de los rayos-x que dispersan los electrones de átomos distintos o del mismo átomo serán básicamente al azar e incoherentes. Esta hipótesis excluye los efectos de interferencia entre diferentes átomos al igual que los efectos de interferencia dentro del mismo átomo. Si esta hipótesis es válida, la interacción de cualquier electrón con los rayos-x es independiente de las interacciones de todos los demás electrones del material y, por tanto, lo único necesario es analizar una de estas interacciones. La segunda hipótesis permite ignorar los enlaces de los electrones con los átomos y considerarlos libres. La última hipótesis permite ignorar el comportamiento cuántico de los rayos-x que se manifiestan en la dispersión Compton.

En este análisis se considera que los rayos-x son un haz de ondas electromagnéticas incidentes sobre un electrón libre. La interacción de los rayos-x con el electrón se debe, por tanto, a la interacción de su carga eléctrica con el campo eléctrico \vec{E} , de las ondas incidentes, que oscila sinusoidalmente. La interacción con el campo magnético es despreciable.

El vector \vec{E} describe el campo eléctrico a que se ve sujeto el

electrón, este campo eléctrico produce una fuerza \vec{F} sobre el electrón dada por el vector

$$\vec{F} = -e\vec{E} \quad (1.21)$$

y una aceleración

$$\vec{a} = \vec{F}/m_e = -e\vec{E}/m_e \quad (1.22)$$

donde \vec{E} , \vec{F} y \vec{a} oscilan sinusoidalmente con la frecuencia ν de las ondas electromagnéticas incidentes. Bajo la influencia de la aceleración \vec{a} la posición \vec{r} del electrón oscilará sinusoidalmente con la frecuencia ν , y el electrón emitirá ondas electromagnéticas de la misma frecuencia que las ondas incidentes en fase con ellas.

La energía emitida por estas ondas es proporcionada por las ondas electromagnéticas incidentes. Por tanto, el electrón absorbe energía del haz de rayos-x y la dispersa en todas direcciones.

La rapidez de emisión de energía de un átomo acelerado está dada por la ecuación

$$R = (2/3)(Ze a)^2/c^3 \quad (1.23)$$

donde Ze = carga del núcleo atómico

a = aceleración del átomo

e = carga del electrón

c = velocidad de la luz

la correspondiente rapidez de emisión de energía del electrón se obtiene haciendo $Z=1$ en la ec. (1.23)

$$R_e = (2/3)(ea)^2/c^3 \quad (1.24)$$

Al sustituir el valor de la aceleración dado por la ecuación (1.22) en la ecuación (1.24) obtenemos

$$R_e = (2/3)e^4 E^2 / m_e^2 c^3 \quad (1.25)$$

Debido a que el campo eléctrico E cambia constantemente con el tiempo, lo mismo hará el valor R_e , debido a esto es conveniente considerar el promedio temporal \bar{R}_e :

$$\bar{R}_e = (2/3)e^4 \bar{E}^2 / m_e^2 c^3 \quad (1.26)$$

El valor de \bar{R}_e representa la energía promedio emitida en todas las direcciones, en forma de radiación electromagnética, y se define esta cantidad como la intensidad de la radiación dispersada.

Se evaluará a continuación \bar{I} , la intensidad de la radiación incidente.

Se define esta cantidad como la energía promedio que porta el haz por segundo, a través de un centímetro cuadrado, con orientación normal en relación con la dirección del haz. La ecuación (1.27) indica la relación entre \bar{I} y la densidad promedio de energía \bar{p} asociada al electrón acelerado

$$\bar{I} = \bar{p}c \quad (1.27)$$

la teoría electromagnética predice, para una carga acelerada, que:

$$\bar{p} = \bar{E}^2/4\pi \quad (1.28)$$

por tanto \bar{I} puede expresarse como:

$$\bar{I} = c\bar{E}^2/4\pi \quad (1.29)$$

Comparando las ecuaciones (1.26) y (1.29) se observa que tanto \bar{R}_e como \bar{I} son proporcionales a \bar{E}^2 . Por tanto ambas cantidades son proporcionales entre si, es decir,

$$\bar{R}_e = \sigma_{Th} \bar{I} \quad (1.30)$$

donde la constante de proporcionalidad es σ_{Th} . Evaluando esta constante de las ecuaciones (1.26) y (1.29) obtenemos

$$\sigma_{Th} = (8\pi/3) (e^2/m_0c^2)^2 = 6.66 \times 10^{-25} \text{ cm}^2 \quad (1.31)$$

La cantidad σ_{Th} es llamada sección del electrón de Thomson. Por medio de la ecuación (1.30), esta sección indica la fracción de la intensidad de un haz de rayos-x que un electrón libre dispersa en todas las direcciones debido al proceso antes analizado, conocido como dispersión de Thomson.

La pequeñez de la sección eficaz σ_{Th} en comparación con el tamaño de un átomo es la razón de que los rayos-x sean muy penetrantes.

En este análisis solo se describió la dispersión Thomson de rayos-x por un electrón, sin embargo el proceso debe tratarse de una manera más realista considerando la dispersión de rayos-x por el átomo. Esto se expondrá más adelante.

1.5 Dispersión de Rayleigh.

Uno más de los procesos de interacción que se manifiesta cuando radiación electromagnética incide sobre los átomos de un material, es el conocido como dispersión de Rayleigh. En este proceso la radiación electromagnética incidente posee una longitud de onda λ , que es más grande en comparación con las dimensiones

atómicas. Es por tanto, una situación opuesta a la de dispersión Thomson, en la cual la longitud de onda de la radiación es mucho más pequeña que las dimensiones atómicas. Por tanto, se puede decir que, en una aproximación burda, los rayos-x, cuya longitud de onda sean menores a un angstrom, no sufrirán dispersión Rayleigh. Sin embargo, se presenta a continuación la descripción cualitativa del proceso.

Considérese como modelo del átomo un núcleo positivo fijo con una nube esférica uniforme circundante de electrones. Esta nube esférica de radio R_0 posee una carga total $-Ze$ donde Z es el número atómico del átomo correspondiente y además se considera al núcleo como puntual.

Si una onda plana, con longitud de onda mayor que las dimensiones atómicas, de un campo eléctrico $R_0 E_0 \exp(i\omega t) \hat{i}_x$ incide sobre un átomo, induce sobre éste un momento dipolar eléctrico con la consiguiente emisión de radiación por parte del átomo. La frecuencia de la radiación emitida es igual a la frecuencia de la radiación incidente y la potencia de dispersión asociada es perpendicular al momento dipolar inducido.

Aplicando la segunda ley de Newton a la nube cargada de masa m bajo la influencia del campo eléctrico incidente, obtenemos:

$$d^2x/dt^2 + \omega_0^2 x = R_0 [ZeE_0 \exp(i\omega t)] / m \quad (1.32)$$

$$\text{con } \omega_0^2 = (Z^2 e^2 / 4\pi\epsilon_0 m R_0^2)$$

la solución a la ecuación diferencial (1.32) está dada por:

$$x(t) = (ZeE_0/m) (\omega_0 - \omega)^{-1} R_0 [\exp(i\omega t)] \quad (1.33)$$

donde $x(t)$ representa el desplazamiento instantáneo del dipolo que se forma en presencia del campo eléctrico E_0 . Por tanto, el momento dipolar eléctrico inducido es:

$$\vec{p} = Ze\vec{x} = (Ze)^2 (E_0/m) (\omega_0^2 - \omega^2)^{-1} \quad (1.34)$$

donde se han despreciado los efectos de amortiguamiento.

Si suponemos que el átomo bajo la acción del campo E_0 forma un dipolo eléctrico puntual entonces, la potencia total de tiempo promedio, \bar{P} , se encuentra a partir de:

$$\bar{P} = \omega^4 \langle \vec{p} \rangle^2 / 12\pi c^2 \text{ donde } \eta = (\mu/\epsilon) \quad (\eta = 120\pi \text{ en el espacio libre})$$

Por tanto,

$$\bar{P} = \omega^4 \eta (Z^2 e^2 E_0 / m)^2 (12\pi c (\omega_0^2 - \omega^2)^2)^{-1} \quad (1.35)$$

Para calcular aproximadamente ω_0 , utilizamos el radio R_0 de la nube electrónica, e igualamos la energía almacenada con la fórmula relativista de Einstein que relaciona la masa con la energía:

$$(3/5) (Ze)^2 / 4\pi\epsilon_0 R_0 = mc^2 \text{ de donde } R_0 = (3/5) (Ze)^2 / 4\pi\epsilon_0 mc^2$$

Sustituyendo en la ec. (1.32) el valor de R_0 , obtenemos:

$$\omega_0 = (5/3)^{1/2} 20\pi\epsilon_0 mc^5 / 3 (Ze)^{3/2})^{-1}$$

$$\omega_0 = (5/3)^{1/2} 20\pi\epsilon_0 2m_0 c^5 / 3 (Ze)^2 = 2.29 \times 10^{23} / 2 \text{ rad/s}$$

que es mucho mayor que las frecuencias luminosas ($\omega = 10^8$ rad/s) de tal forma que la ec. (1.35) se convierte en:

$$\text{Lim } \bar{P} = (\eta / 12\pi) (Ze^2 E_0 \omega^2 / m_0 c \omega_0^2)^2 = k \omega^4 \quad (1.36)$$

$$\omega_0 \gg \omega$$

Este resultado fue deducido por lord Rayleigh e indica que la potencia dispersada por un átomo, en presencia de un campo eléctrico externo, es proporcional a ω^4 , la frecuencia de la radiación incidente.

Al analizar la atenuación de un haz de rayos-x que atraviesa un material, ha sido necesario describir los procesos de interacción entre rayos-x y los átomos del material.

Aunque si bien, se han mencionado cinco procesos principales de interacción, este grupo de procesos es objeto de una discriminación enfocada a la importancia que tienen dentro del proceso de atenuación de rayos-x.

De esta discriminación, resulta que los procesos de dispersión Thomson y dispersión Rayleigh, son, generalmente, excluidos del proceso de atenuación, debido a que en estos dos procesos de dispersión, la cantidad de energía que el haz de rayos-x transfiere a los átomos, es insignificante. Sin embargo, esta exclusión en algunas ocasiones no podrá hacerse efectiva, dependiendo si la naturaleza del experimento y/o cálculos teóricos encaminados a la descripción del proceso de atenuación, lo permita.

Independientemente de que sean o no excluidos los procesos de dispersión Thomson y Rayleigh, siempre se consideran como procesos fundamentales de atenuación: el proceso de efecto

fotoeléctrico, dispersión Compton y producción de pares. La importancia relativa de estos tres procesos para diferentes materiales atenuadores y energías de rayos-x (y gamma) se ilustra en la siguiente figura (1.2). Refiriéndonos a la figura 1.2, la curva I representa los puntos (Z,E) que determinan los elementos y energías, para los cuales el efecto fotoeléctrico y la dispersión Compton tienen la misma probabilidad de ocurrencia. Análogamente la curva II señala los elementos y energías para los cuales los procesos de producción de pares y dispersión Compton son igualmente probables.

Estas dos líneas definen las tres regiones A1, A2 y A3, indicando el predominio del efecto fotoeléctrico, dispersión Compton y producción de pares, respectivamente.

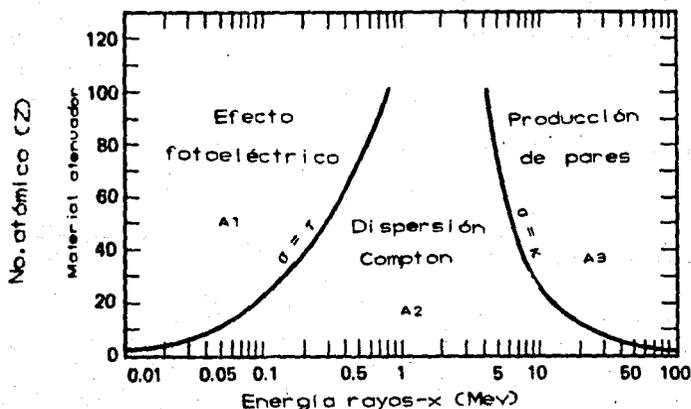


Fig. 1. 2. Importancia relativa de los tres principales procesos de interacción. (Tomado de la referencia (1)).

CAPITULO SEGUNDO

Hemos visto que al incidir un haz de rayos-x, en un determinado material, interactúa con los átomos de éste por cinco procesos físicos principales: efecto fotoeléctrico, producción de pares, dispersión Compton, dispersión Thomson y dispersión Rayleigh. Por tanto, es conveniente asignar una probabilidad de ocurrencia por unidad de longitud de trayectoria a través del material atenuador, a cada uno de los procesos de interacción. Cada probabilidad se asigna como sigue: τ para el efecto fotoeléctrico, k al proceso de producción de pares, ϕ_c la correspondiente a la dispersión Compton, ϕ_{Th} y ϕ_R para la dispersión Thomson y Rayleigh respectivamente. Todas estas probabilidades tienen unidades de (longitud)⁻¹. En base a estas probabilidades se define el coeficiente de atenuación líneal y el coeficiente másico de atenuación de rayos-x.

2.1 Coeficiente másico de atenuación de rayos-x.

Se define el coeficiente de atenuación líneal de rayos-x, como $\mu = (\tau + k + \phi_c + \phi_{Th} + \phi_R)$ (longitud)⁻¹ (2.1)

y representa simplemente, la probabilidad por unidad de longitud de trayectoria de que un fotón de rayos-x sea extraído del haz que pasa a través del material. Por tanto, el coeficiente de atenuación líneal μ , es una medida de la efectividad del material para atenuar los rayos-x. Se dice que un material es un buen atenuador si su coeficiente μ es grande, o mal atenuador si μ es pequeño. El coeficiente μ asociado a un material en particular, es único y exclusivo de éste. Existe una fuerte dependencia del coeficiente en términos de las características del material como son: el número atómico y densidad, así como de la energía de los rayos-x. Esta dependencia es natural debido a que los procesos de interacción átomos-rayos-x son intensificados o atenuados por el número atómico y la energía de la radiación.

La unidad más usual asignada al coeficiente de atenuación líneal es (cm)⁻¹.

Una expresión analítica que describa la atenuación de los rayos-x por el espesor del material puede ser deducida del

siguiente experimento ideal (figura 2.1).

Un haz monoenergético de rayos-x de intensidad I_0 , es colimado para formar un haz angosto, el cual viaja a través del material, de espesor x variable y espesor total t . Esto da como resultado un haz de rayos-x atenuado de intensidad I que es registrado por el detector. Refiriéndonos a la figura 2.1, el número de fotones en el haz que emerge de la lámina de espesor $x+dx$ es $I(x+dx)$, que es igual al número incidente de rayos-x $I(x)$, menos el número que se ha perdido en el espesor dx , es decir:

$I(x+dx) = I(x) - \mu I(x) dx$ por tanto $I(x+dx) - I(x) = -\mu I(x) dx$ y haciendo la suposición de que dx es infinitesimal podemos escribir

$$dI(x) = I(x+dx) - I(x)$$

$$dI(x) = -\mu I(x) dx$$

$dI(x)/I(x) = -\mu dx$ por tanto, la atenuación total por el espesor t del material está dada por la ley de Beer-Lambert:

$$I(t) = I_0 \exp(-\mu t) \quad (2.2)$$

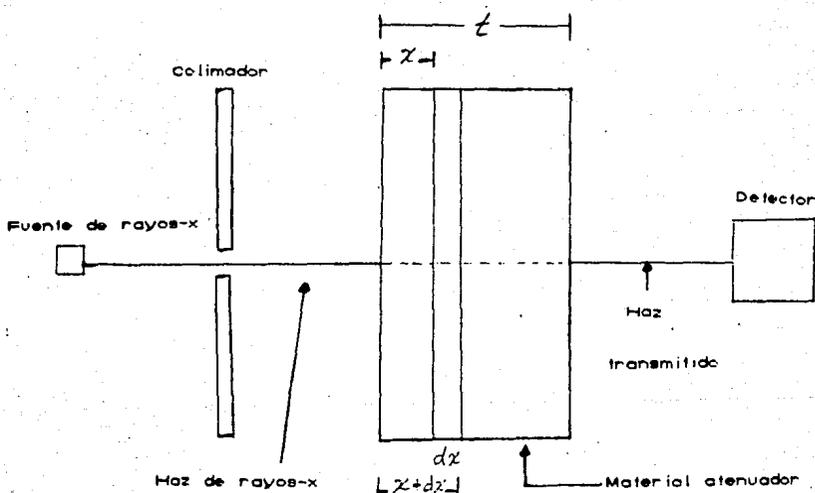


Fig. 2.1. Experimento de atenuación de rayos-x.

Por tanto, la intensidad I_0 de rayos-x, disminuye exponencialmente con el espesor del material atenuador como se ilustra en la fig. 2.2.

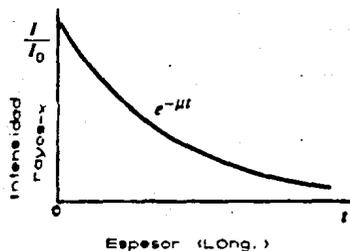


Fig. 2.2. Curva de disminución exponencial de un haz de rayos-x de intensidad I_0 , atravesando un material de espesor t .

Los fotones de rayos-x pueden ser caracterizados por su trayectoria libre promedio \bar{x} , definida como la distancia promedio recorrida en el material atenuador antes de que un proceso de interacción se lleve a efecto. El valor de \bar{x} se obtiene de la siguiente ecuación

$$\bar{x} = \left(\int_0^{\infty} x \exp(-\mu x) dx \right) / \left(\int_0^{\infty} \exp(-\mu x) dx \right) = 1/\mu \quad (2.3)$$

y como vemos es simplemente el recíproco del coeficiente de atenuación lineal. Valores característicos de \bar{x} están comprendidos en el intervalo de algunos milímetros hasta decímetros en materiales sólidos para energías características de rayos-x.

El uso del coeficiente de atenuación lineal es limitado debido a que varía con la densidad del material atenuador, aún cuando el material sea el mismo. Por tanto, el coeficiente másico de atenuación de rayos-x, que es de uso más difundido, se define como:

$$\text{Coeficiente másico de atenuación} = \mu/\rho \quad (2.4)$$

donde ρ , representa la densidad del material atenuador. Para fotones de rayos-x de una energía determinada, el coeficiente másico de atenuación no cambia con el estado físico de un material dado. Por ejemplo, el coeficiente másico de atenuación correspondiente al agua es el mismo, independientemente de que esta esté en forma líquida o gaseosa.

Las unidades correspondientes, y más usadas, del coeficiente másico de atenuación son, con la densidad expresada en gr/cm^3 , cm^2/gr .

La ley de Beer-Lambert de atenuación toma la forma, en términos de μ/p .

$$I = I_0 \exp[-(\mu/p)pt] \quad (2.5)$$

donde pt es conocido como la densidad de masa del atenuador y le corresponden las unidades gr/cm^2 .

En el caso de un material constituido por una combinación de dos o más elementos, el coeficiente másico de atenuación se calcula por

$$(\mu/p)_{\text{combinación}} = \sum_i (w_i (\mu/p)_i) \quad (2.6)$$

donde los factores w_i representan la abundancia relativa en peso de cada uno de los i elementos y $(\mu/p)_i$ el coeficiente másico de atenuación del i -ésimo elemento que forma la combinación.

Junto con la definición del coeficiente másico de atenuación, se introduce un nuevo parámetro conocido como sección eficaz total por átomo y denotado por el símbolo σ . Este parámetro especifica la probabilidad por átomo del material, de que un fotón sea absorbido o dispersado por alguno de los cinco procesos de interacción antes mencionados.

La sección eficaz total por átomo σ , es simplemente la suma de las secciones eficaces (o probabilidades) por átomo asociadas a los cinco procesos de interacción, es decir

$$\sigma = \sigma_{\text{Ef}} + \sigma_{\text{pp}} + \sigma_{\text{c}} + \sigma_{\text{Th}} + \sigma_{\text{R}} \quad (2.7)$$

en donde cada término corresponde a:

σ_{Ef}	sección eficaz por átomo asociada al efecto fotoeléctrico
σ_{pp}	" " " " " " a producción de pares
σ_{c}	" " " " " " a dispersión Compton
σ_{Th}	" " " " " " a dispersión Thomson
σ_{R}	U U U U U U a dispersión Rayleigh

Todas las cantidades anteriores están expresadas en unidades de (área), sin embargo la unidad de uso más difundido es el barn, 1 barn = 10^{-28} m^2 .

La relación analítica entre el coeficiente μ/p y la sección eficaz total por átomo está expresada por la ecuación:

$$(\mu/p) = \sigma (NA/M) \quad (\text{cm}^2/\text{gr}) \quad (2.8)$$

ó

$$(\mu/p) = (NA/M) [\sigma_{\text{Ef}} + \sigma_{\text{pp}} + \sigma_{\text{C}} + \sigma_{\text{Th}} + \sigma_{\text{R}}] \quad (2.9)$$

donde $[\sigma]$ cm^2

NA = número de Avogrado (6.0025×10^{23} átomos/mol)

M = peso atómico del material atenuador, expresado en (gr/mol)

Como se verá más adelante, la sección eficaz σ , tiene una fuerte dependencia en términos del número atómico Z del material atenuador y de la energía E de los rayos-x que pasan a través de él. Por tanto, el coeficiente de atenuación másico hereda una dependencia análoga en función de Z y E. Como ejemplo de la variación de μ/p , en función de la energía E, tenemos la figura 2.3. En ella notamos que para elementos ligeros (berilio, carbón, aluminio) las curvas $\mu/p = \mu/p(Z)$ son suaves y bien comportadas. Mientras que para los elementos estaño, hierro y plomo, las curvas presentan discontinuidades abruptas (picos) para determinados valores de la energía. Tales discontinuidades se caracterizan por un incremento considerable del coeficiente másico de atenuación. Estas energías reciben el nombre de orillas de absorción.

Estas orillas de absorción son debidas a que los fotones de rayos-x poseen la energía necesaria para expulsar electrones, de las capas electrónicas de los átomos, cuyas energías de enlace son ligeramente menores a la energía de los fotones.

Debido a esto, la absorción de los fotones por el proceso fotoeléctrico se acentúa, con el consiguiente aumento del coeficiente másico de atenuación. Cuando la energía E sobrepasa la orilla de absorción, el coeficiente de atenuación volverá a tener su comportamiento decreciente y solo se incrementará nuevamente

cuando la energía E coincide con otra orilla de absorción (ver curva correspondiente al plomo).

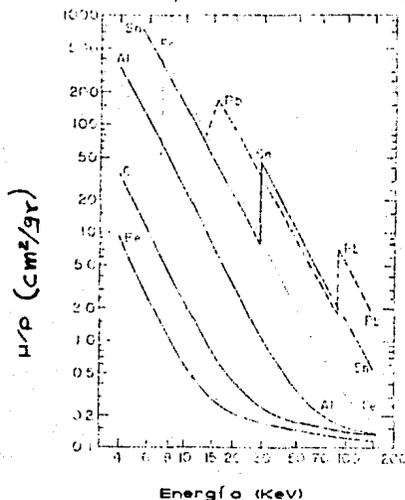


Fig. 2.3. Variación con la energía del coeficiente μ_a para los elementos: C, Al, Sn, Fe y Pb. (Tomado de la referencia [2]).

Para ejemplificar la dependencia del coeficiente masico de atenuación en función del número atómico Z del elemento atenuador, nos referimos a la figura 2.4. En esta figura cada simbolo colocado al final de cada curva denota la línea de rayos-x para la cual se obtiene la curva respectiva.

Todas las curvas presentan una pendiente positiva. Por tanto, al incremento del número atómico corresponde un incremento del coeficiente masico de atenuación.

La curva correspondiente a la energía de 1.04 KeV (K_{α} Na) presenta una discontinuidad en el elemento neon (Z=10), debido a que se presenta la orilla de absorción del neon para su capa electrónica K (0.867 KeV [2]).

Análogamente sucede para las curvas de 1.487 keV (K_{α} Al), 5.415 KeV (K_{α} Cr) y 8.048 KeV (K_{α} Cu), en las que aparecen las orillas de absorción de las capas K de los elementos: Magnesio, Titanio y Cobalto, respectivamente.

De lo antes expuesto son esenciales, para determinar experimentalmente y/o teóricamente valores de coeficientes masicos de atenuación, los procedimientos teóricos por los cuales se obtienen expresiones analíticas para las cinco secciones eficaces por átomo de los procesos respectivos de interacción que ya han

sido analizados. A continuación se presentan ejemplos del cálculo teórico de secciones eficaces.

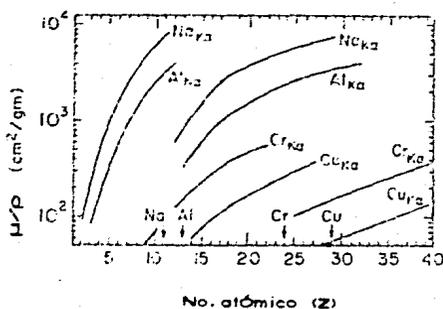


Fig. 2. 4. Variación del coeficiente másico de atenuación en función del número atómico Z para elementos entre Z=2 y Z=40. (Tomada de la referencia (2)).

2.2 Cálculo de la sección eficaz para el efecto fotoeléctrico.

El objetivo del siguiente desarrollo matemático es efectuar el cálculo de la sección eficaz para el efecto fotoeléctrico; es decir, un electrón con energía de enlace E_E es irradiado con luz de energía $h\nu$ y es expulsado con una energía cinética igual a $h\nu - E_E$. Debido a que el efecto fotoeléctrico involucra fundamentalmente una transición atómica, hacemos uso de la fórmula para la probabilidad de una transición de un sistema cuántico conocida como "Regla de oro de Fermi":

$$W = (2\pi/\hbar) \rho(E_f) \langle \psi_k | H' | \psi_m \rangle^2 \quad (2.10)$$

donde W representa la probabilidad de transición por unidad de tiempo para una transición del estado inicial m al estado final k . ψ_k y ψ_m son las funciones de onda para los estados respectivos.

El factor $\rho(E_f)$ corresponde a la densidad de estados finales por unidad de energía y

$$\langle \psi_k | H' | \psi_m \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^* H' \psi_m dv = |H'_{km}| \quad (2.11)$$

es el elemento de matriz que conecta el estado inicial con los estados finales. El término H' es el operador que contiene el potencial que induce la transición de estado del sistema cuántico. La perturbación H' está relacionada con el hamiltoniano del sistema no perturbado por la ecuación:

$$H = H_0 + H' \quad (2.12)$$

donde H_0 es el operador hamiltoniano correspondiente al estado del sistema no perturbado y que es solución de la ecuación de Schrödinger:

$$H_0 \psi_0 = i\hbar \partial \psi_0 / \partial t \quad (2.13)$$

Las dimensiones de la probabilidad de transición W son $[\text{tiempo}]^{-1}$:

$$W = (1/\text{energía})(1/\text{energía}) \times (\text{energía})^2 = (1/\text{tiempo})$$

Como una primera aproximación para calcular la sección eficaz de fotoionización que se efectúa en el efecto fotoeléctrico, consideremos a un electrón inmerso en un pozo de potencial $V(x)$. Esta aproximación recibe el nombre de Aproximación de Pozo Cuadrado: se considera a una partícula de carga $-e$ (electrón) en su estado base ψ_0 en un pozo de potencial $V(x)$, que es irradiado con luz de frecuencia ω , por lo cual salta al continuo.

Se hace la suposición de que la longitud de onda de la luz es muy grande comparada con las dimensiones del sistema irradiado. Esta suposición es generalmente válida ya que, excepto en la región de rayos-x y menor, la longitud de onda es mucho mayor que las dimensiones atómicas. Con esta suposición, el campo eléctrico E asociado a la luz puede considerarse como uniforme en el espacio aunque armónico en el tiempo. Por tanto, la perturbación puede expresarse como:

$$H'(x,t) = H'(x) \exp[-i\omega t] = -eEx \exp[-i\omega t] \quad (2.14)$$

y representa la energía potencial instantánea del electrón bajo la influencia del campo eléctrico E .

Una suposición adicional es considerar la frecuencia ω de valor grande de tal forma que la energía del estado final, del electrón, sea muy grande comparada con $V(x)$. De esta forma es posible tratar el estado final del electrón como un estado de partícula libre: como un estado de momento y energía bien definidos.

Para calcular la sección eficaz de fotoionización es necesario calcular la probabilidad de transición W . Para esto, primero se calcula la densidad de estados finales $\rho(E)$ como sigue:

Consideremos que el sistema se encuentra encerrado en una caja de longitud L donde uno de sus extremos se localiza en x_0 y el restante en $x_0 + L$. adicionalmente imponemos el requisito de condición a la frontera periódica

$$\psi(x_0) = \psi(x_0 + L) \quad (2.15)$$

donde la función de estado ψ corresponde al electrón en el continuo. La función ψ esta asociada al electrón cuando este es considerado como partícula libre una vez cumplida la fotoionización por tanto,

$$\psi(x) = A \exp[i(2m_0E)^{1/2}x/\hbar] \quad (2.16)$$

que sujeta a la condición (2.15) da como resultado

$$kL = (2m_0E)^{1/2}L/\hbar = 2n\pi, n = \{0, 1, 2, \dots\} \quad (2.17)$$

y la constante de normalización tiene como valor $A = (L)^{-1/2}$.

La densidad de estados $\rho(E)$, es el número de estados con energía entre E y $E+dE$. De la ecuación (2.17), el número de estados $N(E)$ con energía menor o igual E a es $2n+1$, y expresando n en función de E se obtiene

$$\rho(E) = (L/2\pi\hbar) (2m_0/E)^{1/2} \quad (2.18)$$

El siguiente paso es calcular el elemento de matriz H'_{fi}

$$H'_{fi} = \int_{-\infty}^{\infty} (L)^{-1/2} e \exp(ikx) \psi_i(x) \exp(ikx) dx \quad (2.19)$$

siendo $\hbar k$ el momento del electrón en su estado final.

Consideremos para el cálculo del elemento de matriz, que el electrón se encuentra en su estado base $\psi_i(x)$ en un pozo de potencial. Para simplificar el cálculo, se hará la hipótesis de que la anchura del potencial es tan pequeña como para considerar que el estado base es el único estado ligado y, simultáneamente, tan poco ligado que la función de estado se extienda muy lejos de las paredes del potencial. Se considera al pozo de potencial centrado en el origen.

El estado inicial del electrón es el estado base normalizado $\psi_i(x) = \psi_0(x)$ con energía $E = -E_E$, donde $-E_E$ es la energía de ligadura. El estado final será el estado normalizado de partícula libre definido por la ec. (2.16), con energía de E_f dada por

$$E_f = E + \hbar\omega = \hbar\omega - E_E \quad (2.20)$$

Bajo estas condiciones la probabilidad de transición por unidad de tiempo resulta ser

$$W = (2\pi/\hbar) \rho(E_f) |A_{fi}|^2 \\ = (1/\hbar^2) (2m_0 E_f)^{1/2} e^2 E^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x) \exp(i(2m_0 E_f)^{1/2} x / \hbar) dx^2 \quad (2.21)$$

para facilitar el cálculo de la integral en la ec.(2.21) extrapolamos la función de onda exterior hasta el origen, por tanto se pueda escribir que:

$$\psi_0(x) = (2m_0 E_f / \hbar^2)^{1/2} \exp[-(2m_0 E_f)^{1/2} x / \hbar] \quad (2.22)$$

con esta última simplificación se obtiene

$$W = (4e^2 E_f^2 / m_0 c) (E_f^{3/2} E^2) (E_f^2 + E^2)^{-2} \text{ donde } E_f = \hbar\omega - E_E$$

Recordando la hipótesis de que $\hbar\omega \gg E_E$, la expresión para W se reduce a

$$W = (4e^2 E_f^2 / m_0 c) E_f^{3/2} E^{-7/2} \quad (2.23)$$

Para propósitos prácticos estamos interesados en la probabilidad del evento de fotoionización por fotón incidente i.e., la sección eficaz para el proceso. Esta cantidad σ está relacionada con W a través del flujo F de fotones en el campo eléctrico E.

De la teoría electromagnética clásica sabemos que la densidad de potencia es $cE^2/2$, la densidad de potencia es la energía por unidad de área por unidad de tiempo.

El flujo F, el número de fotones/área/seg, está dado por $cE^2/2\hbar\omega$.

Dimensionalmente la sección eficaz σ es:

$$\sigma = (W/F) = (1/\text{tiempo}) (\text{No de fotones/área/tiempo})^{-1} = \text{área}^{-1}$$

sustituyendo los valores correspondientes de W y F obtenemos:

$$\sigma = (8e^2 \hbar / m_0 c) (E E_f)^{3/2} (E_f)^{5/2} \quad (2.24)$$

De este modo, la sección eficaz de fotoionización decrece con el incremento de la energía de los fotones como $(E_f)^{5/2}$.

2.3 Cálculo de la sección eficaz para el efecto fotoeléctrico para un átomo hidrogenoide.

En una aproximación más realista que la aproximación del pozo de potencial antes descrita, se describe a continuación, el cálculo de la sección eficaz para el efecto fotoeléctrico usando funciones de onda hidrogenoides en el espacio tridimensional.

ecuación (2.10). Las funciones de onda relevantes para los estados inicial y final están dadas por:

$$\psi_i = (1/\pi a^3)^{1/2} \exp(-\rho) \quad \text{y} \quad \psi_f = (1/V)^{1/2} \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{r}] \quad (2.25)$$

donde $\rho = r/a$ y $a = a_0/Z$, a_0 = radio de Bohr y Z es el número atómico del átomo hidrogenoide.

La función ψ_i del estado inicial describe un estado base de un electrón en un átomo hidrogenoide de número atómico Z y el estado final del electrón, es la usual onda plana, con energía final dada por $E_f = \hbar^2 k^2 / 2m_0$ normalizada al volumen V . La energía de enlace del electrón, E_E , está expresada como

$$E_E = -Z^2 e^2 / 2a_0 \quad (2.26)$$

Para este cálculo nuevamente suponemos que la energía de los fotones ionizadores es mucho mayor que la energía de enlace de los electrones. Para esta aproximación tridimensional la densidad de estados finales está dada por

$$\rho(E_f) = (V/2\pi^2) (2m_0/\hbar^2)^{3/2} E_f^{1/2} \quad (2.27)$$

La probabilidad de transición puede ser calculada si el potencial asociado a la perturbación es

$$H' = -eEz \exp(-i\omega t) \quad (2.28)$$

Siendo así, el resultado final para la sección eficaz para el efecto fotoeléctrico σ_{ef} es

$$\sigma_{ef} = (288\pi/3) (e^2 \hbar / m_0 c) (E_E^{5/2} E_f^{-7/2}) \quad (2.29)$$

siendo el resultado similar al obtenido en la aproximación de potencial unidimensional. Recordando que $E_E = (-Z^2 e^2 / 2a_0)$ y sustituyendo en la ec. (2.29) observamos la dependencia de σ_{ef} en términos del número atómico Z del átomo y de la energía de la radiación incidente $\hbar\omega$, como se había mencionado anteriormente.

Respecto a Z , la sección eficaz σ_{ef} es directamente proporcional al número atómico. Por otro lado, es inversamente proporcional a la energía de la radiación incidente.

Usando una descripción más elaborada del potencial de perturbación, pero usando las mismas funciones de onda y suponiendo que $\hbar\omega \gg E_E$, Schiff (3) demuestra que

$$\sigma_{ef} = (128\pi/3) (e^2 \hbar / m_0 c) (E_E^{5/2} E_f^{-7/2}) \quad (2.30)$$

El valor de $e^2 \hbar / m_0 c$ es igual a $5.56 \times 10^{-2} \text{eV} (\text{Å}^0)^2$, de tal forma

que por conveniencia escribimos

$$\sigma_{\text{ef}} = (7.45 \text{ \AA}^2 / h\nu) (E_e / h\nu)^{5/2} \quad (2.31)$$

aclarando, que la energía del fotón $h\nu$ está expresada en eV y que es igual a la energía del electrón expulsado: $E_e \ll h\nu$.

Como un ejemplo, la sección eficaz del efecto fotoeléctrico, para energía de radiación de 6.4×10^3 eV, incidiendo sobre electrones en la capa K del aluminio ($E_e = 1.56 \times 10^3$ eV), toma un valor de

$$\sigma_{\text{ef}} = (7.45 / 6.4 \times 10^3) (1.56 / 6.4)^{5/2} (\text{\AA}^0)^2 = 3.4 \times 10^{-21} \text{ cm}^2$$

aclarando que para la absorción total todos los electrones en todas las capas deben ser considerados.

Si bien los anteriores cálculos de la sección eficaz de fotoionización para el efecto fotoeléctrico son burdas, no dejan de ser ilustrativos de la aplicación de la mecánica cuántica para tal tipo de trabajos teóricos, y nos permiten incursionar en la literatura científica internacional donde son expuestos cálculos más perfeccionados sobre la sección eficaz de fotoionización. Por ejemplo: empleando un modelo atómico de partículas independientes y suponiendo que estas partículas son descritas por eigenfunciones de un campo central común, McGuire [4]; calcula secciones eficaces de fotoionización para todas las capas de los elementos con número atómico en el intervalo $2 \leq Z \leq 54$.

Supone para su modelo atómico, un potencial de la forma $Z(r)/r$ el cual es aproximado por una serie de líneas rectas. Con dicho potencial resuelve la ecuación de Schrödinger en forma exacta con funciones de Whittaker [5]. Encuentra los valores propios de la función de estado ligado y con los orbitales discretos y continuos del modelo calcula las secciones de fotoionización.

Para su cálculo, parte de la ecuación de Schrödinger en su parte radial, con un potencial central efectivo:

$$d^2/dr^2 + 2Z(r)/r - 1(1+1)/r^2 + E \phi(E, l; r) \quad (2.32)$$

siendo $Z(r)$ una función que decrece monótonamente de Z en $r=0$ a z en r igual a infinito, donde, para el sistema en cuestión, Z es la carga en el núcleo y z la carga sobre el ion residual ($z=1$ para un

sistema neutral).

Como se dijo la aproximación de $Z(r)$ es por medio de una serie de líneas rectas de la forma

$$Z(r) = Z_i - \Delta_i r/2 ; r_{i-1} \leq r \leq r_i ; i=1,2,\dots,n \quad (2.33)$$

tal aproximación es sustituida en la ecuación (2.32), obteniéndose

$$l^2/dr^2 + 2Z_i/r - \Delta_i - 1(1+l)/r^2 + E \quad l\phi_i(E,l;r) = 0$$

$$r_{i-1} \leq r \leq r_i \quad (2.34)$$

Para el caso $E < 0$, encuentra las soluciones de la ec. (2.34) que cumplen las condiciones de frontera en cero e infinito. Estas soluciones y sus derivadas bajo las condiciones de frontera dan como resultado las ecuaciones de valores propios para el caso $E < 0$. Análogamente, encuentra las soluciones a la ec. (2.34) para el caso $E > 0$ y sus respectivas ecuaciones de valores propios.

En este modelo las orbitales son todas funciones propias del potencial central común.

Obtenidas las funciones propias $\phi(E,l;r)$, McGuire efectúa para cada elemento, un cálculo numérico de la sección eficaz de fotoionización para una capa atómica en particular, por la serie

$$\sigma_{\nu} = (8.56) (\pi) \times 10^{-18} E \sum_{l,l'} C_l^{l'} \left| \int_0^{\infty} \phi(-E_0, l; r) r \phi(E, l'; r) dr \right|^2 \quad (2.35)$$

donde ν es la frecuencia del fotón incidente de energía $h\nu = E = \epsilon + E_0$ siendo $-E_0$ la energía de enlace del electrón en dicha capa atómica.

El factor $C_l^{l'}$ está dado por :

$C_l^{l'} = N_q n_{\alpha} x(1, l') / (2l+1)$; siendo N_q el número de electrones en la capa atómica en cuestión en el estado base. La longitud de onda λ , de los rayos-x que emplea McGuire para sus cálculos está comprendida en el intervalo $(0.2 \leq \lambda \leq 2000) \text{ \AA}$, i.e. con energías en el intervalo $(6.2 \leq h\nu \leq 62035) \text{ eV}$. Los resultados obtenidos por McGuire los compara con valores teóricos y experimentales encontrados por otros autores, encontrando, en general, buena concordancia.

2.4 Cálculo para la sección eficaz para la producción de pares.

La sección eficaz por átomo σ_{pp} , para la absorción de rayos-x mediante el proceso de producción de pares, puede calcularse con la ayuda de la teoría de Dirac [6]. El resultado que produce esta

teoría es

$$\sigma_{pp} = \sigma_{th} (3/8\pi) Z^2 f(\alpha) / 137 \quad (2.36)$$

donde $\alpha = hv/m_0c^2$; siendo hv la energía del fotón incidente.

La dependencia de la sección en términos de Z^2 es una consecuencia de que la interacción de transferencia de impulso requerida entre el núcleo atómico y el par producido que se efectúa con mayor probabilidad en átomos con número atómico Z muy grande.

La forma de la función $f(\alpha)$ es la misma para todos los elementos y en la figura 2.5 se muestra la forma de la función para el átomo de plomo. En esta gráfica se muestra que la sección eficaz aumenta lentamente desde cero, en la energía de umbral para la producción de pares $hv = 2m_0c^2 = 1.02$ Mev, y para valores de hv muy grandes tiende a un valor constante

$$f(\alpha \rightarrow \infty) = (28/9) \ln[183/Z^{1/3}] - 2/27 \quad (2.37)$$

La función $f(\alpha)$ no puede expresarse en una regla de correspondencia definida, debido a que sus valores se obtienen por medio de una integración numérica.

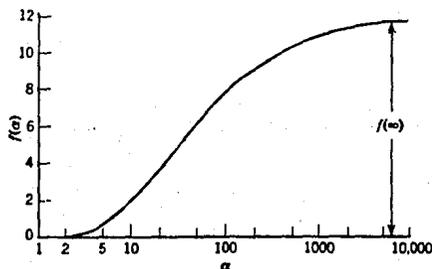


Fig. 2.5. gráfica de la función $f(\alpha)$ para el átomo de plomo, que surge en la teoría de la producción de pares. (Tomada de la referencia (7)).

Estudiando más a fondo el proceso de fotoproducción de pares se ha encontrado que este proceso también se efectúa en el campo coulombiano de los electrones atómicos. Gimm [8], calcula valores teóricos de las secciones eficaces para la fotoproducción de pares

electrón-positrón, en el campo coulombiano de electrones atómicos, para los elementos con número atómico en el intervalo $1 \ll Z \ll 100$, y energías de fotones por arriba de 10 Mev.

La fórmula para la sección eficaz $\sigma_{pp}(k)$, para la producción de pares en el campo de Z electrones atómicos, para una energía k del fotón incidente, que emplea el autor, está expresada en la aproximación de Born como:

$$\sigma_{pp}(k) = Z \int_{q_m}^{q_M} (d\sigma_{pp}/dq) S(q) dq \quad (2.38)$$

donde $(d\sigma_{pp}/dq)$ es la distribución de momentos del electrón que retrocede, $S(q)$ es la función de dispersión incoherente y los límites de integración q_m y q_M son el mínimo y el máximo de la distribución de momentos respectivamente, como resultado de la cinemática del proceso.

La fórmula (2.38) es dividida en dos términos:

$$\sigma_{pp}(k) = Z \int_{q_m}^{q_M} (d\sigma_{pp}/dq) dq - Z \int_{q_m}^{q_M} (d\sigma_{pp}/dq) [1-S(q)] dq \quad (2.39)$$

$$\sigma_{pp}(k) = 2(\sigma_H(k) - \sigma(k, Z)) \quad (2.40)$$

donde el primer término, en ambas ecuaciones, representa la sección eficaz de producción de pares en el campo coulombiano de electrones libres y el segundo término da la corrección por apantallamiento.

Gimm, efectúa un desarrollo en serie de potencias de la sección eficaz para cada valor de Z. Expresa la serie como

$$\sigma_{pp}(k) Z^{-1} = A_0 - [k^{-1}(A_1 + A_2 X + A_3 X^2 + A_4 X^3) + k^{-2}(A_5 X^2 + A_6 X^3)] \quad (2.41)$$

quedando por determinar cien conjuntos de siete coeficientes cada uno. La variable X es función de la energía del fotón, $X = \ln(2k)$; con k expresada en unidades de la energía de masa en reposo del electrón y $\sigma_{pp}(k)$ en milibarns.

El valor del coeficiente A_0 de la serie (2.41) lo calcula tomando el límite de la ec. (2.41) cuando k tiende a infinito y por medio de la ec. (2.38). Al coeficiente A_0 lo define como la constante de apantallamiento total.

Los restantes coeficientes A_i , $i=1, 2, \dots, 6$, los determina por medio de un ajuste de mínimos cuadrados de la ec. (2.41) al computar las secciones eficaces.

La desviación del ajuste de los datos calculados es menor de 10^{-3} para $Z \geq 16$ y energías de los fotones mayores a 10 Mev. Para $Z < 16$ y $k > 30$ Mev la desviación es menor de 4×10^{-3} .

2.5 Cálculo de la sección eficaz para la dispersión Compton.

Se han efectuado cálculos de la sección diferencial eficaz para la dispersión Compton, Únicamente para un solo electrón totalmente libre, Klein y Nishina [9] efectuaron estos cálculos utilizando la teoría relativista de Dirac. Como los resultados obtenidos son por un proceso bastante complejo, solo se menciona el principal resultado, que aún actualmente es empleado frecuentemente:

$$\frac{d\sigma_c}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{th}}{d\Omega} \left(\frac{1}{1+2\alpha \sin^2 \theta/2} \right) \left(1 + \frac{4\alpha^2 \sin^4 \theta/2}{(1+2\alpha \sin^2 \theta/2)^2} (1+\cos^2 \theta)^{-1} \right) \times \quad (2.42)$$

$$\sigma_c = \sigma_{th} \left[3(1+\alpha)/4\alpha^2 \left((2+2\alpha)/(1+2\alpha) - \ln(1+2\alpha) \alpha^{-1} \right) - \right. \\ \left. (3/4) \left[(1+3\alpha)/(1+2\alpha)^2 - (1/2\alpha) \ln(1+2\alpha) \right] \right] \quad (2.43)$$

donde α es el cociente de la energía $h\nu$ del fotón entre la energía de masa en reposo del electrón, $d\sigma_c/d\Omega$ es la sección eficaz diferencial para la dispersión Compton por un electrón libre y σ_c es la sección eficaz total de dispersión Compton.

Con base a los resultados obtenidos por Klein y Nishina, han sido desarrollados métodos numéricos que permiten obtener valores teóricos de la sección eficaz total por átomo σ_c , correspondiente al proceso de dispersión Compton.

Hubbell et al [10] obtienen un conjunto de valores para la sección eficaz σ_c , por medio de integración numérica de la ec. (2.44)

$$\sigma_c = \int_0^\pi dK k N(\theta) S(x, Z) \quad (\text{electrones ligados}) \quad (2.44)$$

donde

$$\frac{d\sigma_{KN}(\theta)}{d\Omega} = 0.5 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 (1+k(1-\cos\theta))^{-2} \times \\ \left[1 + \cos^2 \theta + k(1-\cos\theta)^2 (1+k(1-\cos\theta))^{-1} \right]$$

es la sección eficaz diferencial de colisión por electrón de Klein-Nishina, para electrones Compton libres.

El factor k corresponde a la energía E del fotón incidente expresada en unidades de la energía de masa en reposo del electrón: $k = E(\text{eV})/511003.4$.

El término $S(q,Z)$ del integrando es la llamada función de dispersión incoherente, donde los argumentos son :

$\chi = (\sin\theta/2)\lambda^{-1}(A^\circ)$; con λ la longitud de onda del fotón incidente y Z el número atómico del átomo dispersor.

El intervalo de energías de los fotones incidentes para el cual fueron calculados los valores de σ_c es de 100eV a 100Mev, para todos los elementos en el intervalo $1 \leq Z \leq 100$.

Comparativamente, un método experimental para medir la sección eficaz para la dispersión Compton por átomo, y que se puede aplicar a los demás procesos, es el empleado por T.K.Umesh, et al (11): Seleccionaron 26 compuestos sólidos inorgánicos tales como LiOH, KCl, CdI₂, NaHCO₃, entre otros. Estos veintiseis compuestos involucran elementos con número atómico en el intervalo $1 \leq Z \leq 56$.

Para cada uno de estos compuestos midieron, por medio de experimentos de transmisión de rayos- γ de energías 279.2, 514, 661.6 y 1115.5 kev, la correspondiente sección eficaz total de atenuación σ_{comp} , usando la relación

$$\sigma_{comp} = A(0.6025 t)^{-1} \ln(I_0/I) \text{ [barns/mol]} \quad (2.45)$$

para cada una de las cuatro energías de los fotones. Siendo I_0 e I las intensidades con atenuación y sin atenuación de los fotones de rayos- γ , obtenidas de los experimentos de transmisión, t es el espesor másico de la muestra atenuadora del compuesto y A el peso molecular-gramo.

Del conjunto de valores de secciones eficaces σ_{comp} , para cada una de las cuatro energías, calculan las secciones eficaces de atenuación total σ_i para cada uno de los elementos que constituyen los compuestos, utilizando la ecuación

$$\sigma_{comp} = \sum N_i \sigma_i \quad (2.46)$$

donde σ_i y N_i son la sección eficaz de atenuación total y número de átomos del i -ésimo elemento presente en el compuesto, respectivamente.

Grafican las secciones eficaces σ_i de los elementos contra su número atómico Z para cada valor de la energía de los fotones. Basándose en el hecho de que en el intervalo de energías

empleado y en la región de número atómico bajo, el principal proceso de interacción entre fotón y átomo es el proceso de dispersión Compton, y en el comportamiento lineal de σ_i en función de Z , observado de las gráficas, atribuyen el valor de σ_i debido únicamente a la dispersión Compton para valores de Z bajos. Para esta región de números atómicos ajustan por mínimos cuadrados la relación lineal entre σ_i y Z .

Posteriormente, extrapolan esta relación lineal a la región de números atómicos altos ($Z \leq 56$) basándose en el hecho de que la sección eficaz de dispersión Compton varía linealmente con el número atómico Z .

De esta forma, obtienen valores de las secciones eficaces por átomo para la dispersión Compton para los elementos y energías inicialmente mencionadas. Comparan sus resultados con los valores teóricos obtenidos por Hubbell, et al [10] encontrando una buena concordancia entre ambos conjuntos de valores.

2.6 Cálculo de la sección eficaz para la dispersión Thomson.

En el análisis correspondiente al proceso de dispersión Thomson, se derivó la expresión analítica que relaciona la energía promedio emitida \bar{R}_e , por un electrón al ser irradiado con un haz de rayos-x, cuya intensidad es la energía promedio \bar{I} . La relación está expresada por la ec. (1.30):

$$\bar{R}_e = \sigma_{Th} \bar{I} \quad (1.30)$$

donde la cantidad σ_{Th} es conocida como la sección eficaz de Thomson para el electrón y tiene un valor de $6.66 \times 10^{-25} \text{ cm}^2$.

En términos de la teoría clásica electromagnética se pueden hacer predicciones acerca de la distribución angular de los rayos-x que dispersa una carga q (en el caso más general) bajo las condiciones de la dispersión Thomson.

Recordemos que si una onda electromagnética incide sobre un sistema de partículas cargadas, las componentes eléctrica y magnética de la onda ejercerán una fuerza de Lorentz sobre las cargas y por tanto estas se pondrán en movimiento. Puesto que la onda electromagnética es periódica en el tiempo, también lo será el movimiento de las partículas. Por tanto, poseerá una aceleración

debido al cambio en dirección de su movimiento. Por ser partículas cargadas, el sistema radiará, es decir, cierta cantidad de energía es absorbida de la onda incidente por las partículas del sistema para ser posteriormente reemitida hacia el espacio.

Consideremos, como primer caso, que una onda electromagnética plana linealmente polarizada incide sobre una carga q . El vector de campo eléctrico de la onda se puede expresar como

$$\vec{E} = \vec{r} E_0 \exp[i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})] \quad (2.47)$$

siendo \vec{r} el vector de polarización y \vec{k} el vector de propagación.

Este campo eléctrico ejercerá sobre la carga una fuerza $\vec{F} = q\vec{E}$. Despreciando la contribución de la componente magnética, la fuerza \vec{F} hará que la partícula de carga q , sufra oscilaciones, de pequeña amplitud, respecto a un punto de equilibrio, el cual elegimos como origen del sistema coordenado. Despreciamos la parte magnética de la fuerza de Lorentz, que depende de la razón v/c , al suponer que la velocidad v , adquirida por la partícula bajo la influencia del campo eléctrico, es muy pequeña comparada con la velocidad de la luz. De este modo, se puede escribir la ecuación de movimiento de la partícula como

$$\vec{F} = q\vec{E} = m \frac{d^2 \vec{r}'}{dt^2} \quad (2.48)$$

siendo m la masa de la partícula de carga q y $d^2 \vec{r}'/dt^2$ el vector aceleración de la partícula.

El momento dipolar $\vec{p}(t)$ inducido en la partícula, por el campo eléctrico está dado por

$$\vec{p}(t) = q \frac{d\vec{r}'}{dt} \quad (2.49)$$

para así reescribir la ecuación (2.48) como

$$\frac{d^2 \vec{p}(t)}{dt^2} = (q^2/m) \vec{E}(t) \quad (2.50)$$

que nos permite calcular la potencia radiada por tiempo promedio por unidad de ángulo sólido, que se calcula por medio de la ecuación (2.51)

$$\langle dP/d\Omega \rangle = \langle \frac{d^2 \vec{p}}{dt^2} \rangle^2 (\sin^2 \theta) / 4\pi c^3 \quad (2.51)$$

pero de la ecuación (2.50) obtenemos

$$\langle \frac{d^2 \vec{p}}{dt^2} \rangle^2 = (q^4/m^2) \langle E^2 \rangle = (q^4/2m^2) E_0^2 \quad (2.52)$$

por tanto

$$\langle dP/d\Omega \rangle = (q^2/mc^2)^2 (c/8\pi) E_0^2 \sin^2 \theta \quad (2.53)$$

La sección diferencial $\langle d\sigma/d\Omega \rangle$ puede ser obtenida al dividir la potencia radiada por unidad de ángulo sólido, por el flujo de radiación incidente F , donde todas las cantidades son promedios temporales. Por tanto,

$$\langle d\sigma/d\Omega \rangle = \langle dP/d\Omega \rangle \langle F \rangle^{-1} \quad (2.54)$$

Por otro lado, el flujo incidente promedio (i.e. la energía incidente promedio por unidad de área por unidad de tiempo) es justamente la densidad de energía promedio en la onda:

$$\langle S \rangle = (c/8\pi) E^2 \quad (2.55)$$

de lo cual obtenemos

$$\langle d\sigma/d\Omega \rangle = (q^2/mc^2)^2 \sin^2\theta \quad (2.56)$$

esta cantidad indica que fracción de la intensidad de una onda electromagnética linealmente polarizada es dispersada por una carga q , por unidad de ángulo sólido en la dirección del ángulo θ .

El ángulo θ , que aparece en la ec. (2.56), es el ángulo entre el vector de momento dipolar y el vector \hat{n} de la dirección de la radiación dispersada.

En este primer caso, el dipolo es inducido por el campo eléctrico \vec{E} de la onda incidente y por tanto el vector de momento dipolar posee la misma dirección del campo eléctrico.

El ángulo θ se interpreta como el ángulo entre el vector \vec{E} (o el vector de polarización) y el vector \hat{n} , como se ve en la figura 2.6.

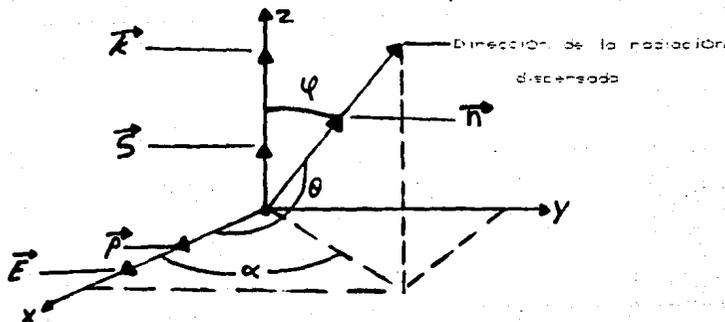


Fig. 2. 6. Relaciones vectoriales en la dispersión Thomson.

En este primer caso se ha considerado una onda linealmente polarizada. Al considerar el caso más general, de radiación incidente sin polarizar, debemos modificar la sección eficaz diferencial dada por la ec. (2.56). Para este caso más general, considerérese el sistema coordenado definido en la figura 2.6. El primer resultado obtenido está en función del ángulo θ entre los vectores \vec{n} y \vec{E} . Sin embargo, es más usual el expresar la sección eficaz diferencial en función del ángulo entre la dirección de la onda incidente (\vec{k}) y la dirección de la onda dispersada (\vec{n}). Para hacer esto, considerando una onda incidente sin polarizar, debe calcularse el promedio, sobre todas las orientaciones azimutales del vector \vec{E} ; i.e. obtener el promedio sobre el ángulo α en la figura 2.6:

$$\langle \sin^2 \theta \rangle = (1/2) (1 + \cos^2 \varphi) \quad (2.57)$$

denotando $\langle \sin^2 \theta \rangle$ el valor promedio de $\sin^2 \theta$ tomado sobre todos los ángulos α .

De esta forma, la sección eficaz diferencial para la dispersión de radiación sin polarizar, se obtiene sustituyendo el valor dado por la ec. (2.57) en la ec. (2.56)

$$\langle d\sigma/d\Omega \rangle_{\text{sin pol}} = (q^2/mc^2)^2 [(1 + \cos^2 \varphi)/2] \quad (2.58)$$

En el caso que nos interesa, que es el caso del electrón, obtenemos

$$\langle d\sigma/d\Omega \rangle = (e^2/m_0c^2)^2 [(1 + \cos^2 \varphi)] \quad (2.59)$$

Esta ecuación da la sección eficaz diferencial para la dispersión de una onda electromagnética sin polarizar por un electrón libre. Al integrar la ecuación sobre todo el ángulo sólido se obtiene el resultado

$$\sigma_{\text{Th}} = \int_{4\pi} (d\sigma/d\Omega) d\Omega = (8\pi/3) (e^2/m_0c^2)^2 = 6.66 \times 10^{-25} \text{ cm}^2 \quad (2.60)$$

que es la sección eficaz total del electrón para la dispersión Thomson que había sido ya calculada aunque de una manera más superficial (ecs. (1.12) a (1.31)).

El resultado dado por la ecuación (2.60) es estrictamente válido en el límite cuando ω tiende a cero. Sin embargo, el error en este cálculo clásico no es muy importante para frecuencias mayores o iguales a las frecuencias de rayos-x que no estén

próximas a frecuencias para las cuales la dispersión Compton toma importancia ($h\nu = mc^2$), debido a que los efectos cuánticos de dispersión Compton son significativos cuando la energía de los rayos-x es muy cercana a la energía de masa en reposo del electrón.

La energía promedio dispersada por segundo por unidad de ángulo sólido, al ángulo φ , está dada por:

$$\langle R(\varphi) \rangle = \langle d\sigma/d\Omega \rangle \bar{I}$$

ó

$$\langle R(\varphi) \rangle = (e^2/mc^2)^2 [(1 + \cos^2\varphi)/2] \langle I \rangle \quad (2.61)$$

Debido a que el cálculo anterior fue considerando a un solo electrón, se debe abarcar el problema más real de la dispersión de rayos-x por un átomo.

El problema se simplifica si consideramos radiación de rayos-x cuya longitud de onda y energía satisfacen las ecs. (1.18) y (1.19). Bajo estas consideraciones cada uno de los electrones de un átomo de número atómico Z , dispersa rayos-x en forma independiente y la intensidad que dispersa el átomo es Z veces la que dispersa cada electrón. Por tanto

$$\langle R(\varphi) \rangle_{\text{total}} = Z \sigma_{\text{th}} \langle I \rangle \quad (2.62)$$

$$\text{si se define } \sigma_{\text{átomo}} = Z \sigma_{\text{th}} \quad (2.63)$$

$$\text{entonces } \langle R(\varphi) \rangle_{\text{total}} = \sigma_{\text{átomo}} \langle I \rangle \quad (2.64)$$

donde a la cantidad $\sigma_{\text{átomo}}$ se le conoce como sección eficaz de dispersión por el átomo. Como consecuencia, la sección eficaz diferencial por el átomo es:

$$\langle d\sigma/d\Omega \rangle_{\text{átomo}} = Z \langle d\sigma/d\Omega \rangle \quad (2.65)$$

Para rayos-x de longitud de onda comparable o mayor que las dimensiones características de los átomos, los electrones no actúan de forma independiente.

En el límite de longitudes de onda muy grandes y energías de los cuantos de rayos-x muy bajas, las interacciones rayos-x-electrones no son independientes, porque en estas condiciones un electrón ligado al núcleo atómico oscila bajo la influencia de las ondas electromagnéticas incidentes y las ondas electromagnéticas que emiten los demás electrones atómicos que

estón en fase con las que emite un electrón atómico en particular, por tanto, esta coherencia en fase de la radiación dispersada por los electrones es la causa de que la intensidad dispersada sea muy grande en comparación con el caso de un solo electrón.

Si los rayos-x son de longitudes de onda y energías cuánticas tales que el proceso de dispersión por varios electrones atómicos no es totalmente coherente pero tampoco del todo incoherente, la solución del fenómeno de dispersión se torna más complicado; pero la electrodinámica clásica brinda un método para explicarlo: Se plantea la hipótesis de que los electrones en el átomo se encuentran distribuidos en forma esféricamente simétrica.

La amplitud de la onda electromagnética que es dispersada por cada elemento de volumen se evalúa para posteriormente, efectuar la suma de todas las contribuciones de todos los elementos de volumen, sumando estas amplitudes con factores de fase relativa, que dependen de: la ubicación del elemento de volumen, el ángulo de dispersión y la longitud de onda. Al elevar al cuadrado la amplitud neta, se obtiene la intensidad total de la energía dispersada en un ángulo en particular. Dividiendo la anterior cantidad entre la intensidad de la energía incidente, se obtiene la sección diferencial de dispersión por átomo, que queda expresada como:

$$(d\sigma/d\Omega)_{\text{átomo}} = \langle d\sigma/d\Omega \rangle |F(\chi)|^2 \quad (2.66)$$

en la cual

$$F(\chi) = \int_0^{\infty} 4\pi r^2 \rho(r) \sin(\chi r) / (\chi r) dr \quad (2.67)$$

$$\chi = 2k \sin(\varphi/2) \quad (2.68)$$

$$k = 2\pi/\lambda$$

siendo λ la longitud de onda de los rayos-x, φ es el ángulo de dispersión y $\rho(r)$ es la densidad electrónica del átomo en unidades de la carga electrónica. Puesto que

$$\int_0^{\infty} \rho(r) 4\pi r^2 dr = Z$$

la función $F(\chi)$, que se conoce como factor de forma atómico, toma su valor máximo, el número atómico Z , cuando $(\chi r)^{-1} \sin(\chi r)$ es igual a la unidad. Esta condición se satisface cuando χ tiende a cero, que se presenta para todos los valores de φ cuando k tiende

al valor cero, y que sucede también para el caso límite cuando φ tiende a cero.

En la figura 2.7 se comparan las secciones diferenciales de dispersión por átomo predichas por las ecuaciones (2.65) y (2.66), medidas con rayos-x de longitud de onda $\lambda=0.71 \times 10^{-8}$ cm, incidentes en átomos de ^{12}C . La discrepancia entre ambas predicciones a ángulos pequeños ilustra como la ecuación (2.66) toma en consideración y prueba convincentemente los efectos coherentes en el proceso de dispersión. Sin embargo, para hacer uso de la ec. (2.66), es fundamental conocer la densidad electrónica $\rho(r)$ involucrada en el factor de forma atómico. Esta densidad electrónica puede ser obtenida de la teoría de Hartree del átomo.

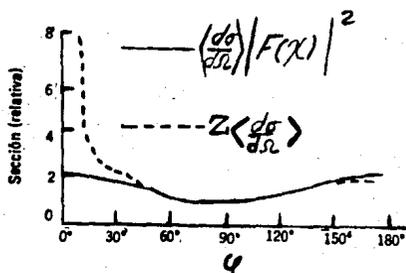


Fig. 2.7. Comparación de las secciones diferenciales de dispersión para rayos-x de $\lambda=0.71 \text{ \AA}$ incidentes en átomos de carbono. (Tomada de la referencia [12]).

Si se integra la expresión (2.66) sobre todo el ángulo sólido Ω , el valor de la sección eficaz de dispersión por átomo, σ , queda en función de la densidad electrónica $\rho(r)$. Para los casos en que esta densidad puede ser calculada, los resultados teóricos de σ coinciden bastante bien con los datos experimentales, siempre y cuando la longitud de onda de los rayos-x, sea mayor, a 0.2×10^{-8} cm. Los datos experimentales están representados en la figura 2.8. La razón entre la sección eficaz de dispersión por

átomo experimental, y la sección de dispersión predicha por la ec.(2.63) está representada gráficamente como función de la longitud de onda de los rayos-x, para diferentes elementos. Las curvas se identifican con el número atómico del elemento.

Se observa en esta gráfica, ejemplos del hecho de que las secciones eficaces por átomo observadas, concuerdan con las predicciones de la ec.(2.63) para longitudes de onda cercanas al valor 0.2×10^{-8} cm; pero que se presentan discrepancias entre valores teóricos de la ec.(2.63) y los valores experimentales para longitudes de onda mayores a 0.2×10^{-8} cm debido a los efectos de coherencia de la radiación dispersada.

Se observa también que las secciones de dispersión por átomo observadas tienden a hacerse más pequeñas que las pronosticadas por la teoría electromagnética clásica (con o sin efecto de coherencia), al ir disminuyendo la longitud de onda de la radiación incidente más allá de 0.2×10^{-8} cm.

Para rayos-x de estas longitudes de onda, la energía de cada cuanto de radiación viene a ser del orden de la energía de masa en reposo del electrón: 0.51 Mev, dando origen al proceso de dispersión Compton.

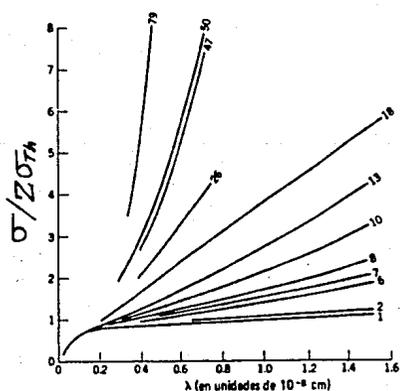


Fig. 2. B. Secciones eficaces de dispersión por átomo, para varios elementos y longitudes de onda. Cada curva está caracterizada por el número atómico del elemento. (Tomada de la referencia (12)).

2.7 Cálculo para la sección eficaz para la dispersión Rayleigh.

Un ejemplo ilustrativo del cálculo de la sección eficaz σ_R para la dispersión Rayleigh es el trabajo hecho por Hubbell et al [10]. Calculan un conjunto de valores de secciones eficaces σ_R . El carácter de estos valores es teórico y abarca a todos los elementos con número atómico en el intervalo $1 \leq Z \leq 100$, considerando energías de los fotones de 100 eV hasta 100 Mev.

Con base en cálculos teóricos que ellos mismos realizan, de los factores de forma atómica $F(x)$, efectúan integraciones numéricas de la ecuación (2.69)

$$\sigma_R = \int_{0}^{\theta_{\max}} d\theta \sin(\theta) [F(x, Z)]^2 \quad (2.69)$$

para determinar los valores de σ_R . En la ecuación (2.69) el término x está dado por

$$x = \lambda^{-1} \sin(\theta/2) A^0$$

siendo θ el ángulo entre las direcciones de incidencia y de dispersión del fotón incidente.

Utilizando la sección eficaz diferencial de dispersión Thomson por electrón:

$$d\sigma(\theta)/d\Omega = (1/2)(e^2/mec^2)^2 (1+\cos\theta) \quad (2.70)$$

reescriben la ecuación (2.69) en la forma

$$\sigma_R = (3/8)\sigma_{\text{Th}} \int_{-1}^{+1} (1+\cos^2\theta) [F(x, Z)]^2 d(\cos\theta) \quad (2.71)$$

que es finalmente la que emplean en sus cálculos.

Los autores no comparan sus resultados obtenidos de σ_R con valores experimentales. Sin embargo, señalan que los cálculos del factor de forma atómica poseen incertidumbres substanciales, particularmente para valores de x y Z altos, debido a que el comportamiento asintótico del factor de forma atómico para valores muy grandes de x , que es de la forma $F(x, Z) \sim x^{-4}$, produce valores distintos para las secciones eficaces para la dispersión Rayleigh calculadas por otros autores.

CAPITULO TERCERO

Debido al gran número de dispositivos experimentales que se han desarrollado para la medición del coeficiente másico de atenuación de rayos-x, se presentan a continuación los dispositivos experimentales de uso más general, destacando las ventajas y desventajas que de ellos se derivan.

Así mismo, son descritos trabajos teóricos y semiempíricos que presentan modelos matemáticos utilizados para calcular coeficientes másicos de atenuación de rayos-x.

3.1 Dispositivos experimentales.

Los diversos dispositivos experimentales que son usados en la medición de coeficientes másicos de atenuación de rayos-x, μ/p , deben cumplir varios requisitos que garanticen una buena medición del valor μ/p y una incertidumbre asociada de valor pequeño. Dichos requisitos, como los más importantes y generales, Millar y Greening (13), son:

- a) Los rayos-x a emplearse deben ser monoenergéticos, de energía E.
- b) Los rayos-x, resultantes del proceso de atenuación, deben ser también monoenergéticos de energía E.
- c) El haz de rayos-x incidente sobre el material atenuador, debe ser perfectamente colimado.
- d) El haz de rayos-x resultante del proceso de atenuación también debe ser perfectamente colimado.
- e) El material atenuador debe ser en su composición, homogéneo. En caso de ser un material constituido por varios elementos, la concentración de éstos debe ser cuantificada lo más precisamente posible.
- f) La estadística de conteo de las intensidades atenuada y no atenuada del haz de rayos-x, debe ser óptima.
- g) Determinación del espesor del material atenuador con gran precisión.

Bajo estas condiciones ideales de experimentación, la relación entre la intensidad I_0 del haz de rayos-x no atenuado y la intensidad I del haz atenuado, será:

$$I = I_0 \exp[-(\mu/p)px]$$

De la anterior expresión y conociendo las cantidades I, I_0 , p y x es posible determinar el coeficiente μ/p de la siguiente expresión:

$$\mu/p = (1/px) \ln(I_0/I) \quad (3.1)$$

La necesidad de que los rayos-x a emplearse sean monoenergéticos se deriva del hecho de que el coeficiente μ/p depende de la energía de la radiación y, por tanto, el uso de rayos-x no monoenergéticos causaría ambigüedad en cuanto a que el coeficiente no se determina para una energía específica.

Por otro lado, el colimar el haz a transmitirse y el transmitido permite el definir una sección (área) transversal por la cual siempre se mantenga el mismo flujo de fotones de rayos-x. Esto permite que la dispersión del haz, antes de incidir en el material atenuador, no se incremente y esto provoque fluorescencia en otras partes del dispositivo que puede contribuir como ruido en el sistema de detección. Adicionalmente, el colimar el haz puede proporcionar una forma de analizar varias regiones de una misma muestra, bajo las mismas condiciones de experimentación entre las cuales destaca; un mismo número de fotones incidentes (flujo) por unidad de área.

Respecto a la homogeneidad de los materiales atenuadores, se puede decir que es muy conveniente debido a que un material homogéneo y un material del mismo elemento, pero con impurezas, presentan distintos comportamientos en el proceso de atenuación. En el caso del material homogéneo solo interviene la atenuación de los rayos-x debida solo a un tipo de átomo, mientras que en el mismo material con impurezas u otros elementos constituyentes, la interacción de los rayos-x con los distintos átomos provoca una atenuación distinta.

Finalmente, la estadística de conteo se refiere, por lo general, al número de fotones I_0 detectados en ausencia del material atenuador y al número de fotones I detectados al transmitirse en el material atenuador, el número inicial I_0 . Estas dos cantidades deben ser tales que su valor experimental induzca una incertidumbre pequeña en el valor del coeficiente μ/p . Por ejemplo, es más conveniente una cantidad $I=10,000$ fotones con una incertidumbre de $I=(I)^{1/2} \pm 100$ a una cantidad $I'=150$ e $(I')^{1/2}$ igual a ± 12.47 . En el primer caso $(I)^{1/2}$ es solo el 1% de I mientras que $(I')^{1/2}$ es el 8.51% de I' .

Si el dispositivo experimental logra cumplir el mayor número de los anteriores requisitos, se puede fundamentar el uso de la ec. (3.1) para determinar el coeficiente μ/p , facilitando de esta forma, el tratamiento matemático de los datos experimentales

obtenidos.

El primer dispositivo experimental que se describe está esquematizado en la figura 3.1.

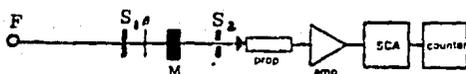


Fig. 3.1. Dispositivo experimental de rayos-x; F, colimadores; S1, filtro β monocromador, material atenuador.

La fuente de rayos-x que utiliza el dispositivo uno es un tubo de rayos-x de enfoque fino. El filtro β es utilizado para obtener el haz de rayos-x de la energía deseada. El sistema de colimadores S1 y S2 permite obtener haces colimados antes y después de la muestra de material atenuador M. Esta muestra se coloca de tal forma, que el haz monoenergético, incida normalmente a su superficie.

La electrónica asociada a este dispositivo consiste de un detector proporcional, un analizador monocanal (single channel analyser, SCA) y un contador.

La radiación producida en el tubo de rayos-x proviene principalmente de un material blanco y está constituida principalmente por las líneas K α y K β del blanco. Como la línea más utilizada es la K α se emplean los filtros β que absorben totalmente la línea K β inducida. Estos filtros son láminas delgadas de algún material que posea una orilla de absorción que coincida en energía con la línea K β del blanco. Si bien estos filtros eliminan, considerablemente la línea K β , pueden manifestarse rayos-x de otros materiales del dispositivo que no sean atenuados por el filtro β resultando por consiguiente radiación no deseada que pueda alterar las mediciones.

El detector proporcional, en general, tiene las siguientes ventajas: la altura del pulso de corriente es proporcional a la energía del fotón de rayos-x. Por tanto, puede efectuarse una

selección de altura de pulso. La resolución en energía de estos detectores es buena siempre y cuando los rayos-x sean monoenergéticos (distribución de la altura de pulso para rayos-x monoenergéticos muy angosta) y, finalmente, tienen un tiempo de resolución bastante rápido, alrededor de 10^5 a 10^6 cuentas/seg.

Las desventajas más serias que presentan este tipo de detectores son: no pueden resolver picos de rayos-x cuyas longitudes de onda sean muy cercanas; los pulsos de corriente a la salida del detector requieren de muy alta amplificación; para un gas de llenado dado, la eficiencia del detector varía frecuentemente con la longitud de onda de la radiación. Adicionalmente, estos detectores no son capaces de informarnos sobre posibles fuentes de radiación no deseadas, que puedan estar distorsionando los datos experimentales.

Las desventajas del detector proporcional pueden ser eliminadas por medio del dispositivo dos mostrado en la fig. 3.2. La diferencia entre ambos dispositivos es el cambio del detector proporcional por un detector de estado sólido de Si(Li) y por la inclusión de un analizador multicanal (MCA, siglas en inglés).

El detector de Si(Li) tiene como ventaja una muy buena resolución, Price [14], comparada con la resolución del detector proporcional.

Esta característica hace que el detector de Si(Li) junto con el MCA informen sobre posibles componentes de radiación, en el haz transmitido, que puedan ocasionar distorsión en los resultados experimentales. Por otra parte, este acoplamiento Si(Li)-MCA, permite obtener simultáneamente medidas de atenuación de rayos-x de distintas energías. Una ventaja más de este sistema de detección es el eliminar el uso de filtros β , u otro tipo de filtros, que para ciertas energías de rayos-x puedan ser difíciles de fabricar o que, en el mejor de los casos, su costo de adquisición sea muy alto. También se elimina el riesgo de que los filtros no sean muy eficientes para un intervalo de energía de rayos-x.

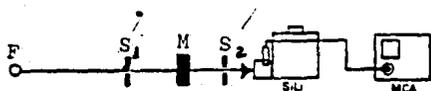


Fig. 3.2. Dispositivo dos. Mismo configuración que el dispositivo uno utilizando sistema de detección Si(Li)-MCA.

Las ventajas del tipo de detector de Si(Li) son, entre las más importantes, las siguientes: linealidad de la altura de pulso en función de la energía de radiación, tiempo de respuesta corto, alta resolución en energía, dimensiones convenientes, ventanas delgadas y sensibilidad variable con respecto a la energía de la radiación.

Como limitaciones de estos detectores se encuentran: pequeña señal de salida y por tanto necesidad de alta amplificación, variaciones en las condiciones de operación con las condiciones ambientales y deficiencia en el frenamiento de partículas de energía relativamente alta.

Si bien, la resolución en energía del detector de Si(Li) y el uso del MCA, permiten omitir el uso de los filtros monocromadores existe una modificación al dispositivo dos que permite garantizar un haz transmitido, a ser detectado, de un carácter más monoenergético.

La modificación está mostrada en la figura 3.3 y corresponde al dispositivo tres. En este dispositivo se incluye un cristal perfecto que funciona como monocromador del haz transmitido, y se coloca entre el material atenuador y el colimador S₂. El funcionamiento de estos cristales se basa en la difracción de rayos-x por la red cristalina, y solamente aquellos rayos-x de longitud de onda que satisfagan la ley de Bragg sufrirán interferencia constructiva. Si esta longitud de onda coincide con la longitud de onda deseada para las mediciones, se habrá obtenido un haz más monoenergético.

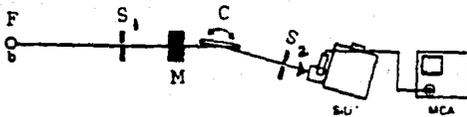


Fig. 3. 3. Dispositivo tres. Utilización de un cristal como monocrómador del haz transmitido.

Una modificación similar puede efectuarse en el dispositivo uno y está ilustrada en la fig.3.4 correspondiente al dispositivo cuatro. En esta configuración el cristal monocrómador, está colocado entre el colimador S_1 y el material atenuador. El hecho de colocar el cristal antes del material, garantiza un haz monoenergético a transmitirse y, por tanto, el detector proporcional aumentará su resolución.

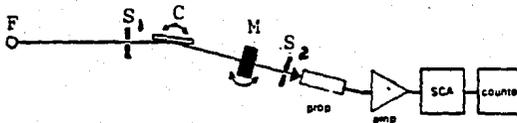


Fig. 3. 4. Dispositivo cuatro. Mismos componentes que el dispositivo uno pero utilizando un cristal monocrómador.

Con el objetivo de obtener un haz aún más monoenergético y seguir utilizando el detector proporcional, se puede utilizar un par de cristales monocrómadores como se ilustra en la fig.3.5 (dispositivo cinco). Esta pareja de cristales permite someter al haz de rayos-x, a un doble proceso de filtrado, y esto claramente repercutirá en un incremento de la resolución del detector.

El mismo conjunto de monocrómadores puede emplearse con el detector de $Si(Li)$.

Sin embargo, debido a la buena discriminación de energías de rayos-x que hace este detector, los cristales pueden resultar superfluos.



Fig. 2.5. Utilización de dos cristales monocrómicos, para doble filtrado del haz de rayos-x. La muestra de material atenuador puede ocupar cualquiera de las tres posiciones: 1, 2 o 3.

Para emplear este tipo de cristales estos deben de reunir las siguientes características (15):

- Amplio intervalo de longitudes de onda de aplicación del cristal.
- Alta intensidad difractada.
- Alta resolución, alta dispersión y anchura angosta del pico correspondiente a la longitud de onda difractada.
- Una razón señal a ruido muy grande.
- Cristales libres de impurezas.
- Coefficiente de dilatación térmica pequeño.
- Buena resistencia mecánica.

Es apropiado para los cinco dispositivos anteriores, introducirlos en cámaras de alto vacío. Esto tiene como objetivo eliminar el factor de atenuación de la radiación debido al aire del medio circundante. Adicionalmente, se pueden eliminar impurezas gaseosas presentes en la atmósfera que puedan depositarse en la superficie de los materiales atenuadores. Una ventaja más de este procedimiento es observada en los metales, los cuales en ausencia de oxígeno, sufren una mínima oxidación.

Todos los dispositivos anteriores emplean, como fuente de rayos-x, tubos de rayos-x cerrados herméticamente. Un método alternativo para la generación de rayos-x, emplea el proceso de fluorescencia inducida de rayos-x para producir los rayos-x de la longitud de onda deseada.

El dispositivo seis, mostrado en la fig.3.6, ejemplifica una configuración experimental que utiliza una fuente de rayos-x empleando el método de fluorescencia inducida.

La fuente de rayos-x F_1 irradia el material blanco en el cual se inducen los rayos-x de la energía deseada. Este haz producido se transmite a través de un sistema de aberturas Soller [15] antes y después de ser difractados por el cristal monocromador. Finalmente, el haz transmitido es detectado por un detector proporcional.

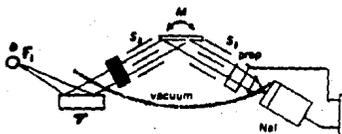


Fig. 3. 6. Dispositivo seis. F_1 fuente de rayos-x producidos por bremsstrahlung, T material blanco fluorescente, M material atenuador, S_1 sistema de aberturas Soller.

Las diferencias entre este dispositivo y los anteriores son el introducir el material atenuador y el cristal difractor en una cámara de vacío y el emplear un sistema de aberturas Soller. Este sistema de aberturas permite concentrar sobre una área considerable del cristal, un flujo de haz de una intensidad apropiada. También elimina rayos-x de energías no deseadas difractadas por el cristal y mantiene el paralelismo del haz de rayos-x.

Las desventajas más serias de este tipo de colimadores son: el lograr un buen alineamiento del sistema y el pico, correspondiente a la energía del haz, se divide en dos o más picos.

Para finalizar esta descripción de dispositivos experimentales, para la medición de coeficientes másicos de atenuación, se presentan a continuación los dispositivos siete y ocho.

El dispositivo siete está ilustrado en la fig.3.7.Utiliza como fuente de rayos-x un material sobre el cual se induce fluorescencia de rayos-x.Estos rayos-x son filtrados para seleccionar las longitudes de onda deseadas y se utiliza como sistema de detección un sistema de selección de energías de rayos-x, un contador proporcional y un sistema analizador multicanal.Este sistema de detección es, en términos electrónicos, análogo en funcionamiento al sistema de detección Si(Li)-MCA.

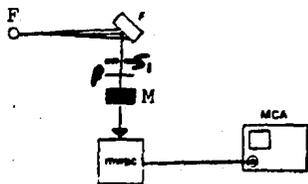


Fig. 3. 7. Dispositivo siete. F1,T y M mismo significado que en la fig. 3. 6. S1 colimador, β filtro, S LCP Selección de Longitudes de onda y Contador Proporcional.

El Último dispositivo que se menciona, utiliza como fuente de rayos-x una fuente radiactiva que en general son de construcción sencilla y fácilmente disponibles.Como sistema de detección y selección de energías son frecuentemente utilizados un detector de estado sólido (Si(Li) o Ge) y un analizador multicanal.La fig.3.8 ilustra este dispositivo y en comparación con los dispositivos cinco y seis, es sumamente sencillo.

Quizás las desventajas más importantes de hacer uso de fuentes radiactivas sean, que en general;estas fuentes son encapsuladas por algún material y por tanto deberán hacerse las correcciones pertinentes por este factor de atenuación de los rayos-x producidos.Además, pueden no existir fuentes radiactivas de las energías deseadas por el experimentador.

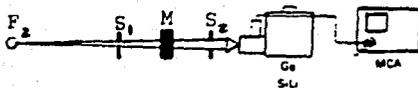


Fig. 3.8. Dispositivo de emisión de rayos-x, F2 fuente radiactiva de emisión de rayos-x, S1 y S2 colimadores, M material atenuador.

3.2 Cálculos teóricos y semiempíricos del coeficiente másico de rayos-x.

En forma práctica han sido desarrolladas diversas teorías y expresiones semiempíricas que permitan calcular valores del coeficiente másico de atenuación de rayos-x, en términos de la longitud de onda o energía de los rayos-x.

Theisen y Vollath [16], calculan valores del coeficiente másico de atenuación de rayos-x para todos los elementos con número atómico comprendido en el intervalo $3 < Z < 94$. El intervalo de energías empleado en estos cálculos es de aproximadamente 0.8 KeV a 18 KeV. Estas energías comprenden las líneas de rayos-x $K\alpha_1, K\alpha_2, K\beta, L\alpha, L\beta, M\alpha$ y $M\beta$ correspondientes a los elementos entre el Neón y Plutonio.

El proceso de cálculo que efectuaron consistió en considerar la ec. (3.2)

$$\mu/p = \tau/p + \sigma/p \quad (3.2)$$

donde τ/p y σ/p son los factores de absorción fotoeléctrica y de dispersión Compton respectivamente. La ec. (3.2) es transformada a la siguiente ecuación haciendo la suposición de que en el intervalo de energías utilizado, el factor de dispersión es despreciable:

$$\mu/p = \tau/p \quad (3.3)$$

El factor de absorción dado por la ec.(3.3) es considerado como la suma de los coeficientes másicos de absorción correspondientes a las capas electrónicas individuales del átomo, es decir:

$$\tau/\rho = \sum_A (\tau_q/\rho) \quad (3.4)$$

siendo cada término de la suma, el coeficiente másico de absorción correspondiente a la capa electrónica q. Efectuando una estimación teórica de este coeficiente obtienen el resultado:

$$(\tau/\rho) = (4\pi e^2/m_0 c^2) (L/A) \lambda^3 \sum_A (Z_q/\lambda_q^2) \quad (3.5)$$

donde Z_q es el número de electrones en la capa q, λ_q es la longitud de onda correspondiente a la orilla de absorción de la capa q, L es el número de Avogrado, A es el peso atómico del elemento y λ es la longitud de onda de la radiación incidente.

Con el objetivo de simplificar los cálculos, los autores reducen la suma a un solo término haciendo la suposición de que la principal contribución al proceso de absorción, es por parte de la excitación de los niveles de energía más altos por tanto, la ec.(3.5) toma la forma:

$$(\tau/\rho) = (4\pi e^2 R^2/m_0 c^2) (L/A) \lambda^3 (Z_q/n_q^4) (Z-\sigma)^4 \quad (3.6)$$

donde ha sido sustituido el valor de λ_q dado por la ec.(3.7)

$$\lambda_q = n_q^2/R(Z-\sigma)^2 \quad (3.7)$$

siendo n_q el número cuántico principal de la capa q, R la constante de Rydberg y σ la constante de apantallamiento.

Si bien, la ec.(3.5) tiene una forma más compacta, Theisen y Vollath hacen una sustitución adicional que consiste en considerar $(Z-\sigma)^4 = Z^{\beta}$, lo cual da como resultado:

$$(\mu/\rho) = C \lambda^{\alpha} Z^{\beta}$$

y haciendo $C' = CZ^{\beta}$, obtienen la fórmula de uso más frecuente para este tipo de cálculos:

$$(\mu/\rho) = C' \lambda^{\alpha} \quad (3.8)$$

Los autores reúnen una gran cantidad de valores experimentales del coeficiente (μ/ρ) para cada uno de los elementos y los ajustan a la ec.(3.8), obteniendo así los valores respectivos de C' , α y β .

Con base en los valores determinados de estos parámetros y utilizando la ec.(3.8) efectúan cálculos de interpolación del coeficiente de atenuación para el intervalo de energías citado anteriormente, correspondientes a cada elemento.

Las desviaciones de estos resultados son, en general, pequeñas y existe buena concordancia con los resultados experimentales respectivos.

Utilizando una ecuación análoga a la utilizada por Theisen y Vollath, Phuc y Leroux [17] realizan un trabajo de carácter semiempírico en el cual tratan de resolver el problema de encontrar una relación matemática entre el coeficiente de atenuación μ/p y la energía E de los rayos-x. Este problema ya había sido estudiado en trabajos anteriores de Leroux, [18], [19], donde propuso un método para determinar valores del coeficiente de atenuación en función de la longitud de onda, λ , de los rayos-x cuyas energías se encontrarán entre cualesquiera dos orillas de absorción consecutivas de un elemento dado. Este método consistió en reunir, para un gran número de elementos, todos los valores disponibles del coeficiente μ/p y se procedió a ajustarlos a una expresión matemática que resulto ser:

$$\mu/p = C \lambda^n \quad (3.9)$$

donde C es un parámetro dependiente del número atómico del elemento atenuador y n es una constante para todos los elementos atenuadores, dentro de cada uno de los intervalos definidos por dos orillas de absorción consecutivas.

Basándose en los trabajos anteriores de Leroux, los autores utilizan los datos sobre μ/p disponibles, y gráficas logarítmicas de este coeficiente como función de la energía E, para obtener los parámetros C y n para cada elemento en el intervalo $1 < Z < 94$, y considerando la energía E en el intervalo definido por dos orillas de absorción sucesivas obtienen así, para cada elemento, una relación equivalente a la ec. (3.9). Dicha relación es:

$$(\mu/p) = C (12.3981/E)^n \quad (3.10)$$

donde E es la energía, expresada en KeV, de los rayos-x.

El intervalo de energías que emplean en sus cálculos es de 1 KeV a 40 KeV.

De este proceso de ajuste de datos, concluyeron que el parámetro C no sólo depende del número atómico del elemento sino que también depende de la energía de la radiación. De esta dependencia obtienen una nueva relación entre μ/p y E:

$$\mu/p = C E_{ob} \lambda^n = C E_{ob} (12.3981/E)^n \quad (3.11)$$

donde E_{ob} , es la menor de las energías correspondientes a las dos orillas de absorción sucesivas, C es una constante para todos los intervalos de energías mientras que el exponente n depende de la energía E .

Con base en la ecuación (3.11), los autores calculan los parámetros C , E_{ob} y n para cada uno de los elementos de número atómico en el intervalo $1 < Z < 94$, construyendo tablas de estos parámetros para diversos pares de orillas de absorción de cada elemento.

Los valores del coeficiente μ/p , obtenidos por este proceso para algunos elementos como: Sodio, Magnesio, Neodimio entre otros, son comparados con los resultados experimentales respectivos obtenidos por Wuilleumier [20] y Dalton [21] obteniéndose en general una discrepancia de menos del 5%.

Continuando con la descripción de los procesos de cálculo para la obtención de valores del coeficiente μ/p , se presenta a continuación el trabajo desarrollado por Montenegro, et al [22].

Los autores obtienen valores del coeficiente μ/p para elementos cuyo número atómico esté comprendido en el intervalo siguiente, $6 < Z < 33$. Emplean las energías de las líneas de rayos-x características, líneas K y L, de los elementos con número atómico en el intervalo $17 < Z < 94$.

Por medio de un proceso de interpolación, de los valores obtenidos del coeficiente μ/p obtenidos por Storm e Israel [23], que consistió en ajustarlos a un polinomio de tercer grado de la forma:

$$Y = A_0 + A_1x + A_2x^2 + A_3x^3 \quad (3.12)$$

donde $Y = \ln(\mu/p)$ y $x = \ln(E)$

obtienen los valores del coeficiente μ/p para los elementos mencionados.

En la expresión (3.12) μ es el coeficiente de atenuación lineal de un elemento en particular, p es la densidad respectiva y E es la energía de los rayos-x expresada en KeV.

Debido a las orillas de absorción de cada elemento atenuador, el ajuste de los datos fue condicionado de la siguiente manera: Cuando las energías E , de los rayos-x fueran mayores a una orilla de absorción en particular, los valores respectivos a estas energías del coeficiente másico de atenuación, se ajustaron a un polinomio $Y_1(x_1)$ de la forma de la ecuación (3.12). Para las

energías, por abajo de la orilla de absorción, los valores del coeficiente másico de atenuación fueron ajustados a otro polinomio $Y_2(x_2)$. Para cada uno de los elementos atenuadores los autores calcularon los respectivos coeficientes A_0, A_1, A_2 y A_3 .

Los autores comparan sus resultados obtenidos por el proceso anterior con los respectivos valores experimentales obtenidos por Millar y Greening [13] y los resultados semiempíricos obtenidos por Hubbell [24]. De esta comparación resultó que, en general, las diferencias entre los valores comparados son menores al 4% en el intervalo de energías estudiado.

Las energías de los rayos-x de las líneas $K\alpha$ correspondieron a las energías de las líneas $K\alpha_1$ y $K\alpha_2$, las respectivas energías $K\beta$ correspondieron a las energías de las líneas $K\beta_1, K\beta_2$ y $K\beta_3$. También se consideraron las transiciones $L\alpha_1$ y $L\alpha_2$ para las líneas $L\alpha$ como también se consideraron las líneas $L\beta_1$ y $L\beta_2$ para las correspondientes transiciones $L\beta$ y $L\gamma$.

CAPITULO CUARTO

En el presente capítulo se describe el experimento de transmisión de rayos-x que se desarrolló para la medición de los coeficientes másicos de atenuación de rayos-x de los elementos Vanadio y Hafnio. También se describen los elementos que conforman el dispositivo experimental, los cuales, fundamentalmente, son las instalaciones del Laboratorio del Acelerador Van de Graeff de 0.7 Mev perteneciente al Instituto de Física de la U N A M.

4.1 Experimento de transmisión de rayos-x.

Básicamente, este tipo de experimento consiste en medir la intensidad I_0 de un haz de rayos-x monoenergético que incide normalmente sobre la ventana de un detector. Posteriormente, la muestra del material atenuador es colocada, con su superficie perpendicular al haz de rayos-x, entre la fuente generadora del haz y el detector para así medir la intensidad I del haz atenuado.

Por medio de estas dos intensidades y la ley de Beer-Lambert es factible determinar el coeficiente másico de atenuación de rayos-x del material.

Los elementos que conforman el dispositivo experimental, y que se describen en seguida, (fig.4.1) son:

- a) Fuente de rayos-x (acelerador Van de Graeff).
- b) Sistema de detección de rayos-x.
- c) Cámara de dispersión.

4.2 Fuente de rayos-x.

El proceso por el cual se generaron los rayos-x de las energías empleadas en el experimento, es el mismo que emplea la técnica de análisis PIXE (25) y consiste fundamentalmente de lo siguiente:

Una muestra de un elemento puro es bombardeado sobre su superficie por un haz de protones (producido por un acelerador tipo Van de Graeff) los cuales ionizan las capas internas de los átomos dejándolos en un estado excitado. Como se mencionó anteriormente, existen dos procesos principales por el cual los átomos regresan a su estado base: emisión de rayos-x

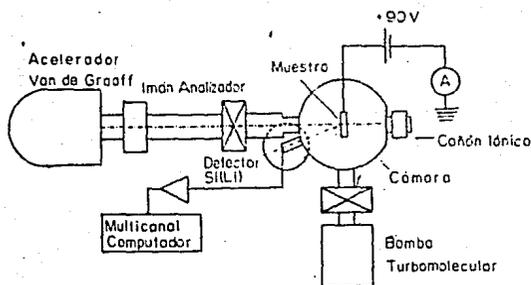


Fig. 4.2. Elementos que conforman el dispositivo experimental.

característicos y emisión de electrones Auger. Son los rayos-x característicos emitidos los empleados en el experimento de transmisión. Como consecuencia de este proceso de ionización, se crean vacantes en cualquiera de las capas internas de los átomos. Los electrones que ocupan estas vacantes, provienen de cualquier otra capa más externa a la originalmente vacía, y de acuerdo a la mecánica cuántica, de este modo se producen una gran cantidad de transiciones (y de energías) por las cuales son emitidos fotones de rayos-x. Las principales transiciones electrónicas se muestran en la fig. 4.2.A todas estas transiciones les corresponde una línea de rayos-x característica y de la fig. 4.2 vemos que la línea K_{α} se produce de la transición de un electrón del subnivel L_3 de la capa L al nivel de la capa K; la línea K_{β} de la transición del subnivel L_2 al nivel de la capa K y las demás líneas se describen análogamente. Las transiciones más probables son aquellas denotadas con el subíndice α y les siguen en orden decreciente las líneas β y las líneas γ .

Las líneas de rayos-x producidas en transiciones hacia la capa K tienen la característica de ser isotrópicas, mientras que las líneas L no lo son, debido a la asimetría espacial de esta capa. Sin embargo, las líneas L más importantes se pueden considerar isotrópicas con un margen de error máximo de 2 %.

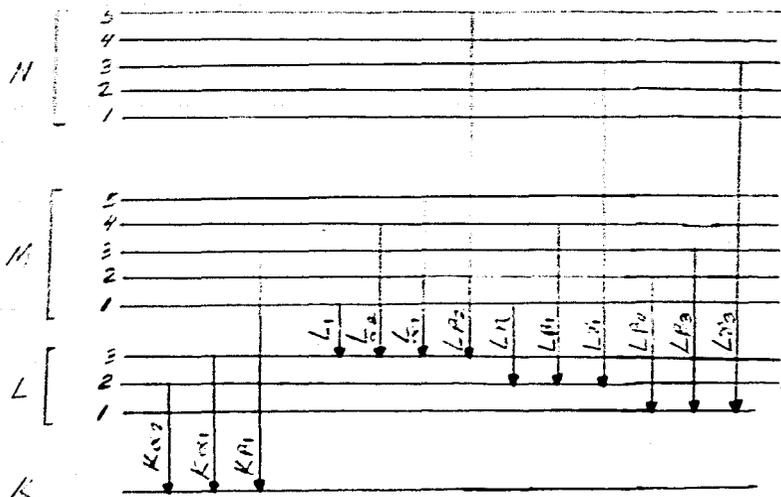


Fig. 4. 2. Transiciones electrónicas y líneas de rayos-x más importantes.

Las ventajas más sobresalientes por las cuales fue elegida esta fuente de rayos-x son, en primer término: porque produce rayos-x totalmente monoenergéticos de una energía que se puede determinar perfectamente, en segundo término: un solo elemento puede originar varias líneas simultáneamente, permitiendo de esta forma, mediciones del coeficiente másico de atenuación para un amplio intervalo de energías. Por último, el conocer la energía de las líneas de rayos-x permite manipular el intervalo de energías en una forma conveniente, como sería el efectuar mediciones alrededor o lejos de alguna orilla de absorción de un material atenuador.

Acelerador Electrostático Van de Graaff.

Para producir el haz de protones se empleó un acelerador Van de Graaff modelo ANS-700 fabricado por la compañía High Voltage Engineering Corporation. Tal acelerador permite producir haces de protones con energías que cubren un intervalo de 0.1 MeV hasta 0.700 MeV. En la figura 4.3 se muestra el interior del acelerador señalando sus componentes más importantes.

Los protones son producidos dentro del acelerador, ionizando átomos de Hidrógeno por medio de una fuente de iones de radio-frecuencia. Las ondas de radio-frecuencia se aplican a dos electrodos en una cámara de ionización fabricada con cuarzo.

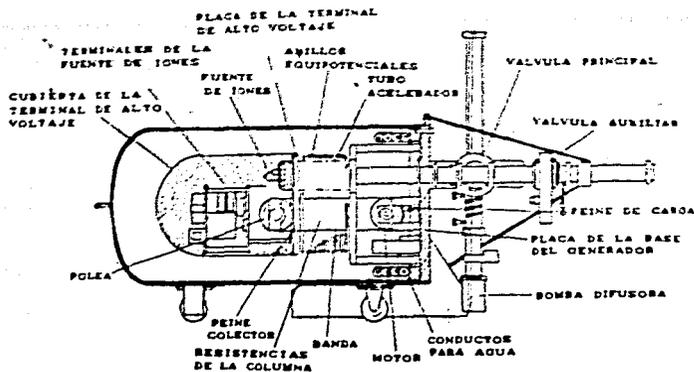


fig. 4.3. Interior del acelerador van de Graaff de 0.7 Mev.

El interior de la cámara es atravesado por un campo magnético fijo inducido por un sistema de cuatro imanes cilíndricos que rodea a la cámara. La fuente de iones básicamente está diseñada para ionizar átomos de Hidrógeno y de Helio. Sin embargo, permite, bajo las modificaciones pertinentes, ionizar cualquier tipo de gas.

Básicamente, las partículas ionizadas adquieren una aceleración por medio de una diferencia de potencial eléctrico producida entre una terminal de alto voltaje y tierra. La terminal de alto voltaje es cargada eléctricamente por medio de una banda, móvil por un sistema de poleas, que transporta a la terminal de alto voltaje la carga eléctrica suministrada por una fuente de voltaje de 20 K.V a través de un sistema de peines de carga. La carga se deposita por la banda en la terminal de alto voltaje, que se encuentra separada de la terminal aterrizada, por un sistema de 19 platos equipotenciales de una impedancia de 1250 megohms cada uno de ellos.

Dentro de la terminal de alto voltaje (con forma de paraboloide de revolución) se encuentra la fuente de iones y los sistemas electrónicos por los cuales se controla la producción de iones: tipo, cantidad y enfoque primario, así como la energía a la cual van a ser acelerados. Tanto el sistema electrónico, de ionización y la terminal de alto voltaje se encuentran totalmente

aislados. Debido a esto, son alimentados eléctricamente por una corriente producida por un generador de corriente alterna conectado al sistema mecánico de las poleas de la banda. La corriente producida por este generador tiene una frecuencia de 400 Hz.

La diferencia de potencial entre las terminales se mide empleando un voltmetro generador [27] que produce y envía a la consola de control, pulsos de voltaje proporcionales en altura a la diferencia de potencial entre las terminales.

El interior del acelerador tiene una atmósfera de hexafluoruro de Azufre, a una presión de 5 kg/m^2 como medio aislante entre el interior y el exterior, del acelerador electrostático.

Una vez producido el haz de protones, éste es enviado a las diferentes líneas de conducción por medio de un separador de masas del tipo de segmento magnético [27].

El analizador magnético es capaz de orientar el haz de protones proveniente del acelerador a cuatro líneas de conducción a 22.50° , -22.50° , 45° y -45° . Para el experimento de transmisión de rayos-x se utilizó la línea de conducción que forma un ángulo de 22.50° con respecto a la línea de la dirección original del haz. La línea seleccionada está comunicada a la cámara de dispersión que se emplea en el análisis PIXE.

La línea de conducción de 22.50° está construida con un sistema de tubos de acero inoxidable de un diámetro de 0.06 m, interconectados a través de una longitud aproximada de tres metros. A lo largo de esta línea se encuentran varios dispositivos conectados a la línea como son: una trampa de Nitrógeno líquido, sensor de retroalimentación del acelerador, válvulas electroneumáticas y una bomba turbomolecular. Las posiciones que ocupan estos dispositivos a lo largo de la línea de conducción se muestran en la figura 4.4.

La función de la trampa de Nitrógeno líquido es condensar y evacuar gases contaminantes del interior de la línea de conducción, que posiblemente fuerón ionizados o transportados por

el haz de protones.

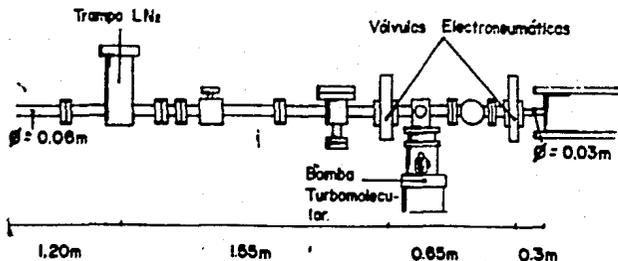


Fig. 4.4. Línea de conducción del haz de protones y sus principales componentes.

El sistema de vacío de la línea de conducción, está constituido por una bomba turbomolecular modelo TPU110 de 0.725 KHz, con velocidad de bombeo de 110 l/seg acoplada a una bomba mecánica modelo DUD 1.5A, capaz de evacuar $1.5 m^3/hr$.

Las válvulas electroneumáticas aparte de conservar el vacío apropiado, ofrecen la opción de aislar la cámara de dispersión de la línea de conducción y mantener un bombeo más lento, de ser necesario, con la bomba turbomolecular. Estas válvulas son automáticas, lo cual garantiza que en caso de suspensión de energía eléctrica se clausuren, evitando así la entrada de gases e impurezas al interior de la cámara.

4.3 Sistema de detección de rayos-x.

El detector empleado es un detector semiconductor con Litio difundido. Un detector de este tipo consiste de un cristal sencillo semiconductor de Silicio (o Germanio) que tiene una región acotada por regiones de material tipo-p y tipo-n. Esta región es formada difundiendo Litio en Silicio tipo-p. Debido a que el Litio posee una extremadamente alta rapidez de difusión a temperatura ambiente, tales detectores deben ser mantenidos a temperatura de Nitrógeno líquido todo el tiempo, aún cuando no se encuentren en

funcionamiento. En condiciones de operación, una diferencia de potencial aplicada a través de los extremos del detector, y el campo eléctrico resultante disminuyen la región acotada (región de agotamiento) con el movimiento de "vacantes electrónicas" y cargas libres. La región de agotamiento constituye el volumen sensible a la radiación del detector, y típicamente tiene un área de 30 a 100 mm^2 , y una profundidad de 2 a 5 mm. Debido a la región de agotamiento formada, el detector de Silicio-Lítio, $\text{Si}(\text{Li})$, es un dispositivo de alta impedancia.

Cada fotón de rayos-x incidente que se absorbe en la región de agotamiento, produce un gran número de pares electrón-vacante en el semiconductor, en forma análoga a como se producen los pares ion-electrón en los detectores gaseosos o fotones de luz en un detector de centelleo. Sin embargo, el detector de $\text{Si}(\text{Li})$ no posee una alta amplificación de las señales, como aquella suministrada por la multiplicación gaseosa y la multiplicación de electrones secundarios en los detectores respectivos. Como consecuencia, el detector de $\text{Si}(\text{Li})$ requiere de un sistema electrónico que garantice una alta ganancia de preamplificación y un nivel de ruido térmico asociado muy bajo. Para esto, se usa frecuentemente un transistor de efecto de campo o FET, el cual también debe ser mantenido a temperatura de Nitrógeno líquido (-196°C) para reducir el nivel de ruido térmico. Por los requisitos anteriores, actualmente un detector de $\text{Si}(\text{Li})$ o $\text{Ge}(\text{Li})$ y el FET asociado son ensamblados térmicamente a un criostato contenedor del Nitrógeno Líquido como se muestra en la figura 4.5.

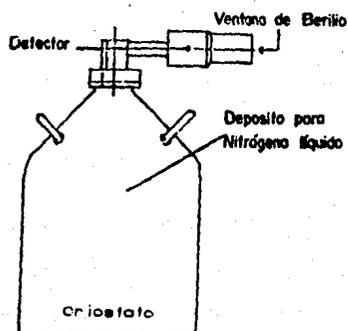


Fig. 4. 5. Aspecto de un detector de $\text{Si}(\text{Li})$ moderno.

La eficiencia de detección de este tipo de detectores, definida como la razón del número de fotones registrados al número de fotones incidentes en el detector, es una función del número atómico del material semiconductor y de la profundidad de la región de agotamiento, entre otros factores. Por ejemplo, una capa de Silicio de 3mm de espesor absorbe el 50% de los fotones incidentes de energía de 30 KeV, pero la absorción fotoeléctrica decrece rápidamente con el incremento de la energía de los fotones, por lo que la eficiencia también depende de la energía de la radiación incidente.

De lo anterior, los detectores de Si(Li) tienen un funcionamiento óptimo para energías de los fotones menores a 31.01 KeV (línea K α del Cesio) aunque los detectores de Ge(Li) son preferibles para energías más altas. Ambos detectores semiconductores, Si(Li) y Ge(Li), tienen las siguientes tres principales ventajas:

- 1.- La conversión de la energía de los fotones incidentes es muy eficiente. Por ejemplo, sólo se requieren 3 eV para producir un par electrón-vacante, comparados con los 20 a 26 eV que se requieren para producir un par electrón-ion en un detector gaseoso y 50 eV para producir un fotón de luz en un detector de centelleo.
- 2.- De lo anterior se sigue que la resolución es excelente; el factor FWHM de la altura de pulso de los picos puede ser más pequeño a 1.1 KeV para fotones de energía entre 6 y 8 KeV, y líneas espectrales de las mismas series, de elementos de números atómicos cercanos pueden ser muy bien definidas.
- 3.- La tercera ventaja de los detectores de Si(Li) y Ge(Li) es la buena respuesta de la altura y anchura de pulso a intensidades por arriba de 15000 cuentas/seg.

En el extremo opuesto, la desventaja principal de estos detectores es el factor de alta difusión del Litio que causa un deterioro sustancial de las características de los detectores, aún cuando estos se encuentran a temperatura ambiente, por lo que deben ser mantenidos a perpetuidad a temperatura de Nitrógeno

líquido. El detector empleado en este trabajo de tesis, es un detector de Si(Li) ORTEC modelo 7113-06165 con un diámetro de la región activa del detector de 6.0 mm y una profundidad del volumen activo de 5.0 mm, que tiene forma cilíndrica.

La ventana del detector es una lámina de Berilio con un espesor de 0.0125 mm, seguida por un electrodo de Oro con un espesor de 200 Å. La capa muerta del detector es de aproximadamente 0.1 µm. La distancia de separación entre la ventana y el cristal detector es de 8 mm.

La resolución del detector cuando fue adquirido [9-14-1976] era de 156 eV a una energía de 5.9 KeV (línea K α Mn) y de 164 eV para una energía de los rayos-x de 6.4 KeV.

Debido a que en el transcurso del tiempo, este tipo de detectores ven afectados sus parámetros: resolución, intervalos de energías y eficiencia, se efectúa periódicamente una nueva calibración del sistema.

Adicionalmente al detector de Si(Li), se encuentra el sistema electrónico asociado que tiene como función el procesamiento de los pulsos eléctricos provenientes del cristal semiconductor.

Este sistema electrónico consta de: fuente de alto voltaje, preamplificador, amplificador, analizador multicanal, integrador de corriente y computadora.

La fuente de voltaje empleada es ORTEC Mod.459 que proporciona voltajes de 0 a 5 kilovolts y tiene como finalidad suministrar el voltaje de operación al detector de Si(Li). Tal voltaje es de -1500 volts.

El sistema preamplificador forma parte del detector mismo y se utilizó un preamplificador criogénico de bajo ruido ORTEC Mod.17016-10230. La terminal de salida del preamplificador es conectada por un cable coaxial a la terminal de entrada del amplificador principal situado en la consola del sistema electrónico. En general, estos preamplificadores poseen un dispositivo electrónico que proporciona un acoplamiento de impedancias óptimo y una atenuación mínima de la señal a lo largo

del cable coaxial. Los preamplificadores también protegen la amplificación de la señal de retroalimentación relativa al detector.

La función básica, y en sentido general, de un amplificador principal, es aplicar una amplificación lineal a los pulsos de salida del sistema detector-preamplificador, convirtiéndolos en pulsos de una altura en voltaje lo suficientemente grandes para ser procesados por los demás dispositivos: analizador de altura de pulsos, contador, escalador u otros sistemas.

El amplificador usado es ORTEC 572 con los siguientes parámetros de operación:

Ganancia (grueso) 50

Ganancia (fino) 5.50

Tiempo de formación de pulso 2.0 μ seg

Polarización de pulso negativa.

La señal amplificada proveniente del detector es finalmente transmitida hacia una tarjeta electrónica microcontrolada ADCAM MCA marca ORTEC. Este sistema es propiamente un sistema analizador multicanal en miniatura construido con base en el microprocesador Z-80A, el cual posee un tiempo muerto fijo equivalente al tiempo de conversión analógica-digital de las señales eléctricas. Esta tarjeta es acoplada a una microcomputadora compatible.

La versatilidad de este tipo de tarjetas permite grabar en discos magnéticos la información obtenida de cada espectro para su análisis posterior.

Como último dispositivo, se encuentra un integrador de corriente ORTEC Mod.438 conectado al portamuestras donde se colocan los materiales a ser bombardeados por protones. Esto se hace con el objetivo de medir el número de protones incidentes (carga) sobre las muestras para la posterior normalización del número de rayos-x inducidos por protón, es decir, número de cuentas entre número de protones y en general la unidad de carga empleada es el micro-coulomb, μ C.

El diagrama de bloques del sistema electrónico se muestra en la figura 4.6.

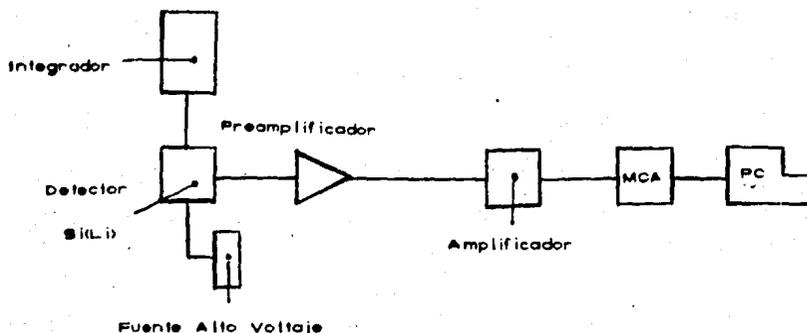


Fig. 4.6. Diagrama de bloques, sistema electrónico.

4.4 Cámara de dispersión.

El lugar donde se efectuaron los experimentos de transmisión tuvo lugar en una cámara cilíndrica con varias entradas fabricada en acero inoxidable y diseñada para realizar análisis con la técnica PIXE. Las nueve entradas de la cámara están situadas a lo largo de la superficie lateral de la misma. La fig. 4.7 muestra el interior de la cámara y los diversos dispositivos que se emplearon en los experimentos.

Refiriéndonos a la fig. 4.7, se observa que el detector de Si(Li) se encuentra a un ángulo de 20° con respecto a la dirección de incidencia del haz de protones producido por el acelerador.

La ventana del detector está protegida por una película de Mylar.

Fue construido un disco cilíndrico de plomo con un diámetro de 4 cm y con espesor (altura) de 7 mm que se ensambló sobre un soporte de aluminio con una cavidad circular de un radio de 3.07 cm en cuyo interior fueron colocadas las muestras de materiales atenuadores para los cuales se midieron los respectivos coeficientes másicos de atenuación.

Sobre la superficie del disco de plomo se hizo una perforación circular de 1 mm de diámetro y de una profundidad de 7 mm que funcionó como colimador.

Este colimador durante el transcurso de los experimentos, fue colocado sobre la ventana del detector, de tal forma que se garantizara una posición reproducible, dado que era necesario desmontarlo para colocar en su interior el material atenuador una vez hecha la medida de la intensidad de los rayos-x sin atenuación.

El ángulo formado entre las superficies de contacto de la ventana del detector y el soporte de aluminio, se minimizó de tal forma que se garantizara la incidencia normal, a la superficie del material atenuador, del haz de rayos-x a transmitirse.

El plomo que se empleó en la fabricación del colimador, permite atenuar posibles contribuciones de la radiación de frenado producidas por el haz de protones, así como las posibles emisiones de rayos-x por parte de los dispositivos en el interior de la cámara.

Los materiales sobre los cuales se indujeron los rayos-x, se colocaron en un portamuestras con forma de prisma rectangular, fabricado con aluminio, el cual está montado en un goniómetro graduado en grados sexagesimales, con una precisión de $\pm 0.05^\circ$.

Sobre cada una de las cuatro caras del portamuestras, es posible colocar un material distinto a ser bombardeado y cuya posición queda determinada en la escala del goniómetro. De esta forma era posible girar el portamuestras en una secuencia de $0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$ y 270° , que corresponden a las posiciones de cada material, y así producir los rayos-x deseados sin necesidad de abrir la cámara para cambiar las muestras.

Este sistema portamuestras está aislado eléctricamente de la cámara de dispersión por medio de un conector de nylon, gracias a este aislamiento es posible coleccionar la carga producida en el portamuestras conectándolo directamente al integrador de corriente.

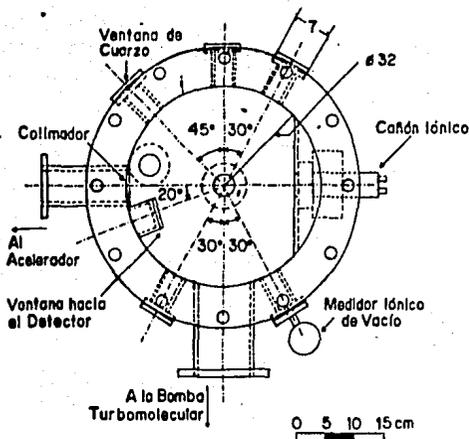


Fig. 4. 7. Cámara de dispersión para análisis PIXE.

El eje principal del portamuestras es horizontal formando un ángulo de 90° con la dirección del haz de protones.

La distancia entre el portamuestras y la salida del haz de protones es de 14 cm, mientras que la distancia al colimador de plomo es de 10.5 cm.

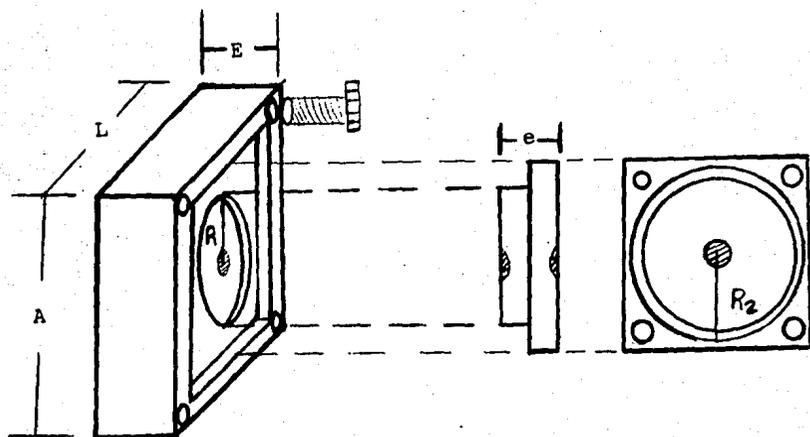
Con la finalidad de: proteger de los efectos de oxidación producidos en las superficies de los materiales atenuadores y bombardeados, de desprestigiar el factor de atenuación de los rayos-x por el aire y de mantener la atmósfera libre de impurezas, la cámara de dispersión cuenta con un sistema de vacío para evacuar el interior de ésta.

Conectada en la salida mayor de la cámara, a un ángulo de 90° del eje principal, se encuentra una bomba turbomelecular marca Pfeiffer modelo TPU-270 con capacidad de extracción de 270 l/seg con una frecuencia de giro de turbina de 1KHz, con un sistema de soporte de vacío mecánico que consiste de una bomba Pfeiffer modelo DU012A con velocidad de vacío de $17m^3/hr$.

La ventaja de este sistema de vacío es el brindar un proceso

de evacuación rápido y limpio. Adicionalmente, a la entrada del haz de protones a la cámara, se colocó un disco de acero con un orificio circular centrado de 1mm de diámetro con el objetivo de colimar el haz, para lograr de esta forma un flujo de protones incidentes que se pudiera considerar constante.

El haz de protones incidente sobre las muestras a bombardearse, incide sobre un área de 1.1 mm de diámetro sobre estas. Esta región de incidencia, con respecto a la distancia portamuestras-detector, es de sólo el 1.04 %. Por lo que puede considerarse a esta región de emisión de rayos-x, como puntual.



Largo=4 cm
 Altura=4.5 cm
 Espesor=1.5 cm

Colimador  = 1 mm
 espesor=7 mm
 $R=1.55$ cm

$R_2=2$ cm
 = orificios de sujeción

Fig. 4. 8. Portamuestras de materiales atenuadores y colimador de plomo.

CAPITULO QUINTO

Los elementos Hafnio y Vanadio fueron seleccionados para determinar experimentalmente sus coeficientes másicos de atenuación de rayos-x.

El intervalo de energía de fotones en el cual fue medido el coeficiente del Hafnio es de 6.922 KeV a 9.818 KeV, mientras que para el Vanadio fueron empleadas energías en el intervalo de 4.508 KeV a 5.427 KeV.

5.1 Selección de materiales atenuadores.

El elemento Vanadio fue elegido como material atenuador para medir su coeficiente másico de atenuación de rayos-x. La cantidad de valores experimentales reportados de su coeficiente de atenuación, es muy amplia [29]. Esto permite someter el dispositivo experimental, descrito en el capítulo cuatro, a una prueba de confiabilidad: medir el coeficiente de atenuación de rayos-x del Vanadio y compararlo con los valores calculados por varios autores, de esta comparación se podrá asegurar si el dispositivo experimental es o no aplicable a la medición de coeficientes másicos de atenuación de rayos-x.

La principal razón por la cual fue seleccionado el Hafnio, es que no existe una gran cantidad de valores experimentales de su coeficiente másico de atenuación reportados en la literatura científica. Lo anterior está confirmado en el trabajo de recopilación, y también de cálculo, de valores experimentales de coeficientes de atenuación de rayos-x, hecho por Hubbell et.al. [29]. En este trabajo los autores reportan un solo valor experimental del coeficiente de atenuación de rayos-x del Hafnio, en el intervalo de energía de 0.1 KeV a 1 KeV [30].

También, en el intervalo de energía de 1 KeV a 10 KeV, se reporta un solo valor del coeficiente de atenuación del Hafnio [31], y en el intervalo de 10 KeV a 100 KeV, se encuentran reportados un total de dieciseis valores experimentales del coeficiente, [31], [32], [33] y [34].

Con base en los valores experimentales que se logren obtener del coeficiente de atenuación de rayos-x del Hafnio, se efectuará una evaluación de las diversas expresiones teóricas y

semiempíricas, así como de las tablas, que se utilizan para calcular valores del coeficiente másico de atenuación de rayos-x. Con esta comparación de las diversas expresiones y tablas, se seleccionará cual de ellas es la más conveniente para el análisis cuantitativo con la técnica PIXE.

En la tabla 5.1 están señaladas las líneas de rayos-x y sus respectivas energías, inducidas por bombardeo de protones en los elementos correspondientes que se utilizaron para medir el coeficiente másico de atenuación del Vanadio.

La tabla 5.2 muestra las líneas, energías y elementos que se emplearon para medir el coeficiente de atenuación de rayos-x correspondiente al Hafnio.

En los experimentos de transmisión, tanto para el Hafnio como para el Vanadio, se usó un haz de protones con energía de $(700 \pm 5) \text{ KeV}$.

Tabla 5.1. Líneas y energías de rayos-x usadas en el experimento de transmisión del Vanadio.

Elemento	Línea	Energía (KeV) [2]
Ti	K α	4.508
Ti	K β	4.932
V	K α	4.948
Cr	K α	5.410
V	K β	5.427

Tabla 5.2. Líneas y energías de rayos-x usadas en el experimento de transmisión del Hofnio.

Elemento	Línea	Energía (KeV) (2)
Co	K α	6.922
Ni	K α	7.469
Co	K β	7.649
Hf	L α	7.898
Cu	K α	8.038
Ta	L α	8.117
Ni	K β	8.265
W	L α	8.365
Zn	K α	8.627
Cu	K β	8.905
Hf	L β_1	9.048
Ta	L β	9.494
Zn	K β	9.572
W	L β	9.818

5.2 Coeficiente másico de atenuación de rayos-x Vanadio.

Para determinar el coeficiente de atenuación del elemento Vanadio, se usó una lámina rectangular de este elemento con un área de $(2.56 \pm 5.6 \times 10^{-3}) \text{cm}^2$ y un espesor, dato proporcionado por la Aldrich Chemical Co., de $(50 \times 10^{-6} \pm 2.5 \times 10^{-6}) \text{m}$ (medida comprobada con un tornillo micrométrico) y una pureza de 99.5 %.

Se indujeron las líneas K α y K β de rayos-x de los elementos Titano, Vanadio, Cromo y Manganeseo. Las energías respectivas a estas líneas están indicadas en la tabla 5.1. En esta tabla no aparecen las líneas K α y K β del Manganeseo debido a que sus energías, 5.897 KeV y 6.495 KeV [2] respectivamente, son muy cercanas a la energía de enlace de un electrón en el nivel K del átomo de Vanadio, 5.465 KeV [2], y por tanto sufrieron una atenuación muy grande, por lo que el registro del espectro

correspondiente fue muy difícil. Similarmente, la línea $K\beta$ del elemento Cromo no fue registrada debido a que sufrió una atenuación total por parte del Vanadio. La energía de la línea $K\beta$ del Cromo es de 5.957 KeV que es muy cercana a la energía de ligadura de 5.465 KeV del átomo de Vanadio.

Debido a lo anterior, sólo son reportadas las líneas $K\alpha$, $K\beta$ del Titanio y Vanadio y la línea $K\alpha$ del Cromo.

Los espectros de las líneas $K\alpha$ y $K\beta$ obtenidos del experimento de transmisión, están constituidos por dos picos: uno correspondiente a la línea $K\alpha$ y el otro correspondiente a la línea $K\beta$, como se muestra en la figura 5.1.

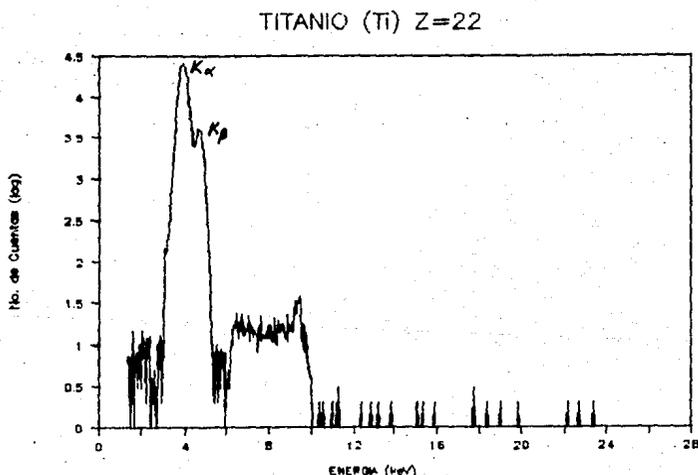


Fig. 5.1. Espectro de las líneas $K\alpha$ y $K\beta$ de rayos-x del elemento Titanio (haz de protones de 0.700MeV).

Se procedió a medir las intensidades I_0 e I de las líneas de rayos-x inducidas. Para obtener las intensidades correspondientes a cada línea de rayos-x, fue necesario restar a cada número de cuentas por canal, la radiación de fondo correspondiente. Ya sin radiación de fondo, las parejas de valores (número de canal, número de cuentas), fueron graficados en papel semilogarítmico. Al ser graficados los espectros se notó, que en general, las parejas de picos correspondientes a las líneas $K\alpha$ y $K\beta$, se superponen. Por lo anterior, fue necesario, por métodos gráficos, ajustar curvas gaussianas a cada uno de los espectros obtenidos. Logrando de esta forma, definir completamente la curva de contorno de cada pico, para posteriormente, calcular el área bajo la curva, cuya magnitud representa el número de fotones (o cuentas) de rayos-x registrados de cada línea inducida.

Los valores de intensidades I_0 e I , fueron normalizadas por el número de protones incidentes que las produjeron. Es decir, ahora son expresadas en unidades de No. de cuentas/ μC , para obtener el número de rayos-x producidos por protón incidente. Estos valores normalizados, I_0' e I' , son señaladas en la tabla 5.3.

Tabla 5.3. Líneas y energías de rayos-x empleadas en el experimento de transmisión correspondiente al Vanadio e intensidades correspondientes.

Elemento	Línea	Energía (KeV)	I_0' (cuentas/ μC)	I' (cuentas/ μC)
Ti	$K\alpha$	4.508	3142 \pm 14	71 \pm 1
Ti	$K\beta$	4.932	450 \pm 5	25 \pm 1
V	$K\alpha$	4.948	2392 \pm 12	141 \pm 2
Cr	$K\alpha$	5.410	2321 \pm 12	187 \pm 2
V	$K\beta$	5.427	338 \pm 4	35 \pm 1

Los valores experimentales obtenidos del coeficiente másico de atenuación de rayos-x del Vanadio, muestran en general, magnífica concordancia con los valores pronosticados por los autores citados. Debe mencionarse que los cinco valores de la energía de los rayos-x usados en el experimento, son menores a la energía de enlace de la capa K del átomo de Vanadio, que es de 5.465 KeV (2).

La comparación gráfica de los valores experimentales con los valores teóricos se muestra en la figura 5.2.

Con base en las comparaciones cuantitativa y gráfica, los valores experimentales del coeficiente másico de atenuación de rayos-x del Vanadio, garantizan que el dispositivo diseñado para tal efecto es confiable.

Por tanto, se procedió a medir el coeficiente másico de atenuación de rayos-x del Hafnio.

5.3 Coeficiente másico de atenuación de rayos-x Hafnio.

En el experimento de transmisión se utilizaron dos láminas del elemento Hafnio de las siguientes dimensiones:

	Largo(cm)	Ancho(cm)	Area(cm ²)
Lámina uno	$1.567 \pm 2.5 \times 10^{-3}$	$1.623 \pm 2.5 \times 10^{-3}$	$2.543 \pm 7.98 \times 10^{-3}$
Lámina dos	$1.780 \pm 2.5 \times 10^{-3}$	$1.900 \pm 2.5 \times 10^{-3}$	$3.382 \pm 9.20 \times 10^{-3}$

El espesor de ambas láminas es de 20 μ m, según el dato proporcionado por la Aldrich Chemical Company Inc. Empresa a la cual fue comprado el material. La medida del espesor, al igual que con la lámina de Vanadio, se comprobó con un tornillo micrométrico.

La pureza del Hafnio adquirido, garantizada por la compañía Aldrich, es del 99.5 %, excluyendo la presencia del 2 % al 4 % del elemento Zirconio. El Zirconio, cabe señalar, es muy difícil de separar del elemento Hafnio.

Se procedió a medir las intensidades I_0 e I de las líneas de rayos-x inducidas. Primero fueron medidas las intensidades correspondientes a las líneas $K\alpha$ y $K\beta$ de los elementos: Cobalto, Zinc, Níquel y Cobre, utilizando la lámina uno como atenuador para

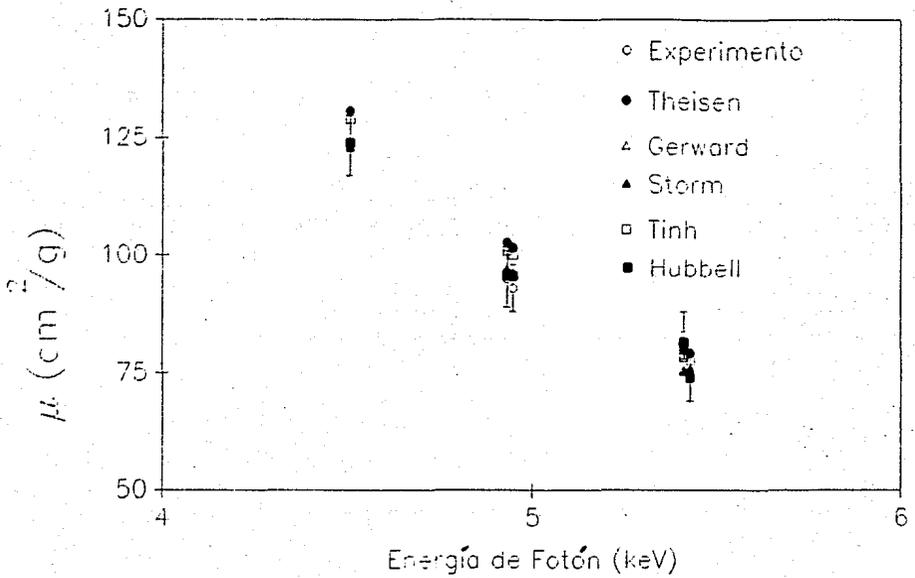


Fig. 5. 2. Comparación gráfica del coeficiente μ/ρ experimental del Vanadio, con los correspondientes valores teóricos.

posteriormente proceder a la medición de las intensidades respectivas de las líneas $L\alpha$ y $L\beta$ de los elementos: Tungsteno, Tantalio y Hafnio, ahora utilizando como atenuador la lámina dos y la lámina uno como blanco productor de rayos-x.

El tiempo de conteo de estas intensidades, incluyendo los tiempos de conteo hechas para el Vanadio, osciló entre un mínimo de 3.95 minutos y un máximo de 1.64 horas. Si bien, el tiempo de conteo es variable, en todos los registros de espectros se hizo lo posible por obtener una estadística aceptable.

Los espectros correspondientes a los tres elementos bombardeados están constituidos, en promedio, por seis picos como se ilustra en la figura 5.3.

TANTALIO (Ta) Z=73

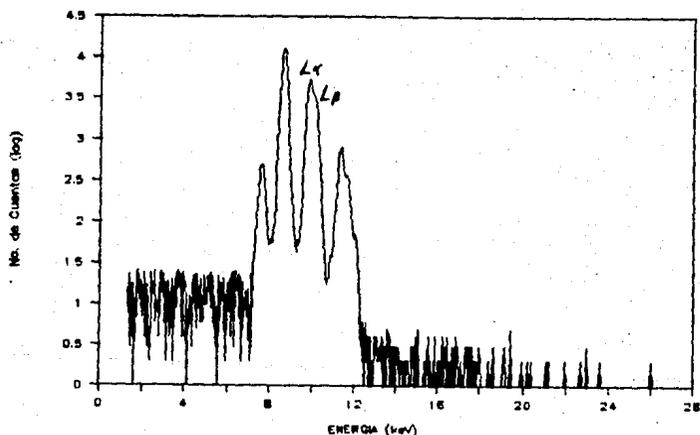


Fig. 5.3. Espectro de las líneas de rayos-x del elemento Tantalio.
(haz de protones de 0.700 MeV).

Los espectros respectivos a los elementos: W, Ta, Hf, Co, Zn, Ni y Cu, fueron sometidos al mismo proceso de análisis a que se sometió a los espectros del experimento de transmisión del Vanadio, para determinar las intensidades I_0 e I' de las líneas de rayos-x antes mencionadas. La tabla 5.5 muestra las líneas y energías de rayos-x, así como sus respectivas intensidades, que se obtuvieron del experimento de transmisión correspondiente al Hafnio.

Tabla 5.5. Líneas y energías de rayos-x empleadas en el experimento de transmisión correspondiente al Hafnio e intensidades correspondientes.

Elemento	Línea	Energía (KeV)	I_0 (cuentas/ μ C)	I' (cuentas/ μ C)
Co	K α	6.922	663 \pm 4	2 \pm 1
Ni	K α	7.469	724 \pm 4	5 \pm 1
Co	K β	7.649	97 \pm 1	1 \pm 0.042
Hf	L α_1	7.898	264 \pm 2	4 \pm 1
Cu	K α	8.038	541 \pm 3	10 \pm 1
Ta	L α	8.117	246 \pm 2	4 \pm 1
Ni	K β	8.265	105 \pm 1	21 \pm 1
W	L α	8.365	224 \pm 1	6 \pm 1
Zn	K α	8.627	410 \pm 3	13 \pm 1
Cu	K β	8.905	76 \pm 1	3 \pm 1
Hf	L β_1	9.048	166 \pm 1	10 \pm 1
Ta	L β	9.494	154 \pm 1	7 \pm 1
Zn	K β	9.572	63 \pm 1	0.58 \pm 0.034
W	L β	9.818	2544 \pm 15	1.22 \pm 0.077

Las intensidades I_0 e I' fueron utilizadas para determinar el coeficiente de atenuación de rayos-x del Hafnio utilizando la ecuación 5.1, donde ahora se tiene:

x = espesor de la lámina ($2 \times 10^{-3} \pm 1 \times 10^{-4}$) cm

ρ = densidad del Hafnio (13.28 gr/cm^3) [2]

Los valores (provisionales) del coeficiente de atenuación de rayos-x están tabulados en la tabla 5.6 y se comparan con los predichos por: Theisen y Vollath [16], Gerward [35], Storm e Israel [23], Leroux [17], Burr [36] y Hubbell [29].

Tabla 5.6. Valores experimentales (provisionales) del coeficiente μ/p del Hafnio, comparado con cálculos teóricos. (Parte A)

Energía (KeV)	$\mu/p(\text{exp.})$ cm^2/gr	$\mu/p[16]$ cm^2/gr	$\mu/p[35]$ cm^2/gr
6.922	217±12	228.571	233.340
7.469	183±10	188.257	191.310
7.649	164±10	177.443	179.710
7.898	153±8	163.536	165.170
8.038	150±8	156.193	157.700
8.117	149±8	151.072	153.670
8.265	137±8	145.560	146.550
8.365	132±7	139.687	141.960
8.627	127±7	130.225	130.890
8.905	113±7	120.278	120.420
9.048	104±6	116.347	115.480
9.494	115±6	106.454	101.740
9.572	176±11	269.407	////////
9.818	288±17	262.373	////////

Tabla 5.6. Valores experimentales (provisionales) del coeficiente

μ/p del Hafnio, comparado con cálculos teóricos. (Parte B)

Energía (KeV)	μ/p (exp.) cm ² /gr	μ/p (23) cm ² /gr	μ/p (17) cm ² /gr	μ/p (36) cm ² /gr	μ/p (29) cm ² /gr
6.92	217±12	223.093	224.423	233.000	224.380
7.469	183±10	184.614	184.571	191.000	187.264
7.649	164±10	174.264	173.532	180.000	175.455
7.898	153±8	160.980	159.792	165.500	161.958
8.038	150±8	154.129	152.724	158.000	158.697
8.117	149±8	150.442	148.925	154.100	151.836
8.265	137±8	143.862	142.155	147.000	143.400
8.365	132±7	136.622	137.820	127.131	140.026
8.627	127±7	129.361	127.299	131.000	129.904
8.905	113±7	119.611	117.315	121.000	119.781
9.048	104±6	114.987	112.607	168.315	116.407
9.494	115±6	102.063	99.479	196.093	101.224
9.572	176±11	100.030	338.279	236.000	////////
9.818	288±17	93.928	318.653	////////	////////

Los valores experimentales mostrados en la tabla 5.6, muestran que están en buena concordancia con los valores pronosticados. Sin embargo, estos valores deben ser corregidos por el hecho de que no representan la atenuación de rayos-x debida únicamente al Hafnio, sino que también está incluida la atenuación del Zirconio, presente en las láminas atenuadoras.

El proceso por el cual fueron corregidos los valores experimentales, consistió en lo siguiente:

Debido a que el material atenuador consiste de dos elementos, el coeficiente de atenuación experimental se puede escribir como:

$$(\mu/p)_{\text{exp}} = (\mu/p)_{\text{Hf}} A + (\mu/p)_{\text{Zr}} B \quad (5.2)$$

donde el primer término es el coeficiente de atenuación del Hafnio y el segundo corresponde al coeficiente de atenuación del Zirconio.

Los factores A y B, representan respectivamente, las abundancias relativas de éstos elementos en el material atenuador.

De lo anterior obtenemos:

$$(\mu/p)_{Hr} = [(\mu/p)_{exp} - 0.03(\mu/p)_{Zr}] (0.97)^{-1} \quad (5.3)$$

donde ha sido considerado el dato de la compañía Aldrich que especifica que A=0.97 y B=0.03.

Los valores del coeficiente de atenuación del Zirconio, fueron tomados del trabajo hecho por Hubbell (29), en el cual calcula, por medio de modelos relativistas del átomo, las secciones eficaces totales de atenuación de rayos-x del átomo de Zirconio. Estos valores, convertidos a coeficientes de atenuación de rayos-x, se muestran en la tabla 5.7. Es importante señalar que estos valores son los más confiables que se conocen actualmente.

Tabla 5.7. Valores teóricos del coeficiente másico de atenuación de rayos-x del Zirconio (Tomados de la referencia (29)).

Energía (KeV)	$(\mu/p)_{Zr}$ cm^2/gr
6.922	199.913
7.469	161.753
7.649	150.199
7.898	138.645
8.038	137.787
8.117	127.421
8.265	121.810
8.365	112.236
8.627	105.634
8.905	98.042
9.048	95.071
9.494	81.206
9.572	79.226
9.818	75.924

Utilizando los valores del coeficiente de atenuación de rayos-x del Zirconio, y sustituyendolos en la ec. (5.3) obtenemos los coeficientes reales de atenuación de rayos-x del Hafnio que se muestran en la tabla 5.8.

Tabla 5.8. Valores experimentales corregidos del coeficiente másico de atenuación de rayos-x del Hafnio.

Energía (KeV)	$(\mu/\rho)_{Hf}$ cm^2/gr
6.922	218±12
7.469	183±10
7.649	165±10
7.898	154±9
8.038	151±8
8.117	150±9
8.265	138±9
8.365	133±8
8.627	129±7
8.905	114±7
9.048	104±6
9.494	117±7
9.572	179±12
9.818	294±17

Los valores experimentales obtenidos, del coeficiente másico de atenuación para el Hafnio, muestran una concordancia aceptable dentro del error experimental asociado a estos valores.

De la comparación cuantitativa de los valores experimentales con los valores teóricos, observamos que los primeros tienen una mejor concordancia con los valores pronosticados por Storm e Israel [23], Tihn y Leroux [17] y los predichos por Hubbell [29].

Por otra parte, los valores pronosticados por Theisen y Vollath [16], Gerward [35] y Burr [36] presentan una discrepancia notoria con los valores experimentales obtenidos, aunque esta falta de concordancia también está reflejada entre todos los valores teóricos.

La mayor discrepancia entre valores experimentales y teóricos se refleja en los valores del coeficiente respectivo a las energías de 9.572 KeV y 9.818 KeV. Estas energías son mayores a la energía de 9.561 KeV, que corresponde a la energía enlace electrónico del subnivel L_{III} del átomo de Hafnio. Esta región de energías cercanas a la orilla de absorción L_{III} del átomo de Hafnio es de interés por lo siguiente. La discrepancia entre todos los valores comparados se puede explicar, en primer término por el modelo matemático empleado en los cálculos teóricos por los diversos autores.

Por ejemplo, Gerward [35] utilizó un modelo del coeficiente de atenuación expresado en función de una potencia n de la energía y como término adicional la sección eficaz de dispersión de Klein-Nishina. Este modelo sin embargo, está limitado a ser usado en intervalos de energía que no contengan ninguna orilla de absorción. Por tanto, esta es una limitación del modelo que se refleja en la incapacidad de calcular el coeficiente de atenuación para las energías de 9.572 KeV y 9.818 KeV (ver tabla 5.6).

Semejante falta de confiabilidad se puede asociar a los valores del coeficiente, correspondientes a las energías de 9.572 KeV y 9.818 KeV, extrapolados de los valores calculados por Storm e Israel que se limitan a valores de la energía menores a 9.561 KeV.

Por último, los modelos matemáticos usados en los cálculos hechos por Tihm y Leroux y los hechos por Theisen y Vollath son muy semejantes, ec. (3.8) y ec. (3.11) respectivamente. Sin embargo, observamos que los valores del coeficiente de atenuación pronosticados por ambos modelos para las dos últimas energías de rayos-x, son seriamente distintos. Es importante mencionar una vez

más. que estos modelos. sólo son aplicables para intervalos de energía que no contengan ninguna orilla de absorción.

De lo anterior, los valores experimentales obtenidos para las energías de rayo-x de 9.572 KeV y 9.818 KeV se deben considerar inciertos, al igual que los valores pronosticados.

La contribución de la atenuación de rayos-x, asociada al Zirconio, se observa en el ligero aumento de los valores provisionales del coeficiente al ser corregidos por este factor y en los valores reales del coeficiente másico de atenuación de rayos-x del Hafnio.

CONCLUSIONES

Las medidas del coeficiente de atenuación de rayos-x del Vanadio, muestran una excelente concordancia, dentro del error experimental, con los seis conjuntos de valores con que fueron comparados. Esto garantiza que el dispositivo experimental es confiable para la medición de coeficientes másicos de atenuación de rayos-x. Por tanto, se puede asegurar que los datos experimentales para el Hafnio deben ser también confiables.

Al comparar los resultados experimentales obtenidos para el Hafnio, con los seis conjuntos de valores teóricos y semiempíricos, se observa que existe una mayor concordancia de estos valores experimentales con los valores calculados con la expresión de T.P. Tihm y Leroux así como las tablas calculadas por Hubbell, son las mejores y las que se pueden recomendar para el análisis cuantitativo con PIXE que involucre coeficientes másicos de atenuación de rayos-x.

Una limitación que muestran los seis conjuntos teóricos y semiempíricos, es que las expresiones por las cuales son calculados, sólo permiten valores de la energía de rayos-x que se encuentren en un intervalo limitado por dos orillas de absorción consecutivas, y que no contenga ninguna orilla de absorción.

Esta limitación se observa en los valores calculados del coeficiente de atenuación del Hafnio para las energías de rayos-x de 9.572 keV y de 9.818 keV, cercanas a la orilla de absorción del subnivel L_{III} del átomo de Hafnio (ver tabla 5.5).

Para estas energías, los valores calculados del coeficiente de atenuación son marcadamente diferentes. Los valores experimentales del coeficiente correspondiente a estas dos energías también muestran la falta de concordancia con todos los valores calculados. Debido a esto, los valores experimentales obtenidos deben ser tomados con reserva ya que no existen valores teóricos o semiempíricos con que compararlos.

Como consecuencia de lo antes expuesto, es necesario hacer más trabajos experimentales para la medición de coeficientes másicos de atenuación de rayos-x, para energías de los fotones cercanas a

las orillas de absorción de los diversos elementos. En base a los resultados que se produzcan de estos trabajos, efectuar las correcciones necesarias a las teorías existentes sobre el tema.

BIBLIOGRAFIA.

BIBLIOGRAFIA.

- [1] R.D.Evans, *The Atomic Nucleus* (Mc.Graw-Hill, New York, 1955).
- [2] J.W.Mayer y L.C.Feldman, *Fundamentals of Surface and Thin Film Analysis* (North-Holland, New York, 1966).
- [3] L.I.Schiff, *Quantum Mechanics* (Mc.Graw-Hill, New York, 1955).
- [4] E.J.McGuire, *Physical Review* 175(1968)20.
- [5] E.J.McGuire, *Physical Review* 161(1967)51.
- [6] P.A.M.Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* (Oxford University, Press, Oxford, 1958).
- [7] W.Heitler, *The Quantum Theory of Radiations* (Oxford University Press, Londres, 1944).
- [8] H.A.Gimm, *Physical Review* 25(1982)823.
- [9] O.Klein e Y.Nishina, *Z.Phys.* 52(1929)853.
- [10] J.H.Hubbell, Wm.J.Veigale, E.A.Briggs, R.T.Brown, D.T.Cromer y R.J.Howerton, *Journal Physicists Chemical*, 4(1975)471.
- [11] T.K.Umesh, C.Ranganathaiah, Ramakrishna Gowda, K.S.Puttaswamy y B.Sanjevaiah, *Physical Review* A23(1981)23.
- [12] A.H.Compton y S.K.Allison, *X-Rays in Theory and Experiment* (D.Van Nostrand Co., Princeton, New York, 1935).
- [13] R.H.Millar y J.R.Greening, *J.Phys.* 7(1974)2332.
- [14] W.J.Price, *Nuclear Radiation Detection* (Mc.Graw-Hill, New York, 1964).
- [15] E.P.Bertin, *Principles and Practice of X-Ray Spectrometric Analysis* (Plenum Press, New York, 1970).
- [16] R.Theisen y D.Vollath, *Tables List of X-ray Mass Attenuation Coefficients* (Verlag Stahleisen M.B.H, Dusseldorf, 1967).
- [17] T.P.Thinh y J.Leroux, *X-Ray Spectrometry* 8(1979)85.
- [18] J.Leroux, *Advances in X-Ray Analysis* (Plenum Press, New York, 1962).
- [19] J.Leroux, *Encyclopedia of X and Gamma Rays* (G.L.Clark, Reinhold, New York, 1962).
- [20] F.Wuilleumier, *Tesis Doctoral, Universidad de Paris*, 1969).
- [21] J.L.Balton, *Can.Spectrosc.J.* 14(1969)5.
- [22] E.C.Montenegro, G.B.Baptista y P.W.E.P.Duarte, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 22(1979)131.
- [23] E.Storm y H.I.Israel, *Nuclear Data Tables* A7(1970)565.
- [24] J.H.Hubbell, W.H.McMaster, N.Kerr del Grande y I.H.Mallet, *International Tables for X-Ray Crystallography* 4(1974)47.

- [25] J.Miranda, Tesis Doctoral (Universidad Nacional Autónoma de México, México, 1988).
- [26] F.Ruiz, Tesis Profesional (Universidad Nacional Autónoma de México, México, 1989).
- [27] The model AN700 Positive Ion Accelerator. High Voltage Engineering Instruction Manual.
- [28] ORTEC 7000 Series Si(Li) X-Ray Detector Description.
- [29] E.B.Salomon, J.H.Hubbell y J.H.Scofield. Atomic Data and Nuclear Data Tables 38(1988)1.
- [30] A.Lurio, W.Reuter y J.Keller, Advances X-Ray Analysis, 20(1977)421.
- [31] V.N.Karev, Zavod.Lab. 30(1964)548.
- [32] H.K.del Grande, J.H.Mallet y A.Oliver, Datos inéditos catalogados en el reporte UCRL-50174 (111)(1969), de la National Technical Information Service.
- [33] J.H.McCrary, E.H.Plassmann, J.M.Puckett, A.L.Conner y G.W.Zimmermann. Phys.Rev. 153(1967)307.
- [34] A.L.Conner, H.F.Atwater, E.H.Plassmann y J.H.McCrary, Phys.Rev. A1(1970)539.
- [35] L.Gerward, Spectrometric Analysis 15(1961)29.
- [36] A.F.Burr. Introduction to X-Ray Cross Sections, Reporte UCRL-50174 de la National Technical Information Service.