

00576

5
24



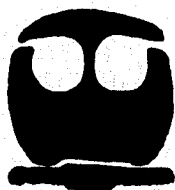
**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO**

FACULTAD DE QUIMICA

**LOS EFECTOS DE LA TEMPERATURA EN EL DAÑO
PRODUCIDO POR LA RADIACION EN DETECTORES
PLASTICOS**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS NUCLEARES
P R E S E N T A :
DEMETRIO MENDOZA ANAYA



MEXICO, D. F.

1996

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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 esta 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.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA
DIRECCIÓN

LIC. ANTONIO DÍAZ GARCÍA
JEFE DE LA UNIDAD DE
REGISTRO E INFORMACIÓN
CIUDAD UNIVERSITARIA
P R E S E N T E .

Me es grato informarle que el alumno, DEMETRIO MENDOZA ANAYA, presentará próximamente su Examen para obtener el grado de Maestro en Ciencias Nucleares, ante el siguiente jurado:

Presidente:	Dra. Guillermina Burillo
Primer Vocal:	Dra. Alicia Negrón
Secretario:	Dr. Manuel Navarrete T.
Primer Suplente:	M. en C. Luis Cabrera M.
Segundo Suplente:	Dr. Guillermo Espinosa G.

Sin otro particular de momento, aprovecho la ocasión para enviarle un cordial saludo.

ATENTAMENTE.
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Ciudad Universitaria, D. F. a 19 de enero de 1996.

DR. ANDONI GARRITZ RUÍZ
DIRECTOR

C.c.p. Integrantes del Jurado
C.c.p. Coordinador de Área
C.c.p. Departamento de Control Escolar
C.c.p. Interesado
*ggm.

Este trabajo lo dedico con cariño a:

mi MADRE

mi PADRE

mis HERMANOS

mis SOBRINOS

mis CUÑADOS

mis AMIGOS

AGRADECIMIENTOS

Debido al carácter interdisciplinario de éste trabajo, tuve la necesidad de interaccionar con un gran número de personas que siempre estuvieron dispuestas a ayudarme de manera desinteresada, por tal motivo deseo expresarles mi agradecimiento en estas paginas.

Muy especialmente al Dr. Miguel Balcazar Garcia, director de esta tesis, por su acertada dirección, sus valiosos comentarios y su experiencia transmitida.

A los sinodales, Dra. Guillermina Burillo, Dra. Alicia Negrón, Dr. Manuel Navarrete T., M. en C. Luis Cabrera M. y al Dr. Guillermo Espinosa por la disponibilidad para la revisión de este manuscrito, así como por sus valiosas sugerencias que enriquecieron el trabajo.

Al personal del Acelerador de electrones PELLETRON del ININ por las facilidades prestadas para la irradiación de las muestras.

A la M. en C. Esbaide Adem y los técnicos Margarito Vásquez y Antonio Ramirez encargados del acelerador VAN DE GRAFF de IFUNAM por las facilidades prestadas para la irradiación de las muestras.

Al Dr. Gerardo Muñoz por sus comentarios, así como por las facilidades prestadas para la utilización del espectrometro EPR de la UAM.

Al Fís. Armando Chávez por sus valiosas sugerencias. Por la amistad que me ha brindado siempre.

A la M. en C. Leticia Tavera por el apoyo brindado para la terminación de la parte experimental del trabajo.

Al M. en C. Jesús Hernan Flores por su apoyo desinteresado y facilidades brindadas para la culminación del escrito. Por sus constantes críticas que motivan a la superación.

Al M. en C. Ventura Rodriguez Lugo por todo el apoyo brindado y que en cierta manera contribuyo para que este trabajo se concluyera. Por la gran amistad que me ha brindado.

A todos mis amigos y compañeros, que de una forma u otra han contribuido en la realización de este trabajo, por su sincera amistad: Emilio Márques, Yolanda Citlali Guerrero, Javier Padilla, Salvador Viquez, Rodolfo Estrada, Pedro Gonzales, Gustavo Martinez, Gustavo Jimenez, Araceli Correa, Miguel Angel Durán, Alejandro Estrada.

Al Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, por todo el apoyo brindado para la realización de este trabajo.

A la Universidad Nacional Autónoma de México, a quien debo mi formación académica profesional.

CONTENIDO

	PAG.
RESUMEN	1
CAPITULO I	
I.1 Introducción	2
I.2 Química de Radiaciones	5
CAPITULO II PROGRAMA PARA CALCULAR DOSIS DEPOSITADA DE ELECTRONES	10
CAPITULO III METODO EXPERIMENTAL	19
CAPITULO IV RESULTADOS Y CONCLUSIONES	27
BIBLIOGRAFIA	51
APENDICE I	55
APENDICE II	63

RESUMEN

El presente trabajo tuvo como objetivo realizar un estudio experimental del daño sufrido en la estructura de un Detector Sólido de Trazas Nucleares en función de la temperatura de irradiación (desde temperatura ambiente hasta 100°C); para éllo se irradiaron plásticos del tipo CR39 con haces de electrones producidos por un acelerador, simulando el daño producido por las partículas cargadas pesadas.

Para observar este daño se utilizaron dos técnicas: Resonancia Paramagnética electrónica (EPR) y Espectroscopia Infrarroja (IR).

De esta manera, los resultados obtenidos en la irradiación de los plásticos en función de la temperatura, muestran una influencia de ésta en la cantidad de radicales libres producidos, así como en la movilidad de éstos. Tal influencia se traduce en la disminución de intensidad de la señal de EPR producida conforme aumenta la temperatura. La mayor intensidad se obtuvo para temperatura ambiente (25°C), decreciendo monótonamente con la temperatura, hasta 100°C donde la señal casi desaparece. También se encontró que la señal de EPR disminuye después que se suspende la irradiación conforme aumenta el tiempo siguiendo una proporción inversa.

La espectroscopia IR mostró la aparición de un nuevo grupo funcional por efecto de la irradiación del material, siendo este el grupo hidroxilo. Respecto al resto del espectro, la forma no cambia apreciablemente, solo la intensidad de los picos de absorción. Se presenta el probable mecanismo de interacción de la radiación con el detector CR39.

CAPITULO I

I.1 Introducción

En los últimos años los Detectores sólidos de Trazas Nucleares (DSTN) han sido utilizados en distintos campos de la ciencia y tecnología para la detección de partículas cargadas pesadas.

Las trayectorias descritas por las partículas a su paso en este tipo de detectores, dan como resultado zonas de intenso daño, conocidas como trazas latentes que mediante una técnica adecuada de revelado pueden ser observadas y analizadas.

¿Pero que procesos atómicos y moleculares ocurren alrededor de la trayectoria de la partícula, los cuales dan como resultado la formación de la traza en el detector?

Al interaccionar las partículas con el material, ceden su energía produciendo principalmente los siguientes efectos: excitación de los átomos y moléculas del material frenador y/o la ionización de los mismos. En la ionización, los electrones de los átomos del material ganan suficiente energía para separarse de éstos, produciéndose un par iónico; mientras que en la excitación, la energía ganada por el electrón no es suficiente para separarse del átomo, produciéndose solo un estado excitado.

En la interacción de la radiación con los detectores polímeros, se origina además un rompimiento de las cadenas moleculares a lo largo de la radiación incidente produciéndose radicales libres⁽¹⁰⁾, siendo éstos los principales responsables de los cambios químicos inducidos en el material⁽²⁰⁾.

Los radicales libres son (o casi lo son) intermediarios entre los pares iónicos y los productos químicos; generalmente son de naturaleza neutra aunque no necesariamente y se caracterizan principalmente por tener uno o más electrones desapareados. Esta característica los hace ser partículas cuya actividad química es inversamente proporcional a su vida media⁽²⁷⁾.

Generalmente, si la concentración de radicales es baja, éstos tienden a reaccionar con otras moléculas para formar nuevos radicales mucho más estables, mientras que si la concentración es alta, reaccionan con otros radicales para formar moléculas estables.

En resumen se tiene que como resultado de la interacción de la radiación con los detectores polímeros, se pueden formar nuevos productos moleculares con diversas características que se traducen en cambios químicos en el detector (trazas latentes). En el inciso dos de este capítulo se presenta una descripción más detallada de los procesos que se llevan a cabo en la interacción de la radiación con la materia.

Los cambios experimentados por el detector están sujetos a varios factores: características de la radiación incidente (carga z , masa m , energía E) y características del material detector (número atómico Z , densidad ρ), principalmente.

Estudios experimentales realizados con partículas cargadas pesadas mostraron que los factores ambientales en el momento de la detección también influyen en el daño producido en el material⁽²³⁾. Entre estos factores, la temperatura T del detector durante la exposición a la radiación muestra un fuerte efecto sobre las características del daño producido. Este efecto tiene importantes implicaciones en todas las áreas donde existe una marcada variación de la temperatura en el momento de registrar partículas cargadas pesadas.

El presente trabajo tiene como objetivo realizar un estudio experimental sobre los cambios sufridos por el detector en función de la temperatura de éste en la irradiación, utilizando Detectores Sólidos de Trazas Nucleares del tipo CR39, el cual pertenece a la familia de los polímeros.

Para la comprensión de los mecanismos de interacción de la radiación con la materia, es fundamental la identificación de los radicales libres, así como el papel que juegan en las reacciones químicas. Existen varios métodos para la detección, identificación y cuantificación de los radicales libres. Los más importantes desde el punto de vista de Química de Radiaciones son el de Resonancia Paramagnética Electrónica (EPR) y Radiólisis de Pulsos⁽²²⁾. En particular en este trabajo se utilizó el método de EPR para la detección de éstos. El fundamento teórico es abordado brevemente en el apéndice I.

Para poder observar los posibles cambios en la estructura molecular del detector después de la irradiación, se utilizó la Espectroscopia Infrarroja (IR). La aplicación de esta técnica se basa en el hecho de que el espectro infrarrojo de cada sustancia es característico y único⁽²⁴⁾. Entonces es posible, mediante la comparación del espectro infrarrojo del material sin irradiar con el espectro del mismo material irradiado, deducir si éste sufrió cambios en su estructura molecular y de que tipo. En el apéndice II se abordan de manera breve los fundamentos teóricos de esta técnica.

Por otro lado, dado que es posible simular los efectos de los iones pesados en los polímeros mediante la irradiación con electrones⁽⁵⁻¹¹⁾, varios Detectores Sólidos de Trazas Nucleares (DSTN) fueron irradiados con electrones en un acelerador de partículas. Por tal razón, en el capítulo dos se presenta un

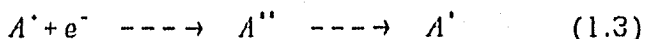
programa de cómputo para el cálculo de la dosis depositada en dicho detector, de acuerdo a las condiciones generales de irradiación.

En el capítulo tres se presenta el desarrollo experimental del trabajo realizado. Este capítulo incluye la metodología de irradiación, así como las condiciones de lectura de las muestras con las espectroscopias EPR e IR. Finalmente, en el capítulo cuatro se presenta el análisis y la discusión de los resultados y por último las conclusiones del trabajo.

Pero como se dijo en líneas anteriores, comenzaremos haciendo una descripción de los procesos que se llevan a cabo en la interacción de la radiación con la materia.

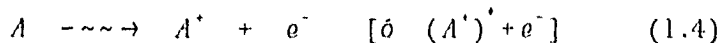
I.2 Química de Radiaciones

La radiación al interaccionar con la materia produce átomos y moléculas excitadas de manera directa (ecuación 1.1) y de manera indirecta por neutralización (ecuación 1.2 y 1.3)⁽²⁹⁾



donde el asterisco es utilizado para designar una molécula o ion en estado excitado y la flecha $\text{---}\rightarrow$ implica radiación. Aquí A representa a la molécula, en tanto que los superíndices + y - se utilizan para designar a la molécula ionizada con carga positiva o negativa, respectivamente.

La ionización es la consecuencia distintiva de la absorción de energía de la radiación por la materia:



y su producción inicial puede ser calculada dividiendo la dosis absorbida por la energía necesaria para formar un par iónico⁽²²⁾.

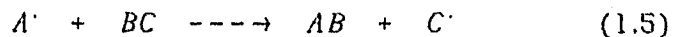
Así, como resultado de la interacción de la radiación con la materia, se producirán distintos productos químicos mediante la formación intermedia de radicales libres. De hecho, los radicales libres son producidos por la disociación de moléculas excitadas y por reacciones iónicas (disociación, reacciones ion-molécula, neutralización) alrededor de la trayectoria de las partículas ionizantes.

Los radicales libres se caracterizan por tener uno o más electrones desapareados; generalmente son de naturaleza neutra aunque no necesariamente. Esta característica los hace ser partículas de alta actividad química y vida media muy corta⁽²⁷⁾, aunque existen algunas especies cuya vida media llega a ser hasta de años. La reactividad y la estabilidad de los radicales depende en gran medida de su estructura. Tomando los dos extremos, los radicales pueden ser muy reactivos bajo condiciones normales o no reactivos y relativamente estables. Los radicales del primer grupo tienen únicamente una existencia transitoria bajo condiciones normales y generalmente son átomos o moléculas relativamente pequeñas pudiendo ser atrapadas y preservadas solo en sólidos a bajas temperaturas.

Las reacciones de los radicales se pueden dividir en dos grupos: reacciones unimoleculares (rearrreglos y disociación) y bimoleculares. Esta última a la vez se subdivide en reacciones que incluyen un radical entre los productos (adición, abstracción) y reacciones cuyos productos moleculares o iónicos no poseen electrones desapareados (combinación, desproporción, transferencia electrónica); este último proceso termina la reacción⁽²²⁾. A continuación se explica en que consisten algunos tipos de reacciones de radicales:

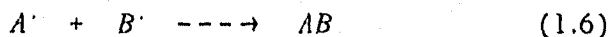
Rearreglo de radicales.- Los radicales muy reactivos pueden alcanzar algunas veces una estructura más estable por rearrreglo molecular.

Abstracción.- Las reacciones de este tipo pueden representarse de la siguiente manera:



donde A, B y C representan moléculas distintas. El punto como superíndice se utiliza para designar un radical.

Combinación.- La combinación es el proceso inverso de la disociación en la que se producen radicales



Las reacciones de combinación son energéticamente favorables puesto que es muy poca o nula la energía de activación y la energía liberada es igual a la energía de disociación del enlace formado⁽²²⁾.

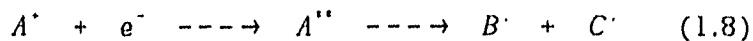
Transferencia electrónica.- Así como un radical puede ser formado por un proceso de transferencia electrónica, también puede ser estabilizado por la transferencia de un electrón.



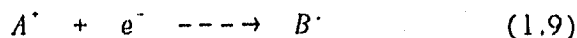
Sin embargo, la transferencia de un electrón no siempre conduce a la estabilización del radical.

Algunos átomos y radicales pueden adquirir, en su formación, mucho más energía de excitación que el promedio de la energía térmica de las moléculas vecinas. En otras palabras, son relativamente más calientes que sus vecinas.

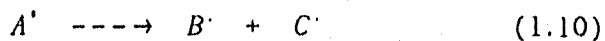
Este tipo de radicales puede ser formado por neutralización iónica⁽²²⁾:



ó



y por disociación de moléculas excitadas si la energía de excitación es mucho mayor que la energía de disociación del enlace disociado⁽²²⁾,



Estos tres procesos pueden ocurrir alrededor de la trayectoria de la partícula ionizante.

La distribución inicial de las especies reactivas es muy inhomogénea a lo largo de la trayectoria, y la escala de tiempo de los principales eventos que ocurren en la interacción y después son relativamente cortos, como se muestra en la tabla 1.1:

TABLA 1.1.- Escala de tiempo de los principales eventos que ocurren en la interacción de la radiación con los polímeros⁽³⁵⁾.

Tiempo (s)	Evento
10^{-16}	La radiación ionizante atraviesa una molécula.
10^{-15}	Intervalo de tiempo entre una ionización y otra.
10^{-14}	Disociación de especies excitadas.
10^{-13}	Los electrones expulsados se vuelven térmicos.
10^{-12}	Difusión de radicales.
10^{-8}	Se forman productos moleculares.
	Decaimiento radiativo de estados singuletes.
10^{-9}	Decaimiento radiativo de estados tripletes.
1	Muchas reacciones terminan. En algunos sistemas, las reacciones pueden continuar varios días.

CAPITULO II PROGRAMA PARA CALCULAR LA DOSIS DEPOSITADA DE ELECTRONES

En los procesos de irradiación con haces de electrones, es importante determinar la dosis absorbida por la muestra. Para calcular ésta, se deben considerar tanto la pérdida de energía como la absorción del haz de electrones al atravesar la delgada ventana del acelerador, así como la capa de aire, antes de interaccionar con la muestra, principalmente cuando el haz tiene bajas energías. Este capítulo presenta un programa de cómputo DOSIS-E1 en QBasic que realiza el cálculo de la razón de dosis depositada por un haz de electrones de intensidad I (μA) en el material, tomando en cuenta las pérdidas de energía en las dos capas situadas antes del material. Este programa está adaptado del algoritmo realizado por T. Tabata, et. Al. (1990)⁽³²⁾.

Las consideraciones hechas son: la primera capa que atraviesa el haz de electrones es una ventana de titanio con un espesor de $40 \mu m$; la segunda, es la capa de aire de espesor d , que el programa lee como separación muestra-ventana del acelerador, y la tercera, es la muestra de espesor x .

El problema es abordado de la siguiente manera: primero se determina la energía que pierden los electrones al atravesar la ventana del acelerador, así como la fracción del haz absorbido por ésta; a continuación, se realiza el mismo procedimiento para la capa de aire y finalmente, en base a la energía residual de los electrones y fracción absorbida en las dos primeras capas, se determina la razón de dosis depositada por los electrones en

el material. Los cálculos realizados son almacenados en un archivo que crea el programa para consultarlos cuando sea requerido.

En este programa se han fijado solo tres condiciones: el espesor de la ventana del acelerador es de titanio con un espesor de 40 μm , la frecuencia de barrido del haz es de 70 Hz y la máxima energía de los electrones es de 2.5 MeV. El resto de los parámetros requeridos por el programa pueden ser variables y se reciben como datos de entrada, por lo que deben conocerse antes de utilizarse el programa. Estos parámetros son los siguientes: número de componentes del material, número atómico Z , masa atómica A y número de átomos de cada componente N ; en base a éstos, el programa calcula el número atómico y la masa atómica efectiva del material (Z_{ef} , A_{ef}). El programa también requiere como datos de entrada la densidad (en g/cm^3) y espesor del material (en μm), el espesor de la capa de aire (separación muestra-ventana, en cm), la corriente del haz (en μA), así como la energía de los electrones (en MeV).

Las operaciones se realizan de la siguiente manera: primero se determina el alcance máximo, R , de los electrones de energía E en la ventana de titanio, de acuerdo a la relación⁽¹⁵⁾ para electrones entre 0.01 y 2.5 MeV:

$$R = 412E^{(1.265-0.094\ln E)} \quad (2.1)$$

A partir de este resultado se deduce la energía que pierden los electrones en dicha ventana.

A continuación se determina la fracción de electrones transmitidos en la misma ventana, de acuerdo a la siguiente expresión^(2.6)

$$F = \exp\left[-\alpha\left(\frac{x}{R_{ex}}\right)^\Gamma\right] \quad (2.2)$$

donde α y Γ son funciones de Z_{at} , x es el espesor del material y R_{ex} es el alcance extrapolado de los electrones en el material.

Los mismo cálculos son realizados para la capa de aire, solo que ahora la energía de los electrones será E menos la energía perdida en la ventana de titanio.

La razón de dosis depositada por los electrones en el material se determina de acuerdo a la siguiente ecuación^(3.2)

$$D(x) = \left(\frac{E}{R_{ex}}\right) \left\{ \alpha_1 + \alpha_2(1 + \alpha_3)s^{\alpha_3} + \alpha\beta s^{\beta-1} \right\} \exp(-\alpha_1 s - \alpha_2 s^{1+\alpha_3} - \alpha s^\beta) \quad (2.3)$$

donde los parámetros α_i y β están expresados por las siguientes relaciones^(3.2):

$$\alpha_i = b_{ii} \epsilon^{b_{i2}} \quad (i=1, 2, 3)$$

$$\beta = 1 + b_{41} \epsilon^{b_{42}}$$

y donde los símbolos b_{ij} ($i=1, 2, 3, 4; j=1, 2$) son parámetros que solo dependen de Z . ϵ está dado como⁽³¹⁾:

$$\epsilon = 1 + \frac{E_0}{mc^2}$$

El programa presenta los resultados de cada cálculo de la siguiente manera: en la primera columna aparece la energía inicial de los electrones, a continuación la energía residual de éstos al atravesar tanto la ventana como la capa de aire, en seguida, la razón de dosis depositada en el material, después la energía residual cuando ha atravesado el material; finalmente, en la última columna se presenta el alcance máximo de los electrones en el material, de acuerdo a la energía dada en la segunda columna. El programa proporciona el factor de atenuación F , del haz al atravesar cada una de las capas.

A continuación se presenta un ejemplo de la corrida de el programa, donde el material a irradiar es el Detector Sólido de Trazas Nucleares CR39 cuya estructura es $C_{12}H_{10}O_7$ con una densidad de 1.31 g/cm³.

NOMBRE DEL ARCHIVO DE SALIDA : ? SALIDA1

NOMBRE DEL MATERIAL : ? CR39

No DE COMPONENTES DEL MATERIAL : ? 3

CARGA, MASA AT., Y No DE ATOMOS DE CADA ELEMENTO (Z, A, N) :

? 6,12,12

? 1,1,18

? 8,16,7

DENSIDAD (g/cm³) : ? 1.31

ESPESOR (μm) : ? 250

SEPARACION MUESTRA-VENTANA (cm) : ? 7

CORRIENTE DEL HAZ DE ELECTRONES (μA) : ? 40

NUMERO DE VALORES DE ENERGIA (MeV) : ? 4

? 0.5

? 1.0

? 1.5

? 2.0

CR39

Zef MASA Aef
6.489051 12.17808

EO (MeV/E)	E1 (MeV/e)	DOSIS (kGy/s)	E2 (MeV/e)	ALC.MAX.(Rmax) (g/cm ²)
0.500000	0.439799	1.858909	0.363535	0.136794
1.000000	0.947839	1.094388	0.884258	0.384901
1.500000	1.449449	0.960367	1.388263	0.650421
2.000000	1.949438	0.913546	1.888413	0.919266

EO, Energía inicial de los electrones

E1, Energía después de atravesar la ventana y capa de aire

E2, Energía después de atravesar la muestra

F(Ti-aire) F(muestra)

0.964360	0.969865
0.995653	0.999175
0.998875	0.999905
0.999600	0.999981

En la figura 2.1 se muestra la curva de la razón de dosis depositada en el CR39, como función del espesor de éste para electrones de diferentes energías, de acuerdo al programa desarrollado. En éstas se aprecia el incremento típico de la razón de dosis cuando el haz de electrones penetra las primeras capas del material.

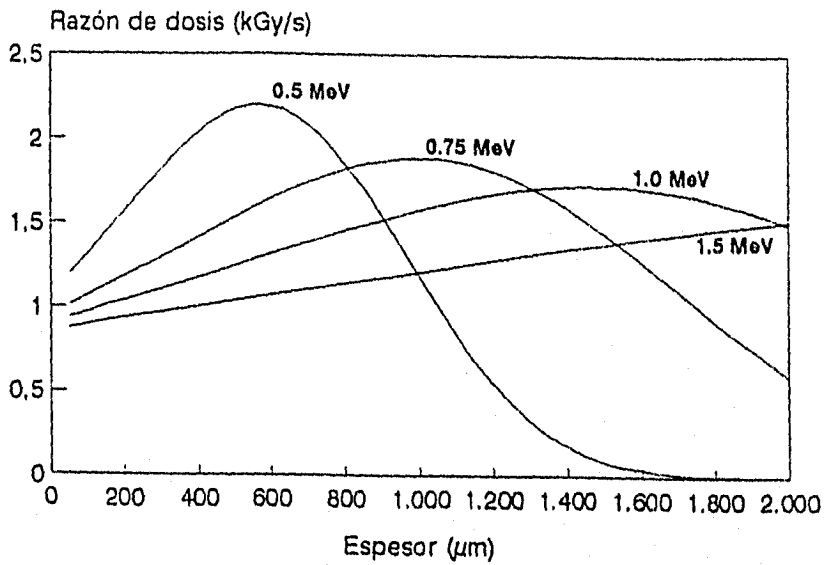


Figura 2.1.- Razón de dosis depositada como función del espesor del CR39 para electrones con energías de 0.5, 0.75, 1.0 y 1.5 MeV.

La figura 2.2 muestra la curva de la razón de dosis depositada por un haz de electrones en función de la energía, según el programa desarrollado. En ésta se aprecia que la dosis depositada en un plástico delgado (250 μm) es mayor para electrones de bajas energías.

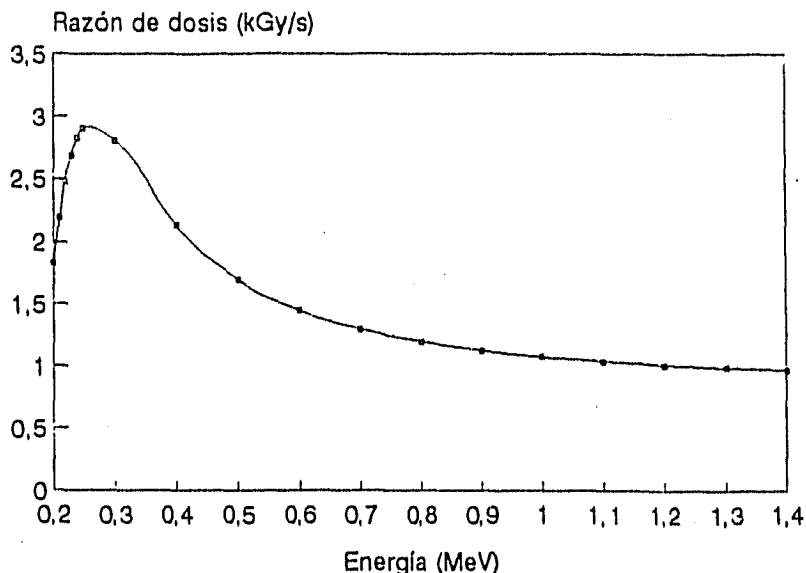


figura 2.2.- Razón de dosis depositada por un haz de electrones en función de la energía. La intensidad del haz es de 40 μA y el espesor del CR39 es de 250 μm .

Finalmente la figura 2.3 muestra la curva del alcance máximo de los electrones en la materia, según el programa de cómputo. La figura 2.4 muestra la curva del alcance máximo de las partículas beta según la bibliografía⁽²⁶⁾, la cual al compararla con la figura 2.3. se encuentra poca variación en el comportamiento de ésta.

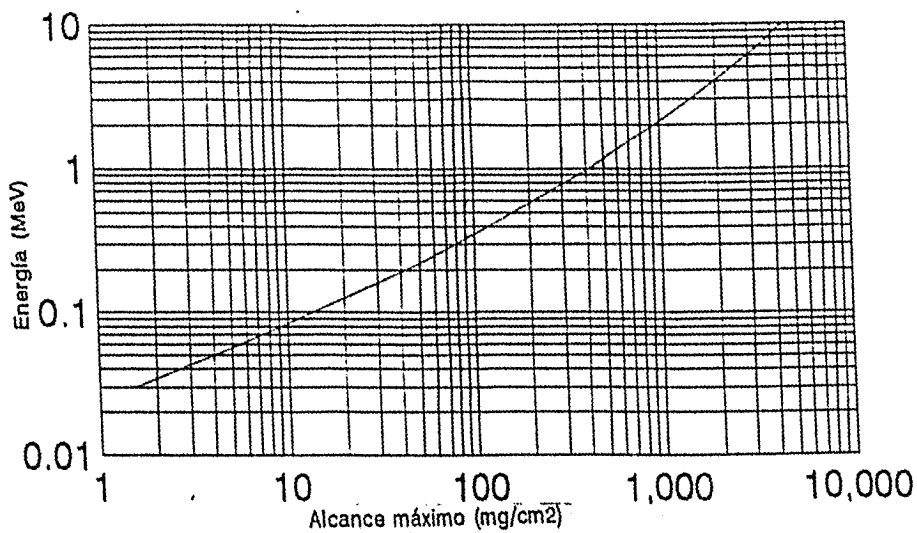


Figura 2.3.- Curva del alcance máximo de los electrones en la materia de acuerdo al programa desarrollado.

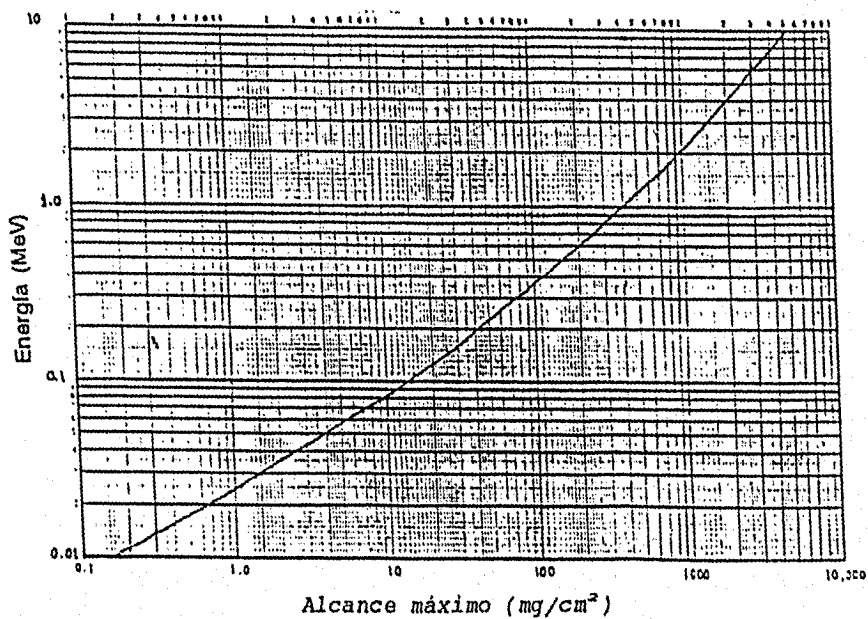


Figura 2.4.- Curva del alcance máximo de los electrones en la materia según la literatura⁽²⁶⁾.

Como se menciona al principio de este trabajo, el programa aqui desarrollado fue utilizado para determinar la dosis recibida por las muestras irradiadas.

CAPITULO III METODO EXPERIMENTAL

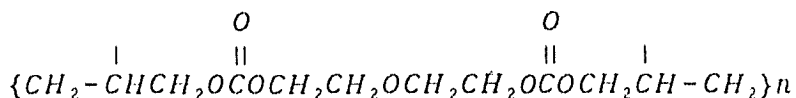
Como se mencionó al principio de este trabajo, los estudios experimentales realizados en Detectores Sólidos de Trazas Nucleares irradiados con partículas cargadas pesadas se vieron fuertemente influidos por la temperatura durante la exposición. Este efecto tiene importantes implicaciones en todas las áreas donde existe una marcada variación de la temperatura en el momento de registrar a estas partículas.

Con el objeto de estudiar la dependencia del daño producido en el material en función de la temperatura del material en la irradiación (temperatura de irradiación), varios plásticos CR39 fueron irradiados a distintas temperaturas con electrones monoenergéticos, simulando el daño producido por la partículas cargadas pesadas en el material. Esta simulación se basa en el hecho de una partícula cargada pesada al interaccionar con un polimero produce ionización primaria y secundaria, a través de electrones expulsados. Estos electrones, conocidos como rayos delta, ceden a su vez su energía alrededor de la trayectoria de la partícula formando un cilindro de radio r , cuyo eje es la trayectoria de la partícula. De esta manera, la energía depositada a lo largo de la traza se debe principalmente a la interacción de los electrones expulsados ya que la desexcitación molecular, la recombinación de iones y la recombinación molecular son procesos que no contribuyen significativamente en los cálculos de pérdida de energía.

Las técnicas de estudio del material irradiado fueron la Resonancia Paramagnética Electrónica (EPR) y la espectroscopia Infrarrojo (IR).

III.1 Detección

El material utilizado en este trabajo fue un polímero, Dietilenglicol bis Allyl Dicarbonato, de composición $C_{12}H_{18}O_7$, cuyo nombre comercial es CR39. Su estructura molecular es la siguiente⁽³⁴⁾:



El CR39, utilizado como Detector Sólido de Trazas Nucleares presenta las siguientes características:

- 1.- Es sensible a las partículas cargadas pesadas e insensible a la radiación electromagnética.
- 2.- Bajo umbral de detección, donde el umbral de detección se define como el cociente de (Z/β) , siendo Z el número atómico de la partícula con velocidad v y $\beta = v/c$.
- 3.- Gran resistencia a las altas temperaturas.
- 4.- Los hidróxidos alcalinos son agentes convenientes para grabarlos. Comúnmente se utilizan NaOH y KOH.

III.2 Descripción del Experimento

En el experimento se utilizaron dos conjuntos de muestras tomadas de un mismo lote. Un conjunto destinado para analizarse con espectroscopia EPR y el otro para el análisis con espectroscopia infrarroja. El primero estuvo integrado por muestras cuyas dimensiones fueron de 1.5X1.0 cm² de superficie y un espesor de alrededor de 271 μm, con un peso aproximado de 46.5 mg cada una. El segundo conjunto estuvo formado por plásticos de igual superficie que el primero, pero el espesor fue reducido uniformemente mediante ataque químico hasta alcanzar un espesor aproximado de 20 μm, a fin de que el espectro infrarrojo de éstas no alcanzara la saturación.

Irradiación y lectura EPR.- Las muestras a analizar con espectroscopia EPR fueron irradiadas con un haz de electrones producidos en un acelerador. Durante la irradiación, éstas estuvieron sometidas a una temperatura constante, para lo cual se utilizó la "placa caliente"⁽⁷⁾ en contacto directo con las muestras; la placa caliente consiste en una placa de metal que se mantiene en contacto con una resistencia eléctrica calefactora. La medida de la temperatura se realiza utilizando un termopar que se mantiene en contacto con el detector y la placa calefactora. La lectura de la temperatura se realiza con un dispositivo digital. Así, cada sesión de irradiación se realizó a diferentes temperaturas, cubriéndose un intervalo desde una temperatura ambiental hasta un máximo de 100°C.

El montaje de irradiación se muestra en la figura 3.1.

Las condiciones de irradiación común para las muestras fueron las siguientes:

Tipo de acelerador : Van de Graff
Energía de los electrones : 1.3 MeV
Intensidad del Haz : 5 μ A, fijo
Tiempo de irradiación : 60 minutos
Separación muestra-ventana del acelerador : 10 cm

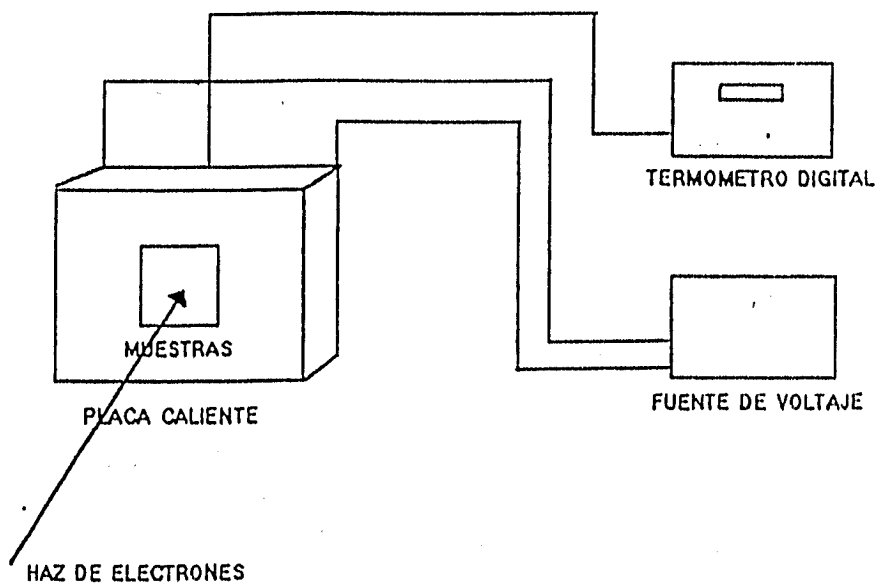


Figura 3.1.- Montaje de irradiación de las muestras sobre la placa calefactora.

Una vez irradiadas las muestras, se les hizo espectroscopia EPR tomándose el espectro que cada una de éstas producía después de haber transcurrido cierto tiempo entre la suspensión de la

irradiación y la lectura EPR (tiempo muerto). Este tiempo fue el mismo para todas las muestras, las cuales fueron mantenidas a temperatura ambiente durante este intervalo.

Otro grupo de muestras del mismo conjunto fueron sometidas a las mismas temperaturas de irradiación y el mismo tiempo, pero en ausencia del haz de electrones y se les tomó su espectro EPR después de haber transcurrido el mismo tiempo muerto de las muestras si irradiadas. Esto con la finalidad de observar la señal EPR debida solo al calentamiento.

Para observar la variación de la señal de EPR con el tiempo para una muestra irradiada a temperatura ambiente, se tomaron tres muestras del mismo conjunto y se montaron superpuestas entre si, como se indica en la siguiente figura.

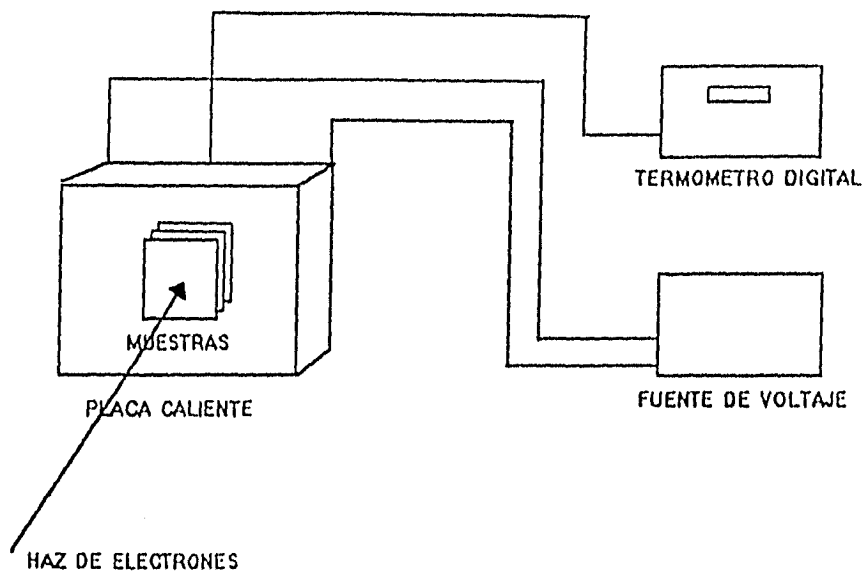


Figura 3.2.- Montaje de irradiación de las muestras sobre la placa calefactora.

Estas muestras fueron irradiadas también con un haz de electrones y donde las condiciones de irradiación fueron las siguientes:

Tipo de acelerador : Pelletron

Energía de los electrones : 0.70 MeV

Intensidad del haz : 40 μ A

Frecuencia de barrido : 70 Hz

Tiempo de irradiación : 30 minutos

Separación muestra-ventana del acelerador : 7 cm

Para el análisis, se tomó la muestra intermedia y se obtuvieron varias lecturas del espectro EPR a fin de observar la variación de la señal en función del tiempo transcurrido. La elección de la muestra intermedia no tuvo algún interés especial, es decir, para este estudio también se pudieron utilizar cualquiera de las otras dos muestras con resultados similares.

Irradiación y lectura IR.- Antes de irradiar las muestras, a cada una de éstas se le tomó su espectro IR. A continuación se procedió a la irradiación con un haz de electrones; cabe aclarar que por problemas técnicos se utilizaron dos tipos de aceleradores en este trabajo. La irradiación se realizó a diferentes temperaturas y donde cada temperatura se mantuvo constante durante cada irradiación, para lo cual se utilizó la ya antes mencionada "placa caliente". El montaje de las muestras fue similar al de las irradiaciones para el análisis con espectroscopia EPR (figura 4.1). El intervalo de temperaturas utilizado fue desde una temperatura ambiental hasta un máximo de 75°C.

Las condiciones de irradiación para éste caso, fueron las siguientes:

Tipo de acelerador : Pelletron
Energía de los electrones : 0.35 MeV
Intensidad del haz : 26 μ A
Frecuencia de barrido : 70 Hz
Tiempo de irradiación : 45 minutos
Separación muestra ventana del acelerador : 7 cm

Una vez irradiadas las muestras, se les volvió a tomar el espectro IR de cada una de éstas a fin de compararlos con el correspondiente, obtenido antes de la irradiación.

En el siguiente capítulo se muestran los resultados obtenidos mediante las técnicas espectroscópicas utilizadas. En éste también se incluye el cálculo de la razón de dosis recibida por las muestras irradiadas, de acuerdo al programa computacional presentado en el capítulo dos.

CAPITULO IV RESULTADOS Y CONCLUSIONES

IV.1 Resultados

Como se mencionó en el capítulo anterior, se irradiaron plásticos detectores CR39 con haces de electrones en un acelerador. De acuerdo a las condiciones de irradiación, la razón de dosis recibida por cada una de las muestras irradiadas a distintas temperaturas para el análisis con espectroscopia EPR fue de 0.3341 kGy/s durante 60 minutos.

Después de la irradiación, se les tomó el espectro EPR de cada una de éstas, teniendo el equipo de detección las siguientes condiciones:

Intensidad del campo magnético, H : 3400 gauss
Variación del campo, ΔH : 500 gauss
Modulación de la señal : 10
Tiempo de lectura, SCAN : 4 min

Con estas condiciones, la frecuencia del campo oscilante en que la señal aparece es de 9.2 GHz, aproximadamente.

En la figura 4.1(a) y 4.1(b) se muestran los espectros correspondientes a las muestras irradiadas a distintas temperaturas (25, 33, 40, 50, 60, 80 y 100 °C), así como el de las sometidas al mismo calentamiento, pero sin irradiar.

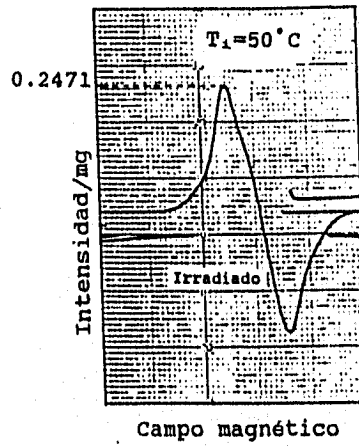
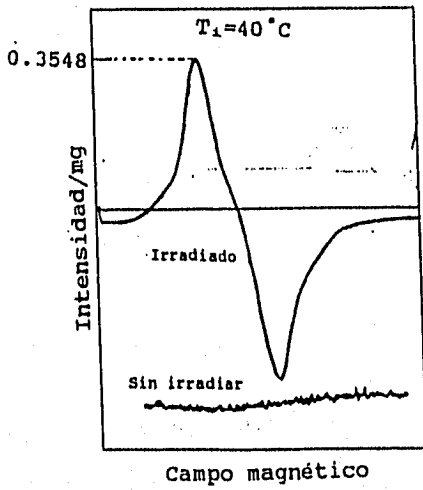
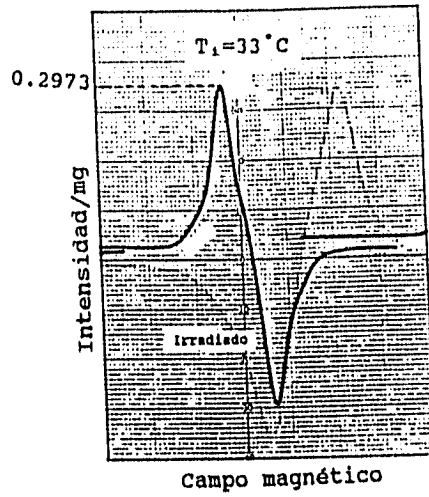
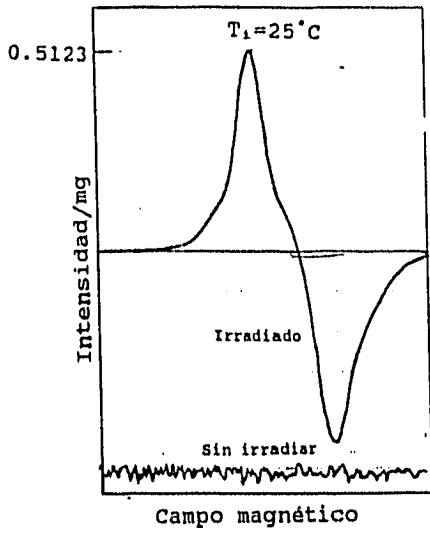


Figura 4.1(a).- Espectros EPR de plásticos CR39 irradiados con una misma dosis de electrones y diferentes temperaturas de irradiación, t_i .

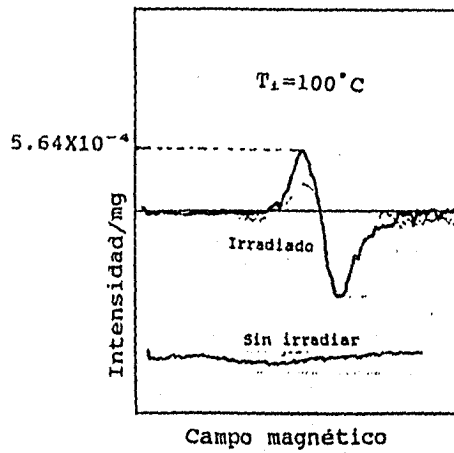
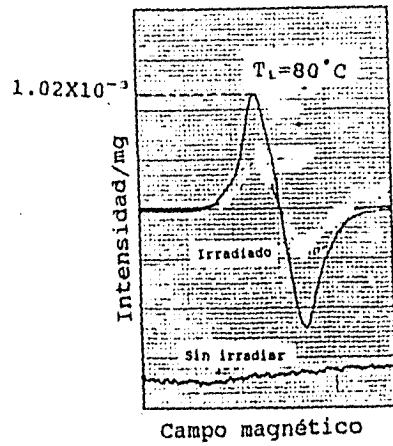
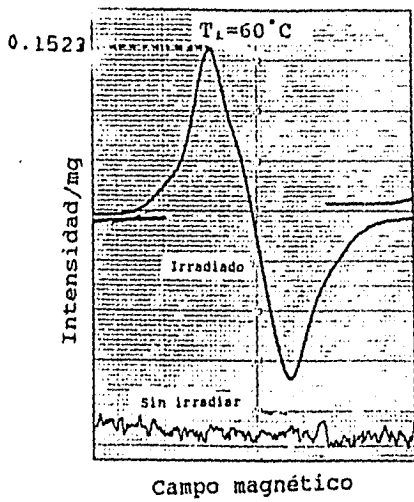


Figura 4.1(b).- Espectros EPR de plásticos CR39 irradiados con una misma dosis de electrones y diferentes temperaturas de irradiación, t_1 .

En la tabla 4.1 se muestra la temperatura de irradiación T_i , el tiempo de enfriamiento t_e y la intensidad relativa por unidad de masa (I), de la señal de EPR producida por cada una de las muestras.

TABLA 4.1.- INTENSIDAD RELATIVA POR UNIDAD DE MASA DE LA SEÑAL DE EPR PRODUCIDA POR EL CR39 IRRADIADO A DIFERENTES TEMPERATURAS CON UN HAZ DE ELECTRONES.

T_i (°C)	t_e (min)	Intensidad por unidad de masa (I)
T.A.	138	0.5123
33	133	0.2973
40	136	0.3548
50	138	0.2471
60	138	0.1522
80	137	1.02×10^{-3}
100	129	5.64×10^{-4}

La figura 4.2 muestra de manera esquemática la intensidad por unidad de masa de la señal de EPR en función de la temperatura de irradiación, de acuerdo a los datos mostrados en la tabla 4.1.

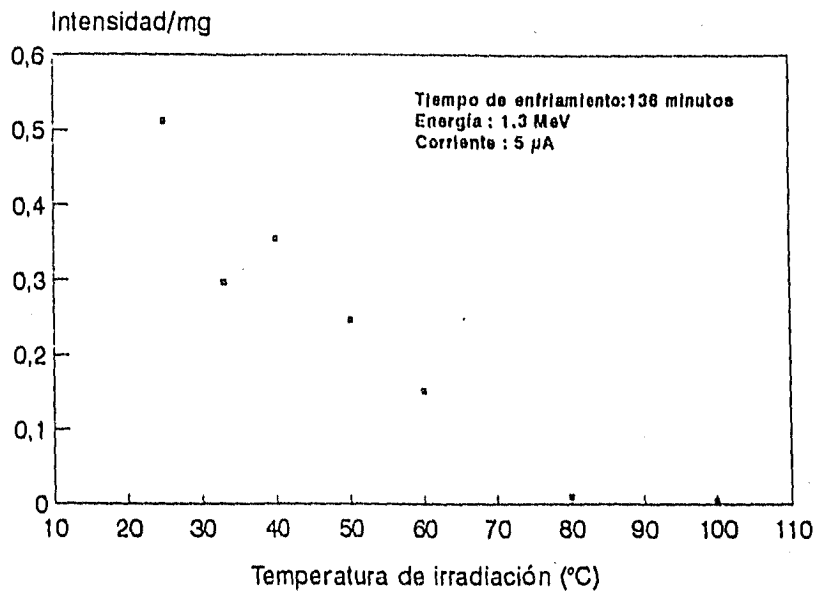


Figura 4.2.- Intensidad por unidad de masa de la señal de EPR de plásticos CR39 irradiados a diferentes temperaturas con un haz de electrones.

La muestra irradiada a temperatura ambiente y que fue con la finalidad de observar la variación de la señal de EPR en función del tiempo transcurrido, recibió una razón de dosis de 0.57 kGy/s durante 30 minutos.

En la figura 4.3 se muestran las primeras lecturas de la señal de EPR producidas por dicha muestra por cada tiempo transcurrido, t_n . Estas lecturas se realizaron con el equipo de detección en las mismas condiciones que en el caso anterior.

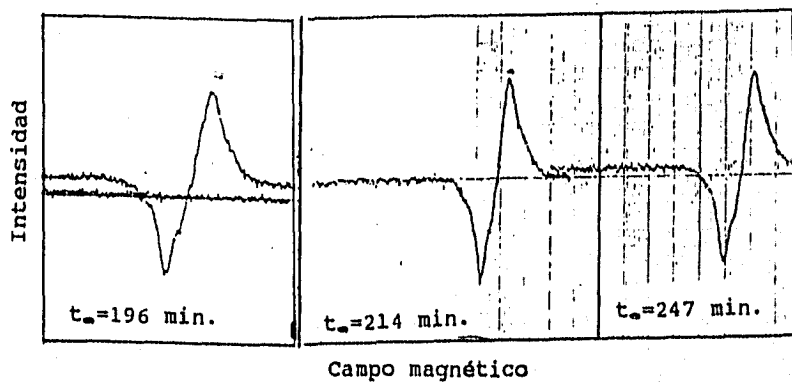
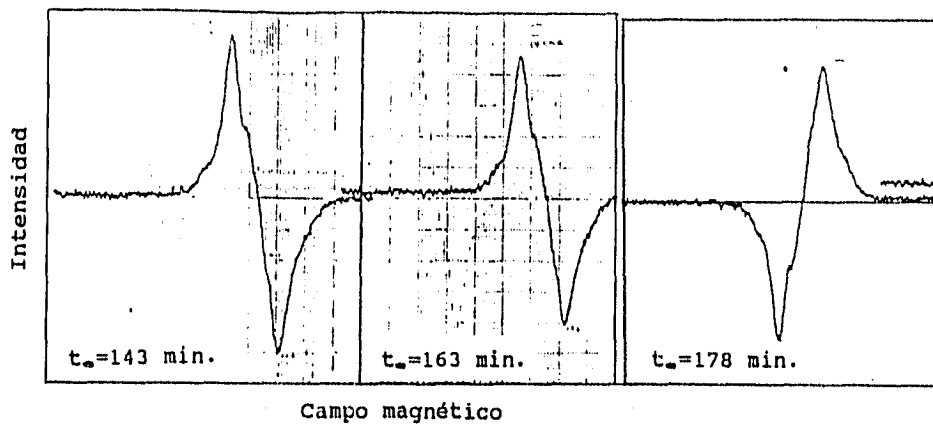


Figura 4.3.- Espectros EPR de un plástico CR39 irradiado a 18°C con electrones durante 30 minutos (0.57 kGy/s). Lecturas tomadas en distintos tiempos después de suspendida la irradiación, t_e .

De las lecturas producidas por la muestra se determinó la intensidad relativa de cada una de las señales y se normalizaron, tomándose en cuenta la lectura de intensidad máxima producida. En la tabla 4.2 se muestra la intensidad relativa producida para cada tiempo transcurrido, t_{\bullet} .

TABLA 4.2.- INTENSIDAD RELATIVA DE LA SEÑAL DE EPR PRODUCIDA POR EL CR39 IRRADIADO CON UN HAZ DE ELECTRONES.

t_{\bullet} (min)	INTENSIDAD RELATIVA	t_{\bullet} (min)	INTENSIDAD RELATIVA (I)
143	1.000*	799	0.256
163	0.856*	860	0.249
178	0.785*	920	0.236
196	0.570	980	0.228
214	0.557	1040	0.215
247	0.478	1100	0.200
308	0.443	1160	0.200
387	0.421	1262	0.200
443	0.385	1340	0.193
503	0.342	1402	0.178
565	0.321	2002	0.142
621	0.293	3100	0.079
741	0.286		

La figura 4.3(b) corresponde a la gráfica de la intensidad relativa de la señal de EPR en función del tiempo transcurrido, de acuerdo a los datos mostrados en la tabla 4.2.

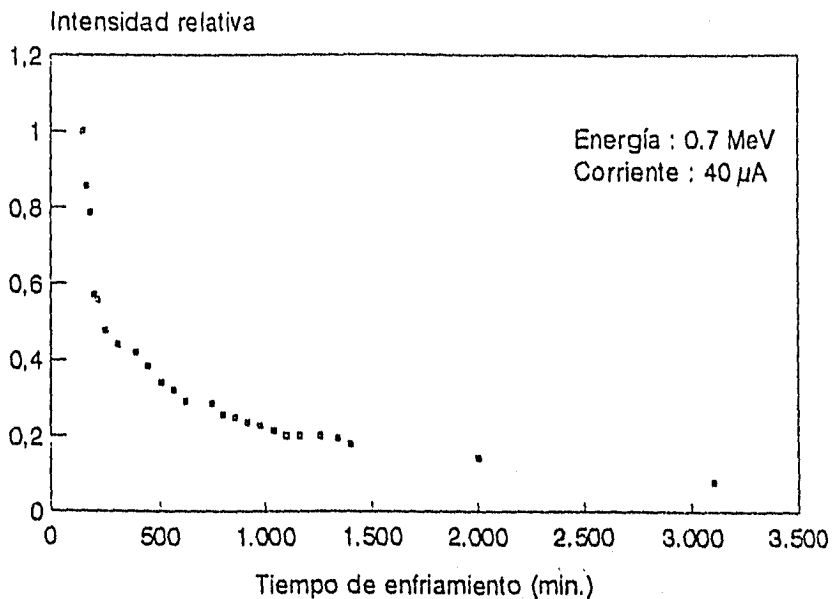


Figura 4.3(b).- Intensidad relativa de la señal de EPR en función del tiempo transcurrido, del CR39 irradiado con un haz de electrones.

Respecto a las muestras irradiadas para el análisis con espectroscopia infrarroja, la razón de dosis recibida por cada una de éstas fue de 0.89 kGy/s durante 45 minutos. En tanto que las condiciones de lectura del espectrómetro IR para todas las muestras, son mostradas en la tabla 4.3:

TABLA 4.3.- CONDICIONES DE LECTURA DEL ESPECTROMETRO IR PARA LA LECTURA DE LAS MUESTRAS.

ABCISA		ORDENADA
REP.BARRIDO _____ EXPANSION ¹ _____	TIEMPO DE BARRIDO ¹ ² _____	EXPANSION ¹ ¹¹ ^x _____
LIMITE MAX ₄ ₀ ₀ ₀ SUPRESION _____	RESPUESTA ¹ _____	SINGLE BEAM _____ ABS _____
LIMITE MIN ² ⁰ ⁰ _____	SLIT PROGRAM ⁶ _____	

En la figura 4.4 se muestra el espectro IR de una de las muestras antes y después de ser irradiada a temperatura ambiente (18°C). En ésta, el espectro menos marcado corresponde al material antes de ser irradiado, en tanto que el más marcado corresponde al mismo después de irradiado. En la misma figura se han señalado los principales grupos funcionales presentes, identificados de acuerdo a la literatura^(24,26). De acuerdo con ésta, el pico que aparece entre 3500 y 3600 cm^{-1} esta asociado al OH, en tanto que el pico que aparece entre 2750 y 3050 cm^{-1} está asociado con los grupos CH y CH₂. Así mismo, el pico de absorción situado a 1750 cm^{-1} , aproximadamente, está asociado con el doble enlace C=O, y así sucesivamente.

Las figuras 4.5, 4.6, 4.7 y 4.8 muestran los espectros superpuestos de otras muestras que fueron obtenidos antes y después de la irradiación y donde las temperaturas de irradiación fueron 30, 40, 50 y 75 °C, respectivamente. En éstas, el más marcado corresponde al obtenido después de la irradiación.

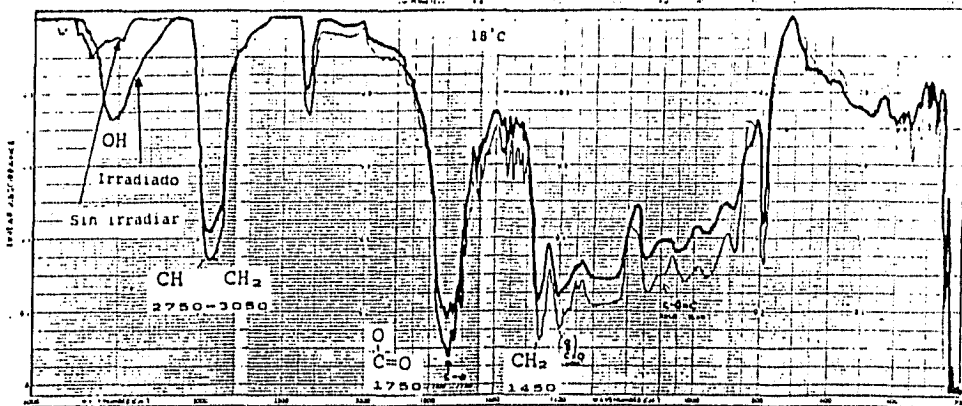


Figura 4.4.- Espectro IR de un plástico CR39 antes y después de ser irradiado a temperatura ambiente.

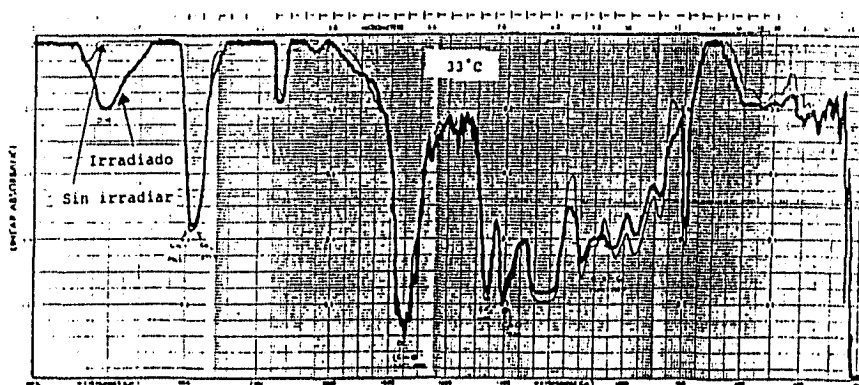


Figura 4.5.- Espectro IR de un plástico CR39 antes y después de ser irradiado a 33°C.

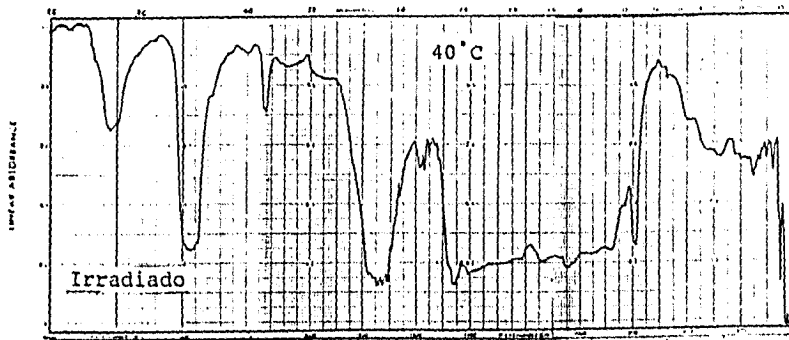


Figura 4.6.- Espectro IR de un plástico CR39 antes y después de ser irradiado a 40°C.

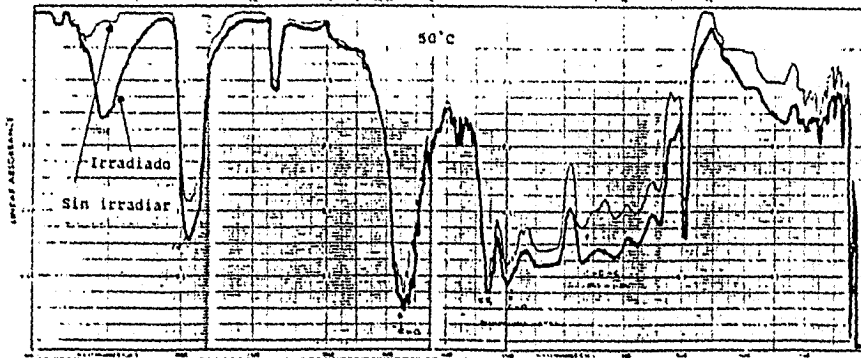


Figura 4.7.- Espectro IR de un plástico CR39 antes y después de ser irradiado a 50°C.

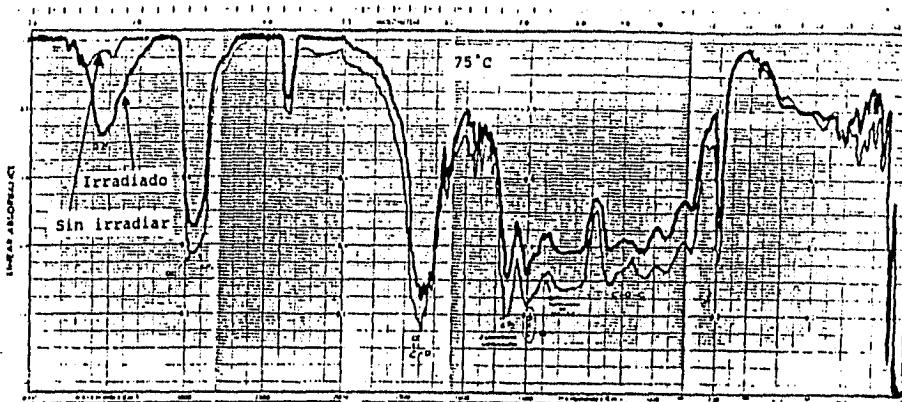


Figura 4.8.- Espectro IR de un plástico CR39 antes y después de ser irradiado a 75°C.

IV.2 Análisis y discusión de resultados

En la figura 4.2 se muestra de manera esquemática, en función de la temperatura de irradiación, la intensidad por unidad de masa de la señal de EPR producida por las muestras de CR39 irradiadas con electrones. El tiempo de enfriamiento, es decir, el tiempo transcurrido entre la suspensión de la irradiación y lectura de la señal fue el mismo para todas, así como las condiciones de irradiación y de lectura.

En ésta gráfica se aprecia que la intensidad de la señal es máxima para las muestras irradiadas a temperatura ambiente (25°C) y conforme aumenta la temperatura de irradiación la intensidad de la señal disminuye monótonamente hasta 100°C donde la señal prácticamente ha desaparecido. En esta misma gráfica se observa que para 33°C, la señal obtenida se desvía del

comportamiento que siguen el resto de los puntos; ésto puede deberse a algún posible error en el momento de la irradiación o de lectura.

Por otro lado, la señal de EPR producida por las muestras se debe únicamente a la irradiación a las que éstas fueron sometidas y no al calentamiento al que también se sometieron. Esto se aprecia en las figuras 4.1(a) y (b) donde se muestra el espectro EPR de las muestras sometidas solo al puro calentamiento. En éstas se observa que la intensidad del espectro es prácticamente nulo.

Aquí se debe decir también que aunque varíe la temperatura de irradiación, la naturaleza de radicales producidos es la misma, dado que la señal de EPR aparece para el mismo campo magnético aplicado y la misma frecuencia del campo oscilante.

Por otro lado, en la figura 4.3(b) donde se ha dibujado una gráfica de la intensidad relativa de la señal de EPR en función del tiempo de enfriamiento para una misma muestra, se observa que la señal producida disminuye con el tiempo. Este decremento es muy rápido al principio, hasta que la señal alcanza una intensidad relativa de 0.5 aproximadamente, en alrededor de 200 minutos, y a partir de ahí la disminución es más lenta hasta que a partir de un tiempo de 1500 minutos después de suspendida la irradiación, la señal disminuye muy ligeramente, notándose cambios solo para lecturas entre intervalos de tiempo muy largos.

Mediante un análisis por mínimos cuadrados, se encontró la ecuación que más se ajusta a estos puntos y que relaciona la intensidad de la señal, I , y el tiempo de enfriamiento o transcurrido, t . En tal ajuste no se tomaron en cuenta los tres primeros puntos en donde el comportamiento es diferente.

De esta manera, la ecuación que más se ajusta a los datos experimentales es de la forma:

$$\frac{1}{I} = 0.9064 + 3.4648 \times 10^{-3} t, \quad (4.1)$$

siendo el coeficiente de correlación igual a 0.9898.

Así, en la figura 4.9 se muestra la gráfica de la intensidad relativa de señal de EPR en función del tiempo transcurrido, en la que se hace una comparación entre los datos experimentales y los obtenidos teóricamente a partir de la ecuación 4.1.

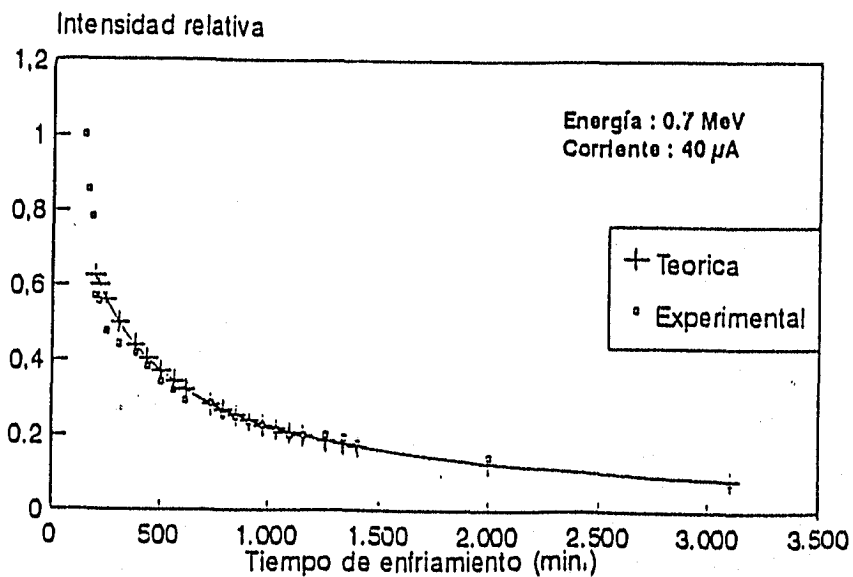
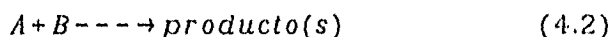


Figura 4.9.- Intensidad relativa de la señal de EPR en función del tiempo transcurrido, del CR39 irradiado con un haz de electrones.

El hecho de que intensidad de la señal de EPR, la cual depende directamente de la concentración de los centros paramagnéticos presentes⁽²⁴⁾, varíe de acuerdo a la ley inversa en el tiempo permite suponer que los radicales presentes reaccionan con una velocidad de reacción de segundo orden global en la que domina una sola especie^(9,27,28).

La reacción de segundo orden que posiblemente se esté llevando a cabo es la representada por la ecuación estequiométrica



y la expresión de la razón de cambio será:

$$\frac{d[A]}{dt} = k[A][B] \quad (4.3)$$

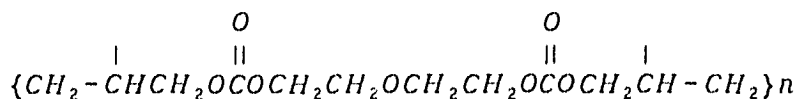
Entonces, suponiendo que una sola especie química reactante la que domina, es decir, $[A] = [B]$, la solución será:

$$\frac{1}{[A]_t} - \frac{1}{[A]_0} = kt \quad (4.4)$$

donde $[A]_0$ y $[A]_t$ son las concentraciones del reactante A para el tiempo 0 y para un tiempo t, respectivamente.

De esta manera, relacionando la ecuación (4.1) con la (4.4) se tiene que la constante de velocidad para la reacción de radicales producidos en el CR39 es de 3.4648×10^{-3} .

Respecto a los resultados obtenidos con espectroscopia IR, se sabe que la estructura del material citada en la literatura es de la forma⁽³⁴⁾:



Por lo que al compararla con el espectro infrarrojo obtenido de las muestras sin irradiar, se observa que es consistente la estructura citada en la literatura con los picos asociados a los grupos funcionales que forman el espectro IR.

Analizando la figura 4.4 donde aparece el espectro IR de una muestra de CR39 antes y después de la irradiación a temperatura ambiente (18°C), se aprecia que la forma del espectro antes y después se conserva variando únicamente la intensidad de los picos. Solo el que aparece entre 3500 y 3600 cm^{-1} que esta asociado al OH si ha cambiado, dado que en el espectro de la muestra sin irradiar aparece muy estrecho y poco intenso, mientras que después de la irradiación aparece más ancho y muy intenso, señalando la aparición del grupo hidroxilo.

En las figuras 4.5, 4.6, 4.7 y 4.8 donde aparecen los espectros superpuestos de otras muestras que fueron obtenidos antes y después de la irradiación y donde la temperatura de irradiación fue de 30°C, 40°, 50°C y 75°C, respectivamente, se observa el mismo comportamiento; la forma del espectro no cambia

respecto al correspondiente al de antes de la irradiación. Solo la intensidad del pico asociado al grupo hidroxilo vuelve a sufrir un cambio haciéndose más ancho e intenso.

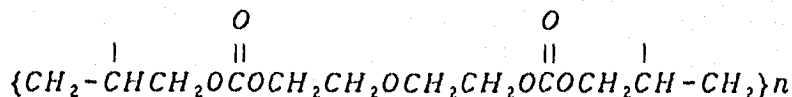
Por otro lado, comparando los espectros correspondientes al de las muestras después de la irradiación, no se observan diferencias de unas con otras, dando la impresión de que la temperatura de irradiación no hace que los productos finales de la interacción de la radiación con este material varíen.

En base a los resultados obtenidos, a continuación se presenta un posible mecanismo de reacción que se lleva a cabo en el material, debido a la radiación:

Al ser sometido el detector a una irradiación con partícula ionizantes sufrirá ionizaciones y excitaciones de sus moléculas. Estos efectos conducirán a rompimientos moleculares produciéndose radicales libres, generalmente a través de rupturas homolíticas, en la que cada fragmento originado conserva un electrón de la unión.

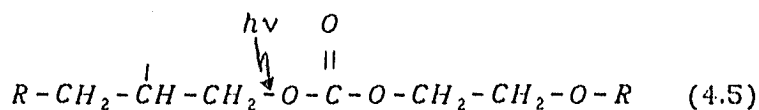
La ruptura homolítica de estados excitados en polímeros irradiados puede conducir a la formación de radicales libres. Si el polímero se encuentra en estado sólido, que es nuestro caso, los radicales producidos quedan atrapados en la matriz sólida muy próximos entre sí⁽²²⁾. De esta manera se espera que una alta proporción de reacciones entre radicales sea por recombinación o por desprotonización⁽²⁾.

Dado que el material en este trabajo es el Dietilenglicol (bis alil Dicarbonato) cuya estructura es

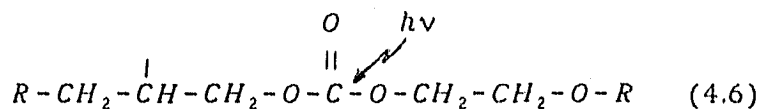


al ser sometido a la radiación sufrira ionizaciones y excitaciones que conducirán al rompimiento de cadenas en cualquier parte de la molécula, aunque existirán partes preferenciales en los enlaces más débiles.

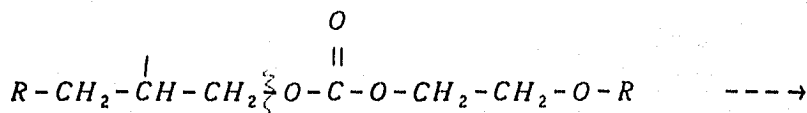
De la molécula, las cadenas poli-alil son relativamente inertes siendo menos sensibles a la radiación; en tanto que los enlaces carbonilos son los más debiles de la cadena molecular, por lo que serán los afectados por la radiación⁽³⁰⁾. Entonces, si la radiación afecta a esta parte de la cadena, habrá principalmente ruptura homolitica en los siguientes casos:

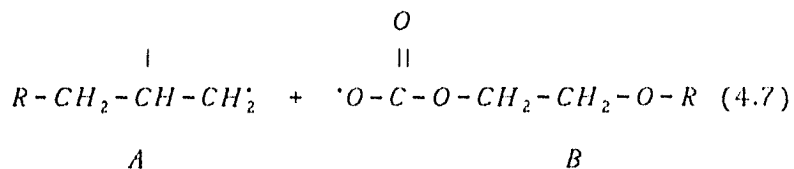


y

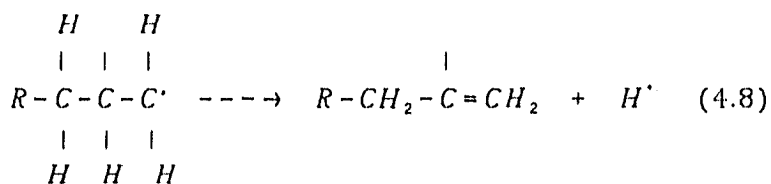


En el primer caso, los radicales producidos serán:



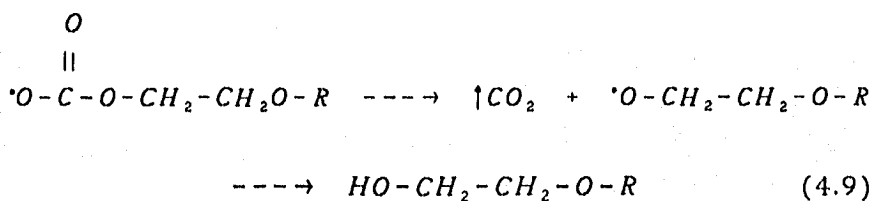


El radical A puede estabilizarse con el radical B por recombinación para formar nuevamente la molécula original. Pero también puede estabilizarse por separado, de acuerdo al siguiente mecanismo (desprotonización):



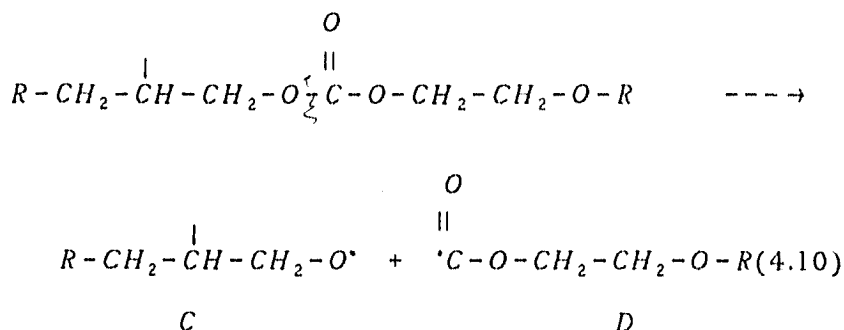
El ion H^+ formado es una especie muy reactiva cuya masa molecular es muy pequeña comparada con los macroradicales producidos por lo que tendrá suficiente energía cinética para moverse varias distancias de su origen.

El radical B puede estabilizarse de manera individual por atrapamiento de un ion H^+ de la siguiente manera:

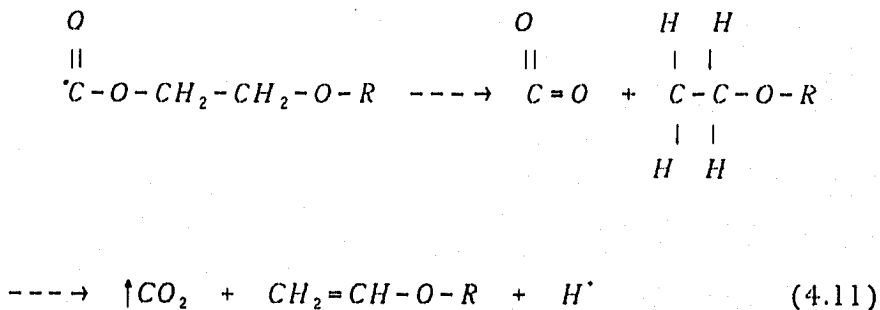


De acuerdo con los productos de la reacción se tendrá la aparición de un enlace etilénico (4.8) y un grupo hidroxilo (4.9), además de la producción de CO₂.

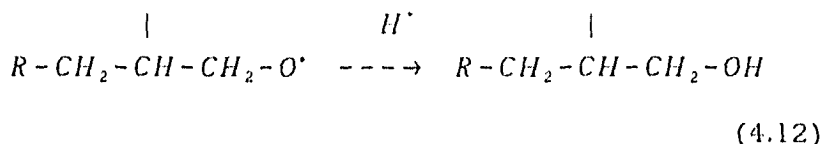
En el segundo caso de ruptura, los radicales producidos serán.



Estos radicales pueden recombinarse para formar la molécula original o pueden reaccionar de manera individual de acuerdo a su estructura, para estabilizarse. Así por ejemplo, el radical D se estabiliza de acuerdo al siguiente mecanismo (desprotonización):



El radical C puede estabilizarse por atrapamiento de un ion H^+ de la siguiente manera:



Por lo que en la estabilización de manera individual de cada uno de los radicales se tendrá la aparición, nuevamente, de un enlace etilénico (4.11) y de un grupo hidroxilo (4.12), así como la producción de CO_2 .

De esta manera, como resultado de la ruptura homolítica por efecto de la radiación se producirán dos tipos de radicales que podrán estabilizarse por recombinación, desprotonización o atrapamiento de un ion (²). La recombinación es más probable en los primeros instantes después de la interacción de la radiación con la materia debido a la gran cantidad de radicales producidos; por lo tanto, la intensidad de la señal de EPR producida decae rápidamente en los primeros minutos después de la irradiación, según se observa en la figura 5.3(b). En este caso existe una regeneración parcial del daño producido.

Por otro lado, si los radicales producidos se estabilizan por separado, mediante la desprotonización y atrapamiento de iones, que es el tipo de reacción predominante algunos segundos después de la irradiación, se tendrá la aparición de un grupo hidroxilo, estando de acuerdo con los resultados de la espectroscopia IR obtenidos. Aunque la aparición de la señal asociada al OH en el espectro IR puede también ser resultado de la oxidación del polímero, dado que la irradiación se llevó a cabo en presencia de oxígeno.

En el espectro IR también debería aparecer la señal de CO_2 , dado que hay producción de éste, pero se debe tomar en cuenta que es un producto gaseoso y tiende a difundirse a través del material, escapando de él, pero la presencia de éste ya ha sido detectada según la literatura^(11,17). El doble enlace $\text{C}=\text{C}$ que también es producto de las reacciones de los radicales (ec.4.8 y ec.4.11) debe producir señal IR en el intervalo de 1500 a 1800 cm^{-1} , pero determinar su presencia es muy difícil debido a que la banda que produce es poco intensa.

De esta manera, aparte de la producción de nuevas especies moleculares, resultado de las reacciones de los radicales, se tendrán cadenas moleculares de longitud menor, ésto es, especies de menor peso molecular; ésto hace que el material después de irradiado sea más susceptible al ataque químico con soluciones alcalinas.

Cabe aclarar que aunque se analizó un solo mecanismo de reacción producido por la radiación, el cual se ajusta a los resultados obtenidos en este trabajo, así como a los de la literatura^(1,11,17), no es el único, sino que pueden existir otros mecanismos aunque la probabilidad de que éstos se den es menor, por lo que el análisis de los productos de estos mecanismos será aún más compleja.

El comportamiento de la señal de EPR debido a la temperatura de irradiación puede explicarse de la siguiente manera: de acuerdo a lo que se ha dicho a lo largo de este trabajo, como resultado de la interacción de la radiación con la materia se producirán radicales libres, las cuales son especies altamente reactivas. La temperatura aplicada al material durante la irradiación incrementa la movilidad de éstos y por ende, su velocidad de recombinación; la recombinación conducirá a un proceso de restauración y/o entrecruzamiento de la cadenas poliméricas y dado que estas reacciones se caracterizan por

tener una alta energía de activación, el proceso se aumentará con el incremento de la temperatura⁽²⁾. Así, al incrementarse la temperatura de irradiación, la velocidad de recombinación aumentará, conduciendo a una rápida disminución de la concentración de los radicales, por lo que la señal de EPR producida también disminuirá. De esta manera, en el proceso de interacción de las partículas cargadas pesadas con los DSTN existe una regeneración del daño producido por la radiación conforme aumenta la temperatura conduciendo a un borrado parcial y hasta casi total de la traza.

IV.3 Conclusiones

Al observar y analizar los resultados obtenidos en la irradiación de plásticos CR39, donde la temperatura de irradiación fue distinta para cada caso se encontró que existe una influencia de ésta en la cantidad de radicales libres producidos. Tal influencia se traduce en la disminución de intensidad de la señal de EPR producida conforme aumenta la temperatura. Dado que la intensidad de la señal es función directa de la cantidad de radicales presentes, esta cantidad disminuye entonces al aumentar la temperatura, sin cambiar la naturaleza de éstos.

En este trabajo, la mayor intensidad se obtuvo para temperatura ambiente (25°C), decreciendo monótonamente con la temperatura, hasta 100°C donde la señal casi ha desaparecido. También se encontró que la señal de EPR disminuye conforme aumenta el tiempo después de que se suspende la irradiación.

La espectroscopia IR muestra claramente la aparición de un nuevo grupo funcional por efecto de la irradiación del material, siendo este el grupo hidroxilo. Respecto al resto del espectro, la forma no cambia apreciablemente, solo la intensidad de los picos de absorción.

También se concluye que la temperatura no afecta a los productos finales de la irradiación, más sin embargo no se puede decir lo mismo respecto a la cantidad de éstos.

BIBLIOGRAFIA

- 1.- Apel, P. Ya, et. al. Track Structure in Some Heavy-Ion Irradiated Plastic Films.
Nucl. Tracks Radiat. Meas., Vol.17, No.3, p.p.191-193, 1990.
- 2.- Apel, P. Ya., et. al. Registration Temperature Effect in Polypropylene Detectors.
Nucl. Tracks Radiat. Meas., Vol.22, Nos 1-4, p.p.93-96, 1993.
- 3.- Apel, P. Ya., et. al. Effects of Atomic Hydrogen on Polymeric Track Detectors.
Nucl. Tracks Radiat. Meas., Vol.22, Nos 1-4, p.p.97-100, 1993.
- 4.- Assenheim, H.M. Introduction to Electron Spin Resonance.
New York, Plenum Press, 1967.
- 5.-Balcazar Garcia, et al. CR39, a Detector to Study Superheavy Elements.
- 6.- Balcazar Garcia. Notas del Curso de Posgrado "Radioisótopos e Instrumentación Nuclear" en la Escuela de Ciencias Biológicas del IPN.
Abril, 1986.
- 7.- Balcazar Garcia and H Pineda. Versatile Irradiation Chamber to Perform Experiments with SSNTDs.
The Nucleus, No.20 (1983), p.p.73-75.
- 8.- Banwell, C.N. Fundamentos de Espectroscopia Molecular.
Cap.3.
Ediciones del Castillo, S.A., 1977.

- 9.- Bassam Z. Shakashiri. Cinética Química.
Edit. Limusa, 1981.
- 10.- Chadderton, Lewis T, Salvador A. Cruz and Dietmar W. Fink.
Theory for Latent Particle Track in Polymers.
Nucl. Tracks Radiat. Meas., Vol.22, Nos 1-4, p.p.29-38, 1993.
- 11.- Chambaudet, A. and J.Roncin. I.R., U.V. and E.S.R., Studies on Plastic Track Detector Irradiated by Heavy Ions.
Proceedings of the 11th International Conference, Bristol 7-12 September, 1981.
Solid Stated Nuclear Tracks Detector.
- 12.- Chipara, M., D.Hasegan and M.Velter-Stefanescu. E.S.R. Studies in Electron Beam Irradiated Lexan.
Proceedings of the 10th International Conference, Lyon 2-6 July, 1979.
Solid Stated Nuclear Tracks Detector.
- 13.- Chong, C.S., D.A. Bradley and Abdul Ghani Sidek. The Effect of Irradiation Temperature on Track Formation in Chemically Etched LR-115 Type II Polymer.
Appl. Radiat. Isot., Vol.40, No.8, p.p.651-655, 1989.
- 14.- De la Teja Angeles C. Estudios de la Resonancia Paramagnética Electrónica de Semillas de Dahlia Coccinea Irradiada.
Tesis de Licenciatura. Fac. de Ciencias, UNAM, 1970.
- 15.- Durrani, S.A. The Effect of Irradiation Temperature on the Response of Track Recording. Crystalline and Polymeric Media.
Nucl. Tracks Radiat. Meas., Vol.19, Nos 1-4, p.p.61-70, 1991.
- 16.- Ebert, P.J., A.F. Lauzon and E.M. Lent (1969). Transmission and Backscattering of 4.0 to 12.0 MeV Electrons.
Physical Review, Vol.183, No.2. July 1969.

- 17.- El-Shahawy, M., A.Hussein and A.Towasi. CR39 as a Gamma Dosimeter: Dielectric and Infrared Studies.
Journal of Materials Science 27 (1992), p.p.6605-6608.
- 18.- Espinosa, Guillermo. Trazas Nucleares en Sólidos.
Universidad Nacional Autónoma de México.
Instituto de Física, UNAM. 1994.
- 19.- Karamdoust, N.A. and S. A. Durrani. Effect of Registration Temperature on the Response of CR-39 to Alpha Particles and Fission Fragments.
Nucl. Tracks Radiat. Meas., Vol.19, Nos 1-4, p.p.179-184, 1991.
- 20.- Koji Matsuda and Toshiyuki Kijima. Electron Beam Dosimetry for a Multilayer Absorber.
Appl. Radiat. Isot., Vol.142, No.3, p.p.235-239 (1991).
- 21.- Mark, et. al. Radiation-Resistant Polymers.
Encyclopedia of Polymer Science and Engineering, Vol.13.
Edit. Board, Second Edition, 1986.
- 22.- Mark, et. al. Electron-Spin Resonance.
Encyclopedia of Polymer Science and Engineering, Vol.5.
Edit. Board, Second Edition, 1986.
- 23.- Mendoza Anaya, D. La Temperatura como parámetro Adicional en el Registro de Partículas Cargadas en Detectores Plásticos.
Tesis de Licenciatura, Fac. de Ciencias, UNAM, 1992.
- 24.- Morcillo Rubio, J. Espectroscopia Infrarroja.
Serie Química-Monografía, No.12.
Washington, D.C., 1974.
- 25.- Morrison and Boyd. Química Orgánica.
Fondo Educativo Interamericano, 1976.

- 26.- Northcliffe and Schilling. Nuclear Data Table.
A7, 1970.
- 27.- Pshezhetskii, S. Ya., et al. EPR of Free Radicals in Radiation Chemistry. John Wiley & Sons. 1974 Keter Publishing House Jerusalem Ltd.
- 28.- Rostislav Georgievich Zhabankov. Infrared Spectra of Cellulose and its Derivates.
Edited by Academician B.I. Stepanov.
Consultans Bureau, New York, 1986.
- 29.- Spink and Woods. An Introduction to Radiation Chemistry.
3rd edition
New York, Wiley, 1990.
- 30.- Stejny, J. and T. Portwood. A Study of the Molecular Structure in CR39.
Nuclear Tracks, Vol.12, Nos.1-6, p.p.121-123,1986.
- 31.- Tabata, T., R. Ito and S. Tsukui (1990). Semiempirical Algorithms for Dose Evaluation in Electron-Beam Processing.
Radiat. Phys. Chem. Vol.35, Nos.4-6, p.p.821-825.
- 32.- Tabata, T., R. Ito and S. Okabe. Generalized Semiempirical Equations for the Extrapolated Range of Electrons.
Nuclear Instruments and Methods 103 (1972), p.p.85-91.
- 33.- Tanaka, R., et. al. (1989). Intercomparative Study on Low Energy Electron Beam Dosimetry.
Radiat. Phys. Chem. Vol.33, No.5, p.p.407-410.
- 34.- Vargas C.A. Detección de Neutrones Rápidos por Trazas en policarbonatos.
Tesis de Licenciatura. Fac. de Ciencias, UNAM, 1982.
- 35.- Huyhes, Gordon. Radiation Chemistry.
Clarendon Press. Oxford, 1973.

APENDICE I RESONANCIA PARAMAGNETICA ELECTRONICA

EPR es un método sensitivo para detectar electrones desapareados, tales como los que se encuentran en radicales libres. Los radicales pueden ser identificados por su espectro y su cantidad se estima por comparación con sustancias paramagnéticas estables (por ejemplo, el radical de difenilpicrílhidrazilo, DPPH) o sales paramagnéticas, utilizadas como patrones. La determinación de radicales libres es más conveniente si éstos son estables, o se han estabilizado por atrapamiento en matrices sólidas.

EPR es una propiedad intrínseca de algunas partículas, tales como los electrones. Un electrón se mueve en un orbital alrededor de un núcleo, y consecuentemente posee un momento angular, \vec{J} . A su vez, dentro de esta órbita, también gira sobre su propio eje, teniendo un momento de espín, \vec{S} . Esta partícula, dado que posee espín, se puede considerar como una carga en rotación y por consiguiente tendrá asociado un momento magnético, $\vec{\mu}$.

Ahora si esta carga en movimiento es colocada en presencia de un campo magnético externo, su momento magnético se orientará en direcciones discretas. Los niveles más bajos de energía en esta orientación son los más abundantes, respecto a los de mayor energía, y la técnica de EPR consiste en hacer transiciones electrónicas del nivel de más baja energía al nivel de mayor energía (figura I.1). Si los dos niveles de energía en cuestión son E_1 y E_2 , entonces la energía requerida para producir una transición de E_1 a E_2 es

$$E_1 - E_2 = h\nu \quad (1.1)$$

donde $h\nu$ es el cuanto de energía de frecuencia ν y h es la constante de Planck.

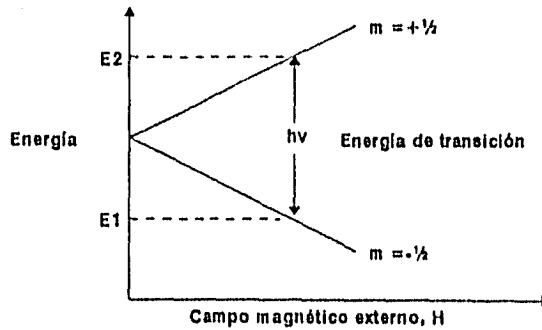


Figura I.1.- Niveles de energía máxima y mínima para un electrón $n (s=1/2)^{('4')}$.

Análisis clásico.- Si el electrón visto como una carga, e , se encuentra girando a $\nu/2\pi r$ revoluciones por segundo, es equivalente a una corriente (i):

$$i = \frac{e\nu}{2\pi r} \quad (1.2)$$

donde ν es la velocidad del electrón y r es el radio de la órbita.

Una carga en rotación alrededor de una espira tiene asociado un momento magnético cuya magnitud esta dada por

$$\mu = ia \quad (1.3)$$

donde i es la corriente y a es el área de la espira.

Sustituyendo la ecuación 1.3 en 1.4 y tomando en cuenta que $a = \pi r^2$, se tiene que

$$\mu = \frac{1}{2} e v r \quad (1.4)$$

Reescribiendo esta ecuación en unidades electrostáticas:

$$\mu = \frac{e v r}{2c} \quad (1.5)$$

donde c es la velocidad de luz en el vacío.

Por otro lado, una partícula de masa m al girar produce un momento angular \bar{J} , paralelo al eje de rotación y de magnitud

$$\bar{J} = m \bar{v} \times \bar{r} \quad (1.6)$$

De aquí que el momento magnético este dado por

$$\bar{\mu} = \frac{e}{2m \cdot c} \bar{J} \quad (1.7)$$

siendo m_e la masa del electrón.

A la razón dada por

$$\frac{\bar{\mu}}{J} = \frac{e}{2m_e c} = \gamma \quad (1.8)$$

se le conoce como razón giromagnética.

De acuerdo al momento angular asociado al electrón, el momento magnético estará dado por⁽⁴⁾:

$$\mu_e = \frac{g_e}{2} \left(\frac{\hbar e}{2m_e c} \right) = \frac{1}{2} g_e \beta_e \quad (1.9)$$

donde

$$\beta_e = \frac{\hbar e}{2m_e c}$$

A g_e se le conoce como el factor de Lande, siendo un número adimensional cuyo valor depende de las condiciones en las que se encuentra el electrón. β_e es el magnetón de Bohr, cuya magnitud es de 9.2712×10^{-21} erg/gauss.

Cuando una partícula que posee carga, se encuentra girando en un campo magnético \bar{H}_e , de tal manera que el momento magnético de la partícula forme un ángulo θ con el campo \bar{H}_e (figura 2.2), el momento experimentará un torque τ , dado por

$$\bar{\tau} = \bar{\mu} \times \bar{H}_e \quad (1.10)$$

Tomando en cuenta que

$$\bar{\tau} = \frac{d\bar{J}}{dt} \quad (1.11)$$

y dado que

$$\bar{\mu} = \frac{e}{2m_e c} \bar{J} \quad (1.12)$$

se tiene entonces

$$\bar{\tau} = \frac{e}{2m_e c} \bar{J} \times \bar{H}_0 \quad (1.13)$$

Esto significa que el torque produce un cambio en el momento angular. El cambio $d\bar{J}$ es perpendicular a \bar{J} y \bar{H}_0 , que conduce a una precesión de \bar{J} alrededor de \bar{H}_0 , (precesión de Larmor).

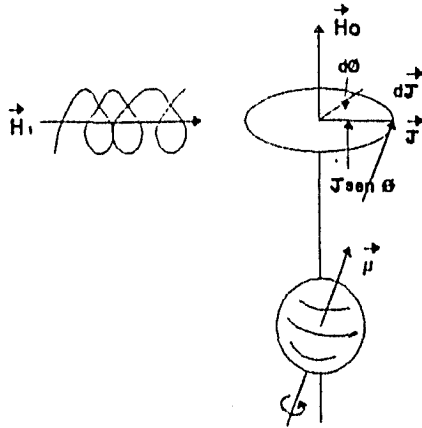


Figura I.2.- Precesión de Larmor del espín electrónico alrededor de la dirección del campo magnético aplicado, \vec{H}_0 .

De la figura I.2 se tiene que

$$d\phi = \frac{|dJ|}{J \operatorname{sen} \theta} \quad (I.14)$$

De donde

$$\omega_p = \frac{d\phi}{dt} = \frac{|d\vec{J}/dt|}{J \operatorname{sen} \theta} = \frac{e}{2m_e c} H \quad (I.15)$$

Esta relación describe el movimiento de precesión de \vec{J} respecto de \vec{H}_0 , con velocidad angular ω_p . Dado que $\omega_p = 2\pi\nu$, tenemos que la precesión de Larmor en función de frecuencia es

$$\nu = \gamma \frac{H_0}{2\pi} \quad (1.16)$$

El siguiente paso es aplicar un pequeño campo oscilante \vec{H}_1 , (figura I.2) cuya dirección forme un ángulo recto respecto al campo principal \vec{H}_0 , de tal manera que cuando la frecuencia de este campo corresponda a la frecuencia de precesión, el dipolo magnético absorberá energía (fenómeno de resonancia). En este caso se efectúa la transición de una orientación de más baja energía a otro de mayor energía. La frecuencia de resonancia sucede en la región de microondas, en alrededor de los 9.5 GHz para un campo magnético aplicado de 3500 gauss (banda X).

De esta manera, cuando una sustancia paramagnética se somete a la acción de un campo magnético y se irradia con la frecuencia de resonancia, tienen lugar transiciones de niveles de energía bajos a los niveles superiores, dando como resultado una absorción neta de energía por parte de la sustancia.

La forma más simple de EPR es la absorción resonante en la forma de un solo pico, aunque en la realidad la absorción de energía es mucho más complicado por diversas razones. Por lo que la absorción de energía para la mayoría de los radicales libres no es de una línea, sino una señal muy complicada que consiste de varios picos de absorción de energía, la cual es conocida como "espectro EPR". El espectro EPR se caracteriza por los siguientes parámetros: intensidad, ancho y forma de la líneas de absorción, el valor del factor "g" y de la estructura hiperfina.

Estos parámetros indican la forma de la interacción de los electrones desapareados con su entorno pudiéndose establecer de esta manera la naturaleza y estructura de las partículas paramagnéticas.

La aparición de varios picos de absorción se debe a que los electrones desapareados interactúan no solo con el campo magnético externo aplicado, H_0 , sino también con varios campos magnéticos y eléctricos dentro de la sustancia producidos por los átomos y moléculas vecinas. Consecuentemente, la línea de absorción de resonancia obtenida para un valor dado del campo magnético, será sobre un rango de valores del campo aplicado.

La intensidad de la señal de EPR esta determinada por varios factores interrelacionados. En primer lugar es determinada por la frecuencia de microondas empleada, aumentando rápidamente con el incremento de ésta. También es determinada por la concentración de la muestra paramagnética, por la probabilidad de transición entre los estados de espín electrónico y por la temperatura.

La intensidad de la señal es realmente el área total bajo la curva de resonancia, y puede usarse para determinar la concentración de los centros paramagnéticos⁽¹⁴⁾.

APENDICE II ESPECTROSCOPIA INFRARROJA

La espectroscopia infrarroja es una de las técnicas más importantes para la determinación de la estructura molecular.

La región del infrarrojo es una determinada zona del espectro electromagnético, situada en una longitud de onda mayor al de la región visible. Como toda radiación electromagnética, la radiación infrarroja es un movimiento ondulatorio formado por un campo eléctrico oscilante, perpendicular a la dirección de propagación, y un campo magnético oscilante, con la misma frecuencia y perpendicular al campo eléctrico. Por tanto, la radiación infrarroja está caracterizada tanto por esta frecuencia de oscilación, ν , como por la longitud de onda, λ . Ambas están relacionadas por la siguiente ecuación:

$$\nu\lambda = c \quad (II.1)$$

donde c representa la velocidad de la luz en el vacío. La longitud de onda generalmente se expresa en micrómetros, μm . La frecuencia se expresa siempre en s^{-1} , que representa el número de ciclos por segundo (Hz).

La frecuencia de la radiación infrarroja alcanza números muy grandes (10^{12} a 10^{14} Hz) por lo que en vez de la frecuencia, para caracterizar la radiación infrarroja, se utiliza el normalmente llamado número de onda, $\bar{\nu}$ (en cm^{-1}), siendo el inverso de la longitud de onda; por tanto, es el número de ondas de la radiación contenidas en un centímetro, ésto es:

$$\bar{\nu}(\text{cm}^{-1}) = \frac{1}{\lambda(\text{cm})} \quad (11.2)$$

El número de onda resulta ser proporcional a la frecuencia, dado que

$$\bar{\nu} = \frac{\nu}{c} \quad (11.3)$$

como se deduce de ecuaciones II.1 y II.2.

La región infrarroja suele considerarse como la zona comprendida entre las longitudes de onda de 0.75 y de 1000 μm , que corresponde a los números de onda 13333 y 10 cm^{-1} . La región infrarroja se subdivide a su vez en tres regiones, la del infrarrojo próximo o cercano, la del infrarrojo medio o fundamental y la del infrarrojo lejano.

La región de infrarrojo próximo suele considerarse comprendida entre 0.75 y 2.5 μm (13333-4000 cm^{-1}). En esta región aparecen las bandas de absorción debidas únicamente a los armónicos de las vibraciones moleculares.

La región del infrarrojo medio, esta comprendida entre 2.5 y 25 μm (4000-400 cm^{-1}). En esta región aparecen las bandas de absorción debidas a las vibraciones fundamentales de las moléculas, por lo es más importante y más empleada en espectroscopia infrarroja.

La región del infrarrojo lejano, comprende el intervalo de 25-1000 μm (400-10 cm^{-1}). En esta región aparecen las bandas de absorción debido a la rotación de las moléculas ligeras, así como a los movimientos reticulares en cristales.

Origen del espectro infrarrojo.- Como es sabido, una molécula no es una estructura rígida, sino que a la temperatura ordinaria, los átomos que la forman poseen movimientos de rotación y translación alrededor de las posiciones de equilibrio. Desde el punto de vista de espectroscopia molecular, es más importante el de vibración, debido a las oscilaciones periódicas o vibraciones de los átomos alrededor de sus posiciones de equilibrio. La energía de rotación es bastante menor que la vibración, por lo que da lugar a espectros en la región de microondas o en el infrarrojo lejano. La amplitud de las vibraciones es muy pequeña, entre 0.01 y 0.1 Å, y su frecuencia de vibración es relativamente elevada, de 10^{12} a 10^{14} Hz. Esta frecuencia es de la misma magnitud que la de la radiación infrarroja, por lo que cabe esperar que haya interacción de dicha radiación con las vibraciones atómicas de una molécula. En efecto, al exponer un conjunto de moléculas con radiación infrarroja de frecuencia apropiada, ocurre una absorción por las moléculas de la energía de radiación. El registro gráfico del porcentaje de la radiación absorbida por una muestra, en función de la longitud de onda de la radiación incidente, es lo que se llama espectro infrarrojo, estando íntimamente relacionado con las vibraciones moleculares. La región del espectro en que aparece una absorción se llama banda de absorción.

Todas las moléculas diatómicas heteronucleares, dado que tienen momento dipolar permanente, $\mu \neq 0$, que oscila periódicamente al vibrar la molécula, pueden absorber radiación electromagnética y dar lugar así a una banda de absorción en el espectro infrarrojo.

Por el contrario todas las moléculas diatómicas homonucleares no tienen momento dipolar permanente, $\mu = 0$, pues al ser iguales los dos átomos que la forman, la distribución

electrónica es simétrica respecto al centro de enlace, y sigue siendo simétrica al vibrar la molécula, por lo que es siempre $\mu_e=0$, y tanto, no puede absorber radiación electromagnética infrarroja.

En las moléculas diatómicas solo es posible una forma de vibración muy sencilla consistente en la separación y acercamiento periódico de sus átomos. Por el contrario, las vibraciones de los átomos de las moléculas poliatómicas son en general, muy complejas y pueden ofrecer infinitud de formas. Sin embargo se ha demostrado que todas ellas pueden obtenerse por superposición de un número reducido de simples vibraciones independientes, llamadas vibraciones normales o nodos normales de vibración.

En las moléculas poliatómicas, lo mismo que en las diatómicas, el mecanismo de absorción de radiación infrarroja tiene lugar mediante un dipolo eléctrico oscilante⁽²⁴⁾, por lo que solo las vibraciones normales dan lugar a una variación del momento dipolar de las moléculas, llamadas vibraciones activas en infrarrojo, absorbiendo por resonancia toda o parte de la radiación incidente cuya frecuencia coincida con la de la vibración. Por el contrario, las vibraciones normales que no producen cambio del momento dipolar, llamadas vibraciones inactivas o vibraciones prohibidas en infrarrojo, no pueden absorber la radiación infrarroja.

Bandas características.- En moléculas muy simples es posible conocer la forma de las vibraciones existiendo procedimientos matemáticos para calcular la frecuencia de vibración; pero, al aumentar la complejidad de las moléculas, la dificultad de los cálculos crece enormemente y esto hace recurrir a ciertas reglas semiempíricas para relacionar el espectro infrarrojo con la estructura de tales moléculas.

Se ha encontrado experimentalmente que determinados grupos atómicos, cuando están presentes en una molécula, dan lugar casi siempre a ciertas bandas de absorción aproximadamente a la misma frecuencia, llamadas por esto bandas características o frecuencias de grupos.

Cuando una molécula vibra lo hace como un todo unitario, sin embargo, algunos enlaces o grupos atómicos mantienen cierta individualidad dentro de una molécula, por lo que puede decirse con cierta aproximación que poseen vibraciones características que afectan fundamentalmente al enlace o grupo considerado, y que varían muy poco al pasar de un compuesto a otro.

Antes de registrar el espectro infrarrojo de una sustancia, es aconsejable familiarizarse con la fórmula estructural del material, o el rango de los posibles elementos estructurales para mejorar el método de preparación de las muestras y así obtener mejores resultados.

Estudios del espectro infrarrojo de la celulosa y otros compuestos afines han mostrado la presencia de grupos o enlaces en las siguientes regiones^(8, 24, 28):

1.- La región de 3200 a 3700 cm^{-1} esta asociada con la presencia de grupos OH y/o NH. Las bandas de absorción en el rango de 2700 a 3200 cm^{-1} están asociadas a las vibraciones de tensión de los grupos CH, CH₂ y CH₃. Una banda estrecha en el intervalo de 3000 a 3200 cm^{-1} indica la presencia de grupos CH de doble enlace o de estructuras aromáticas.

2.- En la región de 2000 a 2600 cm^{-1} se han investigado muestras conteniendo grupos OD, SH y enlaces triples de C-N y C-C.

3.- Investigaciones en el rango de 1500 a 1800 cm^{-1} han mostrado la presencia de enlaces C=O, C=C y N=O, así como las deformaciones vibracionales de los grupos amino, etc. Los

enlaces dobles C=O y N=O son fácilmente detectables; éstos se dan en alrededor de 1750 cm^{-1} para C=O, 1650 cm^{-1} para NO₂, 1550 cm^{-1} para CNO₂ y de 1600 a 1500 cm^{-1} para aromáticos. La determinación de la presencia de los grupos C=C es muy difícil debido a que las bandas son muy poco intensas.

4.- Las bandas de absorción en las regiones de 1000 a 1500 cm^{-1} han sido asociadas a la presencia de los grupos metileno y metil y a los enlaces ester de los grupos P=O y SO₂ o SO₃; También dan información adicional de los grupos NO₂, COOH, C-OH, etc.

De esta manera se puede decir que el espectro infrarrojo puede ser usado para determinar la estructura molecular, así como el análisis cualitativo y cuantitativo de distintas sustancias. Este espectro mostrará características particulares que estarán íntimamente asociadas con la estructura de la sustancia en particular.

Las frecuencias observadas establecen la presencia en la molécula de grupos o enlaces y los cambios de frecuencia de estos grupos al formar parte de otros compuestos dan información de las nuevas condiciones de interacción de estos grupos con otros elementos estructurales. Una característica importante de una banda de absorción es su intensidad, la cual indica la polaridad de la molécula o de un elemento individual y hace posible un análisis cuantitativo del espectro. El contorno de una banda de absorción está íntimamente relacionado con la vibración inter e intramolecular de los grupos y puede proveer información de los tipos de interacción.

Las ventajas de la espectroscopia infrarroja son: su alta selectividad, repetitividad, muy alta sensibilidad y rapidez de análisis y se requiere una pequeña cantidad de muestra para el análisis.

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

En este trabajo se utilizó el método de EPR para el análisis de los radicales libres producidos por la radiación en el material, en tanto que la Espectroscopia Infrarroja se utilizó para observar los cambios en la estructura molecular del material por efectos de la irradiación, como se vera más adelante.