

00362 4



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FISICAS

EMISION DE RAYOS X CARACTERISTICOS POR IMPACTO DE IONES DE ¹²C

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS (FISICA) PRESENTA: FIS. OSCAR GENARO DE LUCIO MORALES

280331

DIRECTOR DE TESIS: DR. JAVIER MIRANDA MARTIN DEL CAMPO

2000



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.

Dr. José Luis Boldú Olaizola
Coordinador del Posgrado en Ciencias Físicas
PRESENTE

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis:
Emisión de Rayos X Característicos por Impacto de Iones de ¹²C

realizado por **DE LUCIO MORALES OSCAR GENARO**

con número de cuenta **9015492-4** y con número de expediente **3981039**,
estudiante de la Maestría en Ciencias (Física), Plan 462.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Presidente:

DR. JORGE RICKARDS CAMPBELL

Secretario:

DR. ROBERTO ORTEGA MARTINEZ

Vocal:

DR. JAVIER MIRANDA MARTIN DEL CAMPO

Vocal:

DR. JUAN ANDRES ASPIAZU FABIAN

Vocal:

DR. SALVADOR CRUZ JIMENEZ

Suplente:

DRA. MARIA ISABEL GAMBOA DE BUEN

Suplente:

DRA. MARIA DEL PILAR ORTEGA BERNAL

Jorge Rickards
R. Ortega M

Juan A. Aspiazu F.

Salvador Cruz Jimenez

M. I. Gamboa de Buen

M. del P. Ortega Bernal

**A Elia, Genaro
y Víctor**

**A mi asesor,
el Dr. Javier Miranda**

AGRADECIMIENTOS

A mis sinodales:

**DR. JORGE RICKARDS CAMPBELL
DR. ROBERTO ORTEGA MARTINEZ
DR. JAVIER MIRANDA MARTIN DEL CAMPO
DR. JUAN ANDRES ASPIAZU FABIAN
DR. SALVADOR CRUZ JIMENEZ
DRA. MA. ISABEL GAMBOA DE BUEN
DRA. MA. DEL PILAR ORTEGA BERNAL**

por la revisión de este trabajo y las observaciones que hicieron para mejorarlo.

Al Dr. Luis Rodríguez Fernández por su colaboración durante el desarrollo de este trabajo así como por sus valiosos comentarios

A los Sres. Karim López Guzmán y Francisco Jaimes Beristáin por su apoyo en el manejo del acelerador Pelletron

A los Sres. Melitón Galindo y Manuel Muñoz Orozco por su ayuda en la preparación de las muestras

A CONACYT por su apoyo económico a través del programa de becas de posgrado y de los proyectos G0010-E y F036-9109

A DGAPA por el financiamiento del proyecto IN-101097

CONTENIDO

CONTENIDO	1
INTRODUCCIÓN	3
EMISIÓN DE RAYOS X INDUCIDA POR PARTÍCULAS	6
1. PRINCIPIOS BÁSICOS.....	6
2. PROCESOS DE PRODUCCIÓN DE RAYOS X.....	12
2.1 Rayos X Característicos.....	12
2.2 Fondo Continuo.....	15
2.3 Bremsstrahlung Electrónico.....	15
2.4 Fondo de Rayos γ	17
3. ESPECTROSCOPIA DE RAYOS X.....	17
3.1 Calibración del Detector de rayos X.....	17
3.2 Forma de los Picos y Picos de Escape.....	18
3.3 Distorsión del Espectro por Apilamiento.....	20
3.4 Eficiencia del Detector.....	21
4. ANÁLISIS CUANTITATIVO.....	22
4.1 Relación entre Intensidades de Rayos X y Concentraciones.....	22
4.2 Análisis de Muestras Delgadas: Curvas de Sensibilidad para Blanco Delgado.....	26
5. EFECTOS ATÓMICOS Y MOLECULARES EN COLISIONES CON IONES PESADOS.....	27
5.1 Efectos Atómicos.....	28
5.1.1 Captura Radiativa de Electrones por Iones Altamente Ionizados (REC).....	28
5.1.2 Transiciones de 2 Electrones - 1 Fotón.....	29
5.2 Efectos Moleculares.....	30
CÁLCULO DE SECCIONES DE PRODUCCIÓN DE RAYOS X	33
1. APROXIMACIÓN DE BORN DE ONDA PLANA (PWBA).....	33
2. APROXIMACIÓN SEMICLÁSICA (SCA).....	39
3. APROXIMACIÓN ECPSSR.....	43
3.1 Efectos de Ligadura y Polarización.....	43
3.2 Efecto de Desviación Coulombiana.....	47
3.3 Efectos Electrónicos Relativistas.....	48
3.4 Efecto por Pérdida de Energía.....	50
3.5 Correcciones a la Teoría ECPSSR.....	52
3.5.1 Corrección de Átomo Unido (UA).....	53
3.5.2 Corrección de Orbital Molecular (MO).....	54
4. TEORÍA DE PERTURBACIÓN ADIABÁTICA.....	56
4.1 Teoría de Perturbación Adiabática con Carga MO Variable.....	57
4.2 La Sección Eficaz Escalada.....	61
DESARROLLO EXPERIMENTAL	66
1. DISPOSITIVO EXPERIMENTAL.....	66
1.1 Funcionamiento del Acelerador Pelletron.....	66

1.2 Cámara de Análisis.....	69
1.3 Detector de Rayos X.....	71
1.4 Detector de Partículas.....	74
2. MEDICIÓN DE LAS SECCIONES EFICACES DE PRODUCCIÓN DE RAYOS X K.....	75
ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	79
1. SECCIONES EFICACES DE PRODUCCIÓN DE RAYOS X K.....	79
2. AJUSTE DE LOS PARÁMETROS C_A Y C_M	81
3. COMPARACIÓN ENTRE LAS SECCIONES EFICACES DE IONIZACIÓN DE LA CAPA K.....	84
CONCLUSIONES.....	99
REFERENCIAS.....	101

INTRODUCCIÓN

La ionización de las capas atómicas internas inducida por el impacto de partículas cargadas ha sido estudiada exhaustivamente tanto experimental como teóricamente durante las últimas décadas. La mayoría de los resultados se concentran en el proceso de ionización de las capas K y L inducida por protones o partículas α . Por otro lado, se tiene un número mucho menor de mediciones de secciones eficaces de producción de rayos X producidos por el impacto de iones pesados. Esto debido al uso de la popular técnica analítica llamada PIXE, en la cual normalmente se utilizan protones, deuterones o partículas α .

El interés para hacer este tipo de investigación radica en el hecho de que la ionización de las capas internas es de gran importancia en el desarrollo de diferentes tipos de aplicaciones, como implantación de iones, cálculos de poderes de frenado, estudios de sólidos y plasmas, y aún la emisión de rayos X inducida por partículas (PIXE).

Además de las aplicaciones, se han hecho esfuerzos por entender el mecanismo de la colisión ion - átomo al comparar los resultados experimentales con predicciones de diferentes teorías. Entre los principales modelos teóricos para la ionización de capas internas por estas colisiones, se tiene la aproximación de onda plana de Born (PWBA); el cálculo de estado estacionario perturbado (PSS) con pérdida de energía (E), y correcciones coulombiana (C) y relativista (R), en conjunto (ECPSSR); la aproximación semiclásica (SCA) y la teoría del orbital molecular (MO). En el caso de protones y partículas α , las predicciones de la teoría ECPSSR son aceptadas universalmente para PIXE en el intervalo de energía de 1 MeV a 3 MeV salvo por un pequeño porcentaje. Para probar los modelos teóricos de manera más rigurosa, lo mejor es emplear iones pesados con los cuales los procesos de ionización son más complejos.

Los estudios de ionización de la capa K han sido clasificados, de acuerdo a Madison y Merzbacher [1] en dos categorías dependiendo del cociente entre los números atómicos del proyectil y del blanco (Z_1/Z_2) y del cociente entre la velocidad del electrón K del proyectil, v_{2K} , y del blanco, v_1 , dado por (v_1/v_{2K}) . Para colisiones de sistemas simétricos o casi - simétricos donde $Z_1/Z_2 \sim 1$, la promoción del electrón en la cuasi - molécula transitoria

formada es el proceso primario de ionización para $v_1 \ll v_{2K}$ (donde Z_1 , Z_2 son los números atómicos del proyectil y del blanco respectivamente, v_1 la velocidad del proyectil y v_{2K} la velocidad hidrogenoide del electrón en el átomo).

Briggs [2] muestra que para colisiones extremadamente lentas, el proceso de ionización directa de los MO puede explicarse como la ionización coulombiana de los MO por el paso lento de ambos núcleos. Dicho proceso puede describirse en términos de la aproximación de Born a primer orden en la base de funciones de onda del átomo unido (UA). Para colisiones rápidas, este proceso puede describirse nuevamente como la aproximación de Born a primer orden, pero ahora en la base de las funciones de onda del átomo separado (SA).

Para colisiones asimétricas donde $Z_1/Z_2 \ll 1$ y $v_1/v_{2K} \geq 1$, la ionización coulombiana directa de los orbitales SA domina el proceso de ionización.

El propósito de este trabajo fue estudiar la ionización de la capa K para colisiones lentas, yendo desde colisiones asimétricas hasta colisiones menos asimétricas. Usando iones de $^{12}\text{C}^{4+}$ con energías entre 6 MeV y 9 MeV incidiendo en los siguientes elementos: S, Ca, Ti, Mn, Fe, Cu, Ga, Ge, Pd, Ag, In.

En el Capítulo 1 se describen los procesos básicos de la emisión de rayos X inducida por partículas (PIXE) y la manera en que PIXE es empleada como una poderosa técnica analítica elemental, ubicando a la sección eficaz de producción de rayos X como una cantidad fundamental en esta técnica analítica. También se hace énfasis en la aparición de efectos atómicos y moleculares en PIXE cuando se utilizan iones pesados. El Capítulo 2 consta de algunos de los principales modelos teóricos desarrollados para explicar el proceso de colisión ion - átomo: Aproximación de Born de Onda Plana (PWBA); Aproximación ECPSSR con las correcciones de Átomo Unido (UA) y de Orbital Molecular (MECPSSR); Aproximación Semiclásica (SCA); y la aplicación de la Teoría de Perturbación Adiabática para describir la ionización del MO $1s\sigma$. En el Capítulo 3 se describe con detalle el dispositivo experimental utilizado para realizar las mediciones de las secciones eficaces de producción de rayos X, así como el procedimiento que se siguió para hacer los experimentos. En el Capítulo 4 se muestran los resultados experimentales obtenidos y se

hace una comparación entre éstos y los modelos teóricos descritos en el Capítulo 2. También se comparan con resultados experimentales previos, excepto para el caso del In, para el cual no se encontró que existieran mediciones anteriores. Finalmente, en el Capítulo 5 se exponen las conclusiones a las que se llegó en este trabajo.

Capítulo 1

EMISIÓN DE RAYOS X INDUCIDA POR PARTÍCULAS

La Emisión de Rayos X Inducida por Partículas (PIXE, por sus siglas en inglés) es una técnica de análisis multielemental, en la cual un haz de protones o iones más pesados se acelera hasta que adquiere una energía de unos cuantos MeV y al incidir sobre una muestra excita los átomos que la constituyen produciendo rayos X característicos. El espectro de rayos X se registra mediante el uso de un detector de rayos X.

En este capítulo se hace una descripción del proceso físico que da lugar a la técnica PIXE y de los fenómenos físicos que se pueden presentar cuando la muestra que está siendo analizada es bombardeada con un haz de iones pesados.

1. Principios Básicos

Un haz de partículas cargadas proveniente de un acelerador entra a una cámara de análisis que se encuentra al vacío, en la cual se encuentra la muestra que se desea analizar. Los iones excitan los electrones de las capas interiores de los átomos en la muestra y entonces se emiten rayos X. El espectro de energía de los rayos X consiste de un fondo continuo junto con las líneas de rayos X característicos de los átomos presentes en la muestra. Los rayos X se detectan por medio de un detector de Ge o de Si(Li), los pulsos producidos por el detector son amplificados y finalmente se registran en un analizador multicanal. Como un espectro de PIXE es por lo general complicado, debido al número de picos que pueden estar presentes, y que algunos pueden encontrarse traslapados, se utiliza una computadora para el análisis. Se calcula el número de cuentas en cada pico, que es una medida de la concentración del elemento correspondiente en la muestra. Si se mide la corriente como se indica en la figura 1.1, es posible calcular cantidades absolutas de los diferentes elementos, si todos los parámetros, como el ángulo sólido subtendido por el detector, la eficiencia del detector y las secciones de producción de rayos X son conocidos. De manera que PIXE permite determinar de manera absoluta las concentraciones elementales, lo cual es una gran

ventaja, aunque es más conveniente realizar una calibración tomando en cuenta materiales de referencia o patrones.

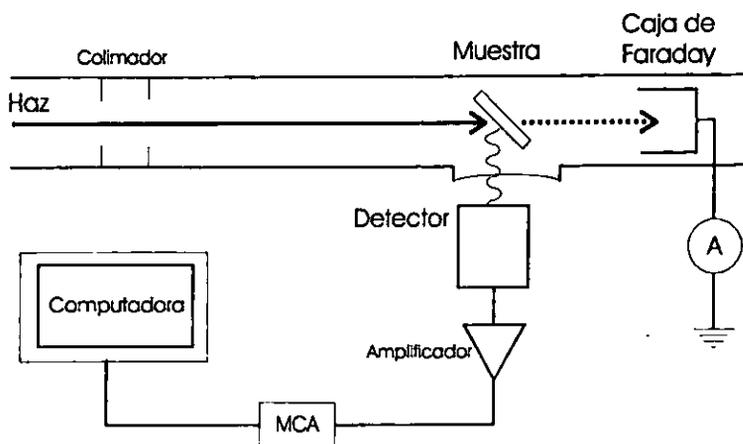


Figura 1.1.: Esquema de un dispositivo típico para análisis con PIXE.

Una ventaja importante de PIXE es que se pueden analizar muestras de muy diferentes tipos, por ejemplo [3]: material geológico, biológico, aerosoles atmosféricos, piezas arqueológicas. Probablemente el caso más común es una muestra delgada (ver figura 1.1). En este contexto *delgado* significa que el haz de partículas incidente sólo pierde una parte pequeña de su energía al atravesar la muestra. Esto es, la energía de excitación está bien definida y hay una muy pequeña absorción en la muestra de los rayos X emitidos por ésta. Aunque en muchos otros casos es imposible preparar una muestra delgada del material que se desea analizar. Tal es el caso de objetos valiosos como piezas arqueológicas, obras de arte, etc., en los cuales se necesita una técnica de análisis no destructiva.

Los rayos X emitidos por la muestra irradiada se captan mediante un detector apropiado. Es este detector el que permitió la aparición de ésta técnica de análisis, ya que permite detectar dispersiones en la energía y tiene una gran eficiencia. La resolución en energía es alrededor de 150 eV (a 5.9 keV), lo que significa que las líneas K de elementos cercanos pueden resolverse. Sin embargo, en un espectro típico de PIXE hay un gran número de picos de rayos X y frecuentemente no se puede evitar que exista interferencia.

Como ya se dijo, PIXE es una técnica de análisis basada en emisión de rayos X. El haz de iones, de alta energía, expulsa los electrones de las capas interiores en los átomos de la muestra. Cuando una vacante en una capa interna se ocupa por un electrón de las capas exteriores, un fotón de rayos X se emite, como se ilustra en la figura 1.2. Por otra parte la desexcitación puede realizarse también mediante la emisión de un electrón, conocido como *electrón Auger*. O mediante la emisión simultánea del electrón acompañado por un fotón de rayos X *efecto Auger Radiativo*.

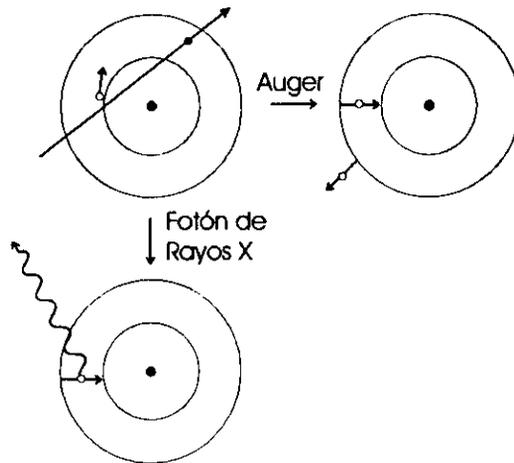


Figura 1.2.: Esquema de la creación de una vacante en las capas interiores por medio de (a) emisión subsecuente de rayos X y (b) emisión de un electrón Auger.

El espectro de rayos X queda determinado por los niveles de energía de los electrones en el átomo. La figura 1.3 muestra algunas de las transiciones permitidas por las reglas de selección de la mecánica cuántica. Las transiciones que van a la capa K se denotan rayos X K. Si el electrón que llena la vacante proviene de la capa L, entonces se denota K_{α} , y si proviene de la capa M, K_{β} . Como se tiene además una estructura fina, ambas líneas, K_{α} y K_{β} son dobletes. Las transiciones a la capa L se conocen como rayos X L, y estos tienen muchos componentes, en especial para elementos pesados. Es obvio entonces que el espectro de rayos X completo puede llegar a ser muy complicado. Aunque algunos componentes tienen casi la misma energía, como por ejemplo K_{α_1} y K_{α_2} , de manera que aparecen como sólo un pico en el espectro, algunas transiciones son de intensidad pequeña.

Entonces, en un espectro de PIXE los elementos ligeros y medios dan sólo dos picos resueltos, K_α y K_β . En un espectro de rayos X L para elementos pesados hay cuatro componentes predominantes resueltas y otras cuatro débiles.

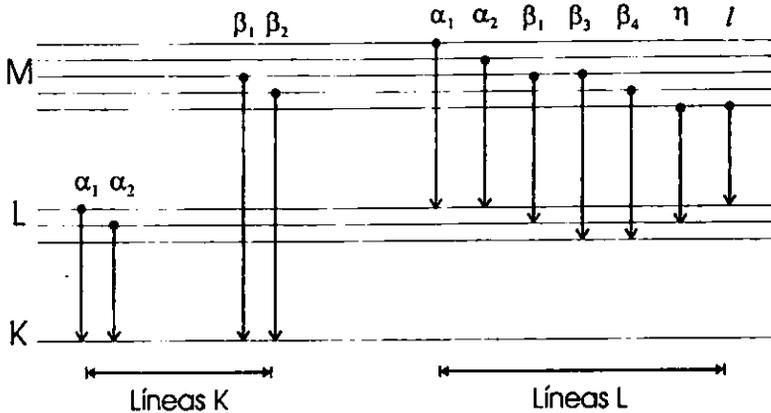


Figura 1.3.: Niveles de energía y transiciones de emisión de rayos X K, L.

La eficiencia de un detector de Si(Li) típico es casi constante en el intervalo de 5 keV a 25 keV, pero cae abruptamente para energías menores y mayores que ese intervalo; esta propiedad determina en parte cuáles series de rayos X pueden utilizarse para el análisis. En la figura 1.4 se muestra la energía de los rayos X característicos como función del número atómico. Es claro que una detección efectiva de los rayos X K se tiene en el intervalo $20 < Z < 50$ y para los rayos X L para $Z > 50$. Los elementos ligeros y medios son determinados por sus rayos X K y los elementos pesados por sus rayos X L.

En la figura 1.5 se muestra un espectro típico de PIXE con los diferentes rayos X identificados. Consiste principalmente de picos K_α y K_β provenientes de elementos ligeros y medios, aunque también se tiene presente radiación L producida por plomo. La radiación de fondo continua por debajo de 10 keV es bremsstrahlung emitido por los electrones secundarios. También se tiene una cola de alta energía por bremsstrahlung producido por el haz de iones. Para poder calcular las concentraciones elementales en la muestra irradiada, se debe determinar el área de cada pico de rayos X, pero es claro que una deconvolución manual es muy complicada, especialmente cuando se presenta interferencia. Por ello se cuenta con programas para computadora para encargarse de este problema.

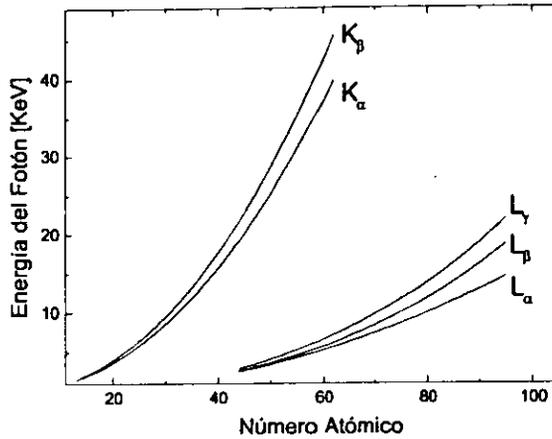


Figura 1.4.: Energías de las principales transiciones de emisión de rayos X K y L en función del número atómico.

El límite de detección es tal vez la característica más importante de un método analítico, y se muestra en la figura 1.6 como función de la energía y del número atómico. Otros parámetros como la corriente del haz, tiempo de análisis, y la eficiencia del detector, se suponen como parámetros comúnmente usados en análisis rutinario. El cálculo se aplica a los casos más comunes de análisis con PIXE: detección de elementos traza en una matriz de elementos ligeros.

Una característica interesante de la figura 1.6 es que la mayor sensibilidad se obtiene para energías bajas, en el caso de protones 2 MeV a 3 MeV, lo que significa que los aceleradores pequeños pueden utilizarse para PIXE. Otra característica importante es que la mayor sensibilidad se tiene para elementos cuyo número atómico es $20 < Z < 40$ y $Z > 75$, que son las regiones más interesantes en muchas aplicaciones analíticas.

Se han publicado artículos de revisión que cubren diferentes partes de la técnica de PIXE [4, 5, 6, 7]. Un recuento de la técnica analítica PIXE y sus aplicaciones se puede encontrar en [8].

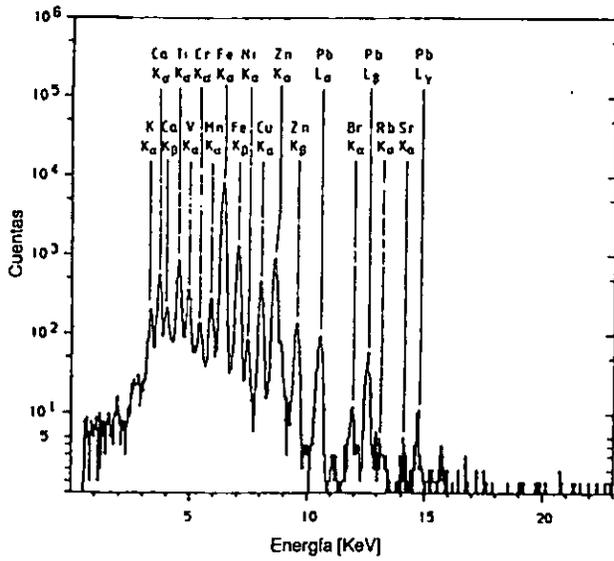


Figura 1.5.: Espectro típico de PIXE.

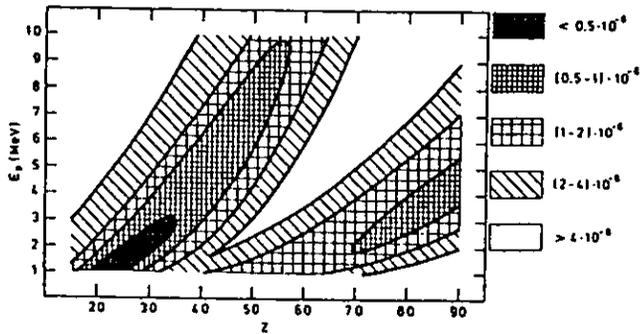


Figura 1.6.: Concentraciones detectables mínimas en función del número atómico y energía del protón para muestras orgánicas en un arreglo típico de PIXE.

2. Procesos de Producción de Rayos X

2.1 Rayos X Característicos

Los rayos X característicos de elementos en la muestra son el resultado de la desexcitación de las vacantes producidas por ionización mediante la interacción Coulombiana del haz de partículas cargadas con las capas atómicas interiores. En el caso de bombardeo con protones se puede encontrar en la literatura una gran cantidad de mediciones de secciones de ionización para las capas K y L, y una cantidad menor de datos para el caso de la capa M; estos datos han proporcionado un medio para probar los diferentes modelos teóricos de los procesos de ionización, para protones cuyas energías van desde 0.1 MeV hasta unos cuantos MeV. Exceptuando el caso de números atómicos pequeños, las predicciones para la capa K de las nuevas versiones de la teoría llamada ECPSSR (ver sección 3 del capítulo 2), una descripción conveniente y directa derivada del trabajo pionero de Brandt y Lapicki [9, 10], coinciden salvo un pequeño porcentaje con los mejores datos experimentales. Esta teoría trata el cambio en la velocidad y en la energía de las partículas debido al campo Coulombiano nuclear (C), perturbación de los estados atómicos estacionarios (PSS) por el proyectil, efectos relativistas (R) y pérdida de energía durante la colisión. La situación es más compleja y menos satisfactoria en el caso de la capa L; las secciones de ionización son diferentes y tienen distintas dependencias con la energía del protón para cada una de las tres subcapas, además de que las vacantes pueden transferirse de una subcapa a otra antes de que haya emisión de un fotón de rayos X. Esto provoca que las intensidades relativas del diagrama de líneas L varíe con la energía del protón, en contraste con la situación que se tiene para la capa K. El comportamiento representativo de las secciones totales de ionización para las capas K y L se muestra en la figura 1.7, en la que se puede apreciar un incremento al aumentar la energía del protón y una disminución al aumentar el número atómico.

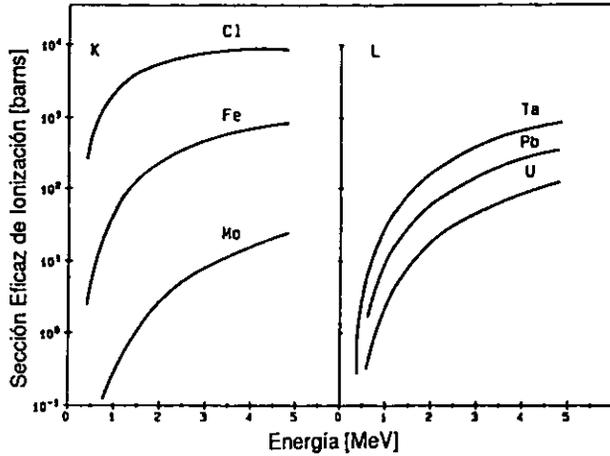


Figura 1.7.: Secciones eficaces de ionización representativas para protones.

El espectro de rayos X K, L y M de un elemento comprende las líneas de las transiciones en las capas atómicas interiores, junto con dos tipos de línea satélite. Aparecen satélites radiativos Auger para energías poco menores que las de las líneas originales; y provienen de la distribución compartida de la energía de excitación atómica entre el rayo X y un electrón expulsado simultáneamente de una capa exterior. El satélite predominante en las series de rayos X K es la línea KMM. Los datos acerca de las intensidades de ésta línea, obtenidos mediante espectroscopia de alta resolución, recopilados por Budnar et al. [11], caen por debajo de las predicciones teóricas en un tercio [12]. Esto puede deberse a que parte de la estructura Auger radiativa no puede resolverse de la superposición de la línea $K\beta$. La figura 1.8 muestra la dependencia con Z de la intensidad relativa de la porción de la estructura KMM que se identifica en experimentos de alta resolución; esto debería ser suficiente para merecer la inclusión en cualquier modelo de un espectro PIXE. La intensidad relativa de KLM con respecto a la línea $K\alpha$ es un orden de magnitud menor que la de KMM relativa a la línea $K\beta$, y la KLL es aún más pequeña. Un ejemplo interesante es la línea KMM del hierro, cuya energía coincide con la línea $K\alpha$ del cobalto; si este componente Auger radiativo no fuera incluido en la descripción del espectro de rayos X de una muestra de

fierro, un código de ajuste podría indicar equivocadamente la presencia de una impureza de cobalto.

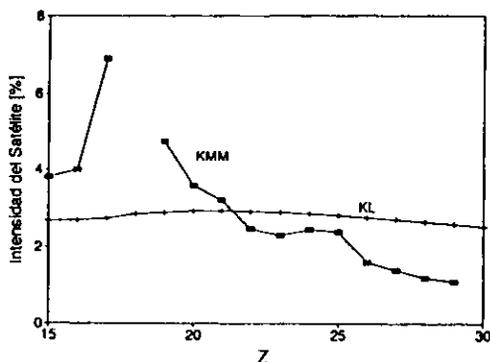


Figura 1.8.: Intensidades relativas de las líneas satélite y líneas de diagrama para las series de rayos X K.

La ionización simultánea de un electrón K y uno L resulta en la presencia de una *vacante espectadora* L durante la desexcitación de la capa K, por lo cual los rayos X K resultantes se corren hacia una energía mayor. Este no es un fenómeno frecuente pero tampoco se puede ignorar. Los corrimientos en la energía pueden obtenerse de códigos de estructura atómica y las intensidades de los satélites resultantes de cálculos basados en la aproximación semiclásica [13] de los procesos de ionización. En la región de números atómicos entre $Z = 20$ y $Z = 30$, la intensidad del satélite KI, es un pequeño porcentaje relativo a la línea característica (ver figura 1.8) y por supuesto que depende de la energía del protón; en la parte más alta de ésta región, la energía del satélite se corre por arriba de la energía de ligadura del átomo neutro, provocando que el satélite sea absorbido críticamente en una muestra gruesa que contiene una concentración significativa de tal elemento. Esta absorción altera el cociente K_{β}/K_{α} en un gran porcentaje, demostrando la importancia de incluir el satélite en cualquier modelo que pretenda describir un espectro de rayos X. Mucha menor atención han recibido los satélites análogos en los espectros de rayos X L. Estos espectros son mucho más complicados que sus contrapartes de rayos X K, debido a la existencia de tres subcapas y en consecuencia un mayor número de líneas características en cada espectro.

2.2 Fondo Continuo

El fondo continuo que se encuentra bajo los picos característicos de rayos X en un espectro PIXE es el principal factor determinante en el límite de detección de cualquier elemento; una comprensión fundamental de este fondo resulta entonces tan importante como el entender la generación de las líneas de rayos X característicos. El fondo proviene principalmente del bremsstrahlung primario de los protones, del bremsstrahlung electrónico, y de rayos γ producidos por reacciones nucleares. En contraste con el caso de las líneas de rayos X característicos, la intensidad del bremsstrahlung primario, bremsstrahlung del proyectil debido a los protones es mucho menor que el inducido por una haz de electrones. La intensidad del bremsstrahlung primario emitido por una partícula cargada es proporcional al cuadrado de su desaceleración. Las fuerzas Coulombianas son las mismas para electrones y protones, pero la masa es diferente por un factor de 1836. Como resultado, la intensidad del bremsstrahlung primario de los protones es despreciable en comparación con el de los electrones que se presenta en una microsonda de electrones. De hecho, dado que la sección teórica contiene un término

$$\left[\left(\frac{Z}{A} \right)_{\text{proyectil}} - \left(\frac{Z}{A} \right)_{\text{blanco}} \right]^2, \quad (1.1)$$

(donde Z y A representan el número atómico y la masa atómica respectivamente), se sigue que hay combinaciones de proyectil - blanco (p. ej., un haz de helio incidiendo en una muestra de algún elemento ligero) donde el bremsstrahlung primario tenga intensidad cero.

2.3 Bremsstrahlung Electrónico

La principal contribución al fondo continuo de rayos X en PIXE se debe al bremsstrahlung asociado no a la desaceleración de los protones sino a los electrones expulsados en las colisiones inelásticas. La figura 1.9 muestra de manera esquemática las tres principales contribuciones a este bremsstrahlung. El bremsstrahlung de los electrones secundarios (SEB) es emitido cuando un electrón expulsado es dispersado por el campo Coulombiano de un núcleo atómico en la muestra. Para una colisión frontal entre un ion pesado de masa M_p y energía E_0 y un electrón estacionario libre (masa m_e), la energía cinética máxima T_m que puede ser transferida al electrón es $4(m_e / M_p)E_0$. Entonces los fotones SEB que tienen

energía mayor que T_m deben provenir de electrones expulsados de órbitas interiores; ya que la población de electrones en las capas exteriores y libres excede por mucho a la de los electrones interiores, un espectro SEB cae rápidamente en intensidad por arriba de la energía T_m ; además, la distribución de momentos de los electrones ligados amplía la distribución de energías de los fotones de bremsstrahlung, lo cual provee otro factor que contribuye a la extensión a altas energías.

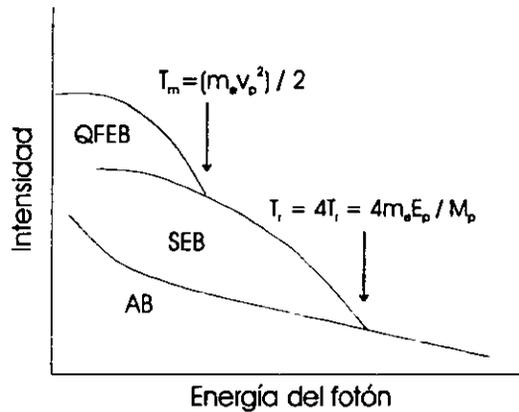


Figura 1.9.: Representación de los componentes del fondo producido por el bremsstrahlung electrónico en un espectro de PIXE.

El bremsstrahlung debido a electrones casi-libres (QFEB) se presenta cuando la velocidad del proyectil V_p es muy grande en comparación con las velocidades orbitales de los electrones de manera que esos electrones son efectivamente libres y en reposo; entonces un electrón puede ser dispersado por el campo Coulombiano del proyectil y emitir QFEB. Considerando el sistema de referencia del proyectil, podemos ver que la energía máxima transmitida es $T_m = \frac{1}{2} m_e V_p^2$, un valor que se altera muy poco al cambiar de sistema de referencia cuando se regresa al sistema laboratorio. Cuando un electrón expulsado cae de nuevo a su estado ligado inicial en el átomo ionizado, se emite bremsstrahlung atómico (AB). Si el estado final es un continuo, entonces el proceso comprende ionización y emisión de fotón y se conoce como ionización radiativa (RI). El bremsstrahlung atómico corresponde a la contribución principal del espectro continuo para energías de fotón por

arriba de T_w . En la referencia [14] se muestra una parametrización para calcular estos fondos para aplicaciones analíticas.

2.4 Fondo de Rayos γ

La otra fuente del fondo continuo inducida por el haz en el detector de rayos X es radiación γ proveniente de las reacciones nucleares. Dado que estos fotones tienen energías de algunos cientos de keV, su interacción con el detector de rayos X es a través del efecto Compton, resultando en un fondo que es esencialmente plano en la región de 1 keV a 30 keV. Johansson [15] estudió este fondo en detalle para muestras orgánicas conteniendo fundamentalmente carbono, nitrógeno y oxígeno. Él concluyó con base en mediciones de espectroscopia de rayos γ que para protones de energía igual o menor que 3 MeV, la única reacción de importancia era $^{13}\text{C}(p, \gamma)$; sin embargo a energías mayores el fondo se incrementa significativamente dado que aparecen varias reacciones inducidas por protones.

En este trabajo se utilizó un detector de Germanio para bajas energías (LeGe), este tipo de detectores representa un nuevo concepto en la geometría de detectores de germanio presentando una serie de ventajas sobre los detectores planares o coaxiales ya existentes. Los detectores LeGe son fabricados con un contacto frontal delgado. El contacto posterior es menor que el área total por lo que la capacitancia del detector es menor que la de un dispositivo planar de tamaño semejante. Dado que el ruido del preamplificador está en función de la capacitancia del detector, este tipo de detectores permiten tener espectros con menos ruido y consecuentemente mejor resolución que con cualquier otro tipo de detector para energías bajas y energías intermedias. Además casi no se tiene germanio *muerto* más allá de la región activa del detector. Otra característica importante es que la energía de los fotones puede ir desde 3 keV hasta unos cuantos cientos de keV.

3. Espectroscopia de Rayos X

3.1 Calibración del Detector de rayos X

Cada línea de rayos X da como resultado un pico en el espectro obtenido con el detector de rayos X, el centro de cada pico se encuentra en el canal i relacionado linealmente con la energía E_x a través del proceso de formación de carga en el cristal de silicio y la digitalización del pulso análogo en el ADC. Entonces para la i -ésima línea:

$$c_i = A_1 + A_2 E_x \quad (1.2)$$

El pulso tiene forma gaussiana (hasta una buena aproximación), y el ancho de cada línea o desviación típica σ queda determinado por el ruido en la combinación detector-preamplificador y por la estadística de Fano [16], la cual pretende cuantificar las desviaciones de las fluctuaciones estadísticas de la formación de cargas en el cristal de silicio con respecto a una estadística de Poisson pura. Entonces se tiene:

$$\sigma_i = \left(A_3 + A_4 E_x \right)^{0.5} \quad (1.3)$$

De manera que cuatro parámetros nos permiten tener una descripción a primer orden de la respuesta del detector. Algunos autores encuentran necesario añadir un término cuadrático o exponencial, siempre pequeño, a la calibración de la energía para tomar en cuenta pequeños efectos no lineales. El ancho total a la mitad del máximo (FWHM, por sus siglas en inglés) típico¹ de la línea de rayos X K del manganeso a 5.9 keV se encuentra entre 130 eV y 170 eV.

3.2 Forma de los Picos y Picos de Escape

Los picos de rayos X en el espectro obtenido con un Si(Li) presentan una cola en el lado correspondiente a baja energía aún después de considerar los satélites Auger radiativos. Si esta característica de los picos fuera ignorada y se utiliza una aproximación gaussiana para ajustarlos, entonces estas colas de baja energía podrían ser vistas erróneamente como líneas de rayos X de otro elemento.

Estas colas son el resultado de muchos efectos, algunos de ellos intrínsecos al detector y otros factores externos. Dado que la periferia del detector por lo general parece jugar un papel más importante que la región central en la producción de fenómenos intrínsecos, los detectores son frecuentemente colimados ya sea de manera interna por el fabricante o en el exterior por el usuario. Las colas intrínsecas se han estudiado aisladas de los satélites Auger radiativos, y pueden describirse como una combinación de las características mostradas en la figura 1.10.

¹ $FWHM = 2.35\sigma$, con σ el ancho de la distribución.

Las características plana y exponencial se originan de la colección incompleta de carga (ICC) debido a la gran concentración de defectos cerca de la superficie frontal del detector, además del escape parcial de fotoelectrones y electrones Auger de la región sensible del cristal. Modelos de estos procesos basados en Monte Carlo predicen en efecto las características de la figura 1.10. Una simulación [17] que emplea un modelo simple pero realista de la pérdida de carga de ionización cerca de la superficie del detector reproduce de manera exitosa la intensidad de la característica larga, plana. Sin embargo, esta aproximación aunque genera una característica correspondiente a un término exponencial, no permite estimar correctamente la intensidad correspondiente; esto sugiere que el modelo carece de un mecanismo secundario de pérdida de carga, el cual ocurre a través del volumen del detector, como se propone en [18].

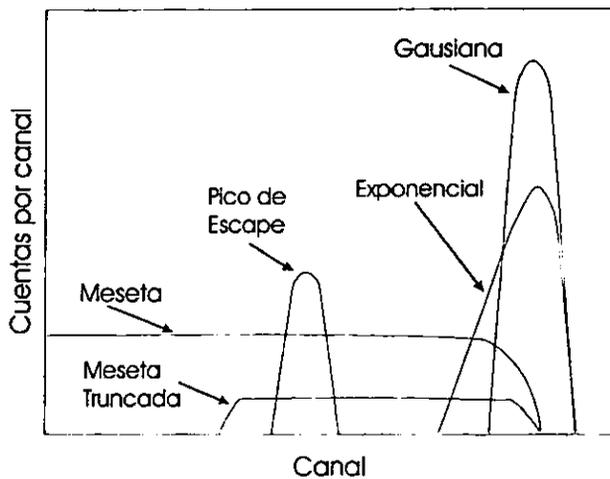


Figura 1.10: Forma de los componentes de un espectro.

La contribución a estas colas es máxima para rayos X cuyas energías se encuentran justo abajo de la energía de la K de silicio (1.74 keV), ya que esos fotones interactúan muy cerca de la superficie frontal donde la captura de cargas y la fuga de electrones es máxima. Esto disminuye rápidamente al aumentar la energía de los rayos X. La contribución a la cola debida a efectos de captura de carga varía entre detectores de una forma muy marcada, y aún para un mismo detector puede variar con el tiempo.

Un tipo diferente de cola se encuentra a 15 keV aproximadamente y se incrementa rápidamente al aumentar la energía de los rayos X. Comúnmente se puede apreciar como una meseta de extensión finita en el extremo izquierdo del pico, y se debe a la dispersión por efecto Compton dentro del detector, de rayos X originalmente emitidos por la muestra en otra dirección [19].

La tercer contribución a las colas de alta y baja energía es la distribución Lorentziana en la energía de una línea de emisión de rayos X. Este efecto es despreciado invariablemente, dado que los anchos típicos de las líneas de rayos X K son sólo de unos cuantos eV, un valor tan pequeño que el FWHM no se ve afectado. Para rayos X con energías por debajo de 10 keV, el efecto Lorentziano en las líneas de rayos X K es una contribución a las características de meseta y exponencial que pueden observarse en la situación de rayos X monocromáticos. Para la K_{α} de titanio, la cola ICC predomina, pero al incrementarse la energía de los rayos X, los efectos lorentzianos se incrementan y los efectos ICC disminuyen, de manera que para la K_{α} de cobre las dos contribuciones a la cola son casi iguales en intensidad para un detector de alta calidad. Para aquellos rayos X K de elementos en la región $30 < Z < 40$, donde los efectos ICC son muy pequeños, la característica principal de la cola corresponde a la Lorentziana.

Cada pico en un espectro Si(Li) está acompañado de otro pico desplazado a la izquierda en el espectro por un equivalente en energía de aproximadamente 1.75 keV. Este proviene del escape del rayo X K de silicio de la región sensible, emitido en un 5% de las desexcitaciones de la vacante K del silicio. El desplazamiento en la energía esperado para el pico de escape es precisamente la energía del rayo X K_{α} de silicio, que es 1.742 keV. Sin embargo, en la práctica, el desplazamiento es por muchos eV mayor que esto y debe medirse para cada detector.

3.3 Distorsión del Espectro por Apilamiento

A tasas suficientemente altas de conteo, pares de eventos de rayos X que caen dentro del tiempo de resolución del sistema electrónico, aparentan ser un sólo evento, resultando en un continuo a la derecha de los picos característicos de un elemento dado. El continuo termina con una familia de picos de apilamiento que provienen de la superposición perfecta

de pulsos. Como los detectores de rayos X requieren de tiempos largos para el procesamiento de pulsos (muchas decenas de μs), el apilamiento puede causar una distorsión significativa del espectro aún para tasas de conteo tan bajas como 1000 cuentas/s. No se puede hacer mucho con los picos de apilamiento, pero se puede utilizar un inspector electrónico de apilamiento para distinguir y rechazar muchos de los eventos continuos; el método empleado consiste en generar un pulso lógico rápido desde la señal del preamplificador e inspeccionar un período de tiempo subsecuente (igual al tiempo de procesamiento de pulsos) para la llegada de un segundo pulso de ese tipo, cuya detección resulta entonces en cancelar las señales del amplificador correspondientes a ambos pulsos lógicos. Si la corrección del tiempo muerto se ve afectada por el método de los dos escaladores, entonces el tiempo muerto de la señal del inspector de apilamiento debe tener la bandera OR cuando las otras señales se encuentren en BUSY.

3.4 Eficiencia del Detector

Es necesario conocer la eficiencia del detector, que es el resultado de la eficiencia geométrica (i.e. la fracción de ángulo sólido) y la eficiencia intrínseca del cristal (i.e. la razón entre la intensidad del pico de energía completa a aquella de los fotones que inciden sobre el cristal). En la figura 1.11 se definen las cantidades geométricas, y t_i denota los espesores de las capas atenuadoras como la ventana de berilio, una posible capa de hielo, el electrodo de oro o níquel, y una capa superficial de ICC. La pérdida de eventos por escape de rayos X K de silicio se discutió con anterioridad y se refleja en el término f_E , calculable a partir del modelo propuesto en [20]. El ángulo sólido es en realidad dependiente de la energía de los rayos X, ya que al aumentar la energía la profundidad media de interacción \bar{z} se mueve cada vez más hacia adentro del cristal, incrementando la distancia efectiva entre la muestra y el detector. Por esta razón se restringe el término de *ángulo sólido* a aquel subtendido por la superficie frontal del detector, y la dependencia en la energía queda comprendida dentro de la eficiencia intrínseca del detector, que está dada por:

$$\varepsilon_i = \frac{\left(\exp \left[- \sum_1^4 \mu_i t_i \right] \right) f_E \left[1 - \exp(-\mu_n D) \right]}{(1 + \bar{z}/d)^2} \quad (1.4)$$

$$\text{donde } z = \frac{1 - [\exp(-\mu_n D)(1 + \mu_n D)]}{\mu_n [1 - \exp(-\mu_n D)]}$$

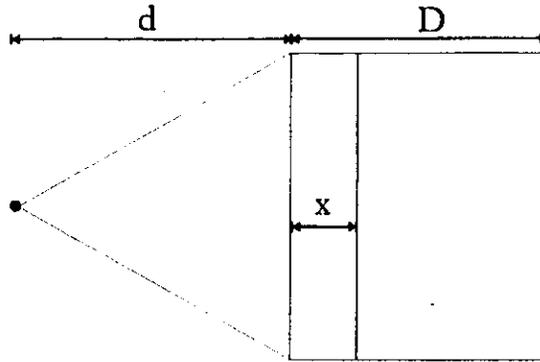


Figura 1.11.: Geometría típica de un detector de rayos X..

La capa de hielo varía con el tiempo. Esto puede demostrarse monitoreando la tasa de rayos X L y rayos X K de cobre, y como influencia fuertemente la eficiencia intrínseca para rayos X de baja energía, es deseable tener un calentador para derretir dicha capa incorporado en el detector. El espesor de la ventana de berilio está dado por el fabricante. El espesor del contacto metálico, aunque algunas veces dado, se puede determinar fácilmente por fluorescencia. En [21] se describe la caracterización de un detector de Si(Li) empleado para análisis con PIXE.

4. Análisis Cuantitativo

4.1 Relación entre Intensidades de Rayos X y Concentraciones

Dado que la pérdida de energía de un protón en cada encuentro inelástico en una muestra de espesor finito es muy pequeña, su camino es, hasta una muy buena aproximación, una línea recta. El perfil de energía a lo largo de este camino (tomado como la dirección x) se conoce a través del poder de frenado de la matriz M :

$$S_M(E) = \rho^{-1} \frac{dE}{dx} \quad (1.5)$$

que es la suma de concentraciones pesada de los poderes de frenado individuales $J_Z(E)$ de la matriz de elementos que comprenden a la muestra, cuya densidad es ρ . Se van a considerar primero los rayos X K, dado que este es el caso más simple. Para un constituyente distribuido homogéneamente que tiene número atómico Z , masa atómica A_Z y concentración C_Z , el número de vacantes en la capa K dN_K producidas a lo largo de un segmento dx del camino está dado por:

$$dN_K = \frac{N_p N_{av} C_Z \sigma_Z(E) dE}{A_Z S_M(E)} \quad (1.6)$$

donde N_p es el número de protones, N_{av} el número de Avogadro, y $\sigma_Z(E)$ la sección de ionización de la capa K para un protón de energía E correspondiente a una profundidad x . Entonces el número de rayos X K en una línea espectral particular se obtiene a través de la producción de fluorescencia ω_{KZ} y la fracción de la intensidad de la línea f_{KZ} .

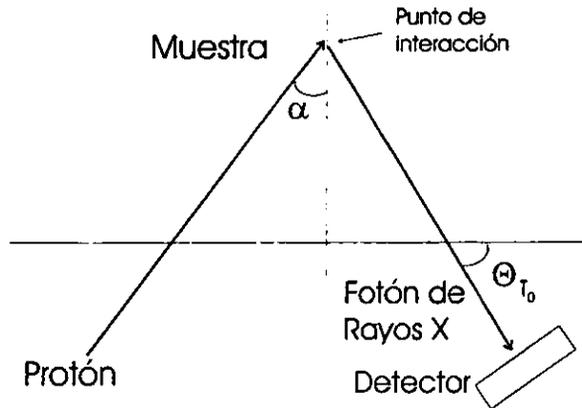


Figura 1.12.: Geometría generalizada para el análisis con PIXE de una muestra de espesor finito.

Si se definen los ángulos generalizados α y Θ_{T_0} para el impacto de protones y la emisión de rayos X, como en la figura 1.12 se obtiene que, en el camino hacia el detector, la intensidad del fotón de rayos X del segmento de camino indicado sufre un factor de transmisión:

$$T_z(E) = \exp \left\{ - \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_{z,M} \frac{\cos \alpha}{\sin \Theta_{T_0}} \int_{E_0}^E \frac{dE}{S_M(E)} \right\} \quad (1.7)$$

en el que el coeficiente másico de atenuación de la matriz $(\mu/\rho)_{z,M}$ es la suma pesada de las concentraciones de los coeficientes másicos de atenuación $(\mu/\rho)_z$ de los elementos que conforman la matriz.

Al integrar sobre todos los segmentos de la trayectoria del protón da como resultado la intensidad total de cada rayo X K característico resultando del paso de N_p protones a través de la muestra como:

$$Y(Z) = \frac{N_{av} \omega_{K,Z} b_{K,Z} t_{K,Z} \varepsilon_z' (\Omega/4\pi)}{A_z} N_p C_z \int_{E_0}^{E_f} \frac{\sigma_z(E) T_z(E)}{S_M(E)} dE \quad (1.8)$$

donde E_0 y E_f son las energías de entrada y salida del protón, $\Omega/4\pi$ es la fracción de ángulo sólido subtendido por el detector, ε_z' la eficiencia intrínseca del detector, y $t_{K,Z}$ la transmisión a través de cualquier absorbedor que se encuentre entre la muestra y el detector.

El caso de rayos X L es más complejo debido a la existencia de tres subcapas L (L_1 , L_2 , L_3) y por la necesidad de incluir, además de los tres coeficientes de fluorescencia $\omega_{L_i,Z}$ las otras tres probabilidades de los procesos Coster-Kronig f_{i_2} , f_{i_1} y f_{2_1} . Los últimos resultan en cambios no radiativos de vacantes desde la subcapa donde fueron creadas hasta una subcapa superior antes de la emisión de un rayo X L, y entonces el rayo X es característico de la subcapa superior en vez de la capa ionizada. Además hay una pequeña probabilidad f_{i_1}' de transferencia radiativa de una vacante desde la subcapa L_1 a la subcapa L_3 . Para simplificar las ecuaciones se define la sección efectiva de ionización que incluye las transferencias a la subcapa que eventualmente genera la emisión de rayos X L:

$$\sigma_{L_1,Z}^{eff} = \sigma_{L_1,Z} \quad (1.9)$$

$$\sigma_{L_2,Z}^{eff} = \sigma_{L_2,Z} + f_{12} \sigma_{L_1,Z} \quad (1.10)$$

$$\sigma_{L_3,Z}^{eff} = \sigma_{L_3,Z} + f_{23} \sigma_{L_2,Z} + (f_{13} + f_{12} f_{23} + f_{13}') \sigma_{L_1,Z} \quad (1.11)$$

Y para las tres subcapas L_n ($n = 1,2,3$) se tiene la cantidad:

$$R_n = \frac{N_{av} \omega_{L_n, Z} b_{L_n, Z} t_{L_n, Z} \epsilon'_{L_n, Z} (\frac{\rho}{4\pi})}{A_Z} \quad (1.12)$$

Entonces para cada una de las tres series de rayos X L (L_n), las intensidades de los rayos X característicos está dada por:

$$Y(Z) = R_n N_p C_Z \int_{E_0}^{E_i} \frac{\sigma_{L_n, Z}^{eff}(E) T_Z(E)}{S_M(E)} dE \quad (1.13)$$

Análogamente se tienen cinco ecuaciones, aún más complejas, para describir las series de rayos X M.

A pesar de la complejidad superficial de las cuatro ecuaciones que gobiernan las intensidades de los rayos X inducidos por protones para la capa K y las tres subcapas L, pueden ser en realidad calculadas directamente. Esto se realiza con integración numérica empleando una base de datos bien establecida que se revisa en [3]. Una receta semiempírica para el número de pasos de integración necesarios se ha desarrollado [8,22]. Consideremos la subcapa generalizada descrita por:

$$Y(Z) = \frac{N_{av} \omega_Z b_Z t_Z \epsilon'_Z (\frac{\rho}{4\pi})}{A_Z} N_p C_Z \int_{E_0}^{E_i} \frac{\sigma_{L_n, Z}(E) T_Z(E)}{S_M(E)} dE \quad (1.14)$$

en la que la sección es implícitamente la sección efectiva incluyendo las transferencias Coster-Kronig (en caso de existir).

Las fluctuaciones en la energía (*energy straggling*, i.e. la distribución de las energías del protón alrededor del valor medio E a una profundidad x) cambian las predicciones de la ecuación anterior en menos del 0.1 % y pueden por lo tanto ser ignoradas.

La absorción de los rayos X inducidos por protones dentro de la muestra da lugar a fluorescencia secundaria que incrementa los rayos X característicos de elementos particulares, éste es un efecto que no se puede despreciar. Su contribución puede calcularse utilizando las cantidades antes introducidas, junto con la sección fotoeléctrica para las diferentes subcapas.

4.2 Análisis de Muestras Delgadas: Curvas de Sensibilidad para Blanco Delgado

Quando una muestra es tan delgada que la pérdida de energía del protón y la atenuación de rayos X son despreciables, la ecuación (1.14) puede simplificarse. El término de transmisión $T_z(E)$ se vuelve unitario; ya que esencialmente la energía del protón prácticamente no cambia dentro de la muestra, $\sigma_z(E)$ se vuelve $\sigma_z(E_0)$; reemplazando $dE/S_M(E)$ por $\rho^1 dx$, la integral se reduce a $t/\cos \alpha$, donde t es el espesor de la muestra. Entonces el perfil de rayos X se convierte en:

$$Y(Z) = \frac{N_p N_{av} \sigma_z(E_0) \omega_z b_z t_z \varepsilon'_z \left(\frac{\Omega}{4\pi}\right) C_z \rho t}{A_z \cos \alpha} \quad (1.15)$$

Es costumbre trabajar en términos de la densidad de área $m_a(Z)$ de los elementos en muestras delgadas, entonces:

$$Y(Z) = \frac{N_p m_a(Z) N_{av} \sigma_z(E_0) \omega_z b_z t_z \varepsilon'_z \left(\frac{\Omega}{4\pi}\right)}{A_z \cos \alpha} \quad (1.16)$$

Se puede reescribir la ecuación anterior como:

$$Y(Z) = s(Z) N_p m_a(Z) \quad (1.17)$$

en donde

$$s(Z) = \frac{\sigma_z(E_0) N_{av} \omega_z b_z t_z \varepsilon'_z \left(\frac{\Omega}{4\pi}\right)}{A_z \cos \alpha} \quad (1.18)$$

es el factor de sensibilidad (perfil de rayos X por unidad de densidad de área) que puede medirse fácilmente empleando patrones delgados.

Para trabajar con una medida absoluta de la carga se acostumbra emplear la relación:

$$Y_R(Z) = \frac{\Omega_R N_p m_a(Z) N_{av} \sigma_R}{A_z \cos \alpha} \quad (1.19)$$

mediante la cual se puede calcular la carga acumulada en la muestra a través de un espectro de RBS.

5. Efectos Atómicos y Moleculares en Colisiones con Iones Pesados

Los espectros de rayos X producidos en colisiones entre iones pesados y átomos son diferentes de aquellos inducidos por proyectiles ligeros (electrones o protones) en las siguientes propiedades: en primer lugar las líneas de rayos X característicos son más anchas y sufren corrimientos hacia energías mayores. También pueden aparecer una o dos líneas nuevas bajo ciertas condiciones por encima de la energía límite de la serie K, $E_{K\alpha}$, que no pueden atribuirse a ninguna línea característica de algún elemento conocido. Además, todos los espectros y en particular aquéllos que son producidos por colisiones simétricas ($Z_1 = Z_2$) exhiben un continuo, adyacente a las líneas características del proyectil y blanco, cuya magnitud y forma es diferente de aquél producido por los diferentes procesos de Bremsstrahlung.

El ensanchamiento y corrimiento de las líneas características está bien entendido ya que simplemente refleja el hecho de que en colisiones de iones pesados no se produce una sola sino que se tienen vacantes múltiples en las capas internas. Esto puede demostrarse fácilmente si se miden las líneas K_α y K_β con una resolución en energía suficientemente buena.

El promedio de electrones removidos del proyectil y del blanco durante tal encuentro puede estimarse mediante el criterio modificado de Bohr [23]. Este implica que un electrón será removido de un ion si su velocidad orbital v_e^n asociada con el potencial de ionización para cada electrón removido es menor o igual a la velocidad del ion v_i . Empleando los potenciales de ionización para iones con carga múltiple calculados por Carlson *et. al.* [24] y Stelson [25] se han hecho cálculos y se ha encontrado que son necesarias energías sorprendentemente grandes para remover todos los electrones de un ion. Con energías del orden de unos cuantos MeV/amu o menos, con las cuales se cuenta ahora, es obvio que el criterio de Bohr sólo se cumple para las capas exteriores de los átomos pesados. Para las capas internas la velocidad del proyectil será siempre mucho menor que la velocidad electrónica. Esto quiere decir que la aproximación de alta energía no puede usarse para calcular la probabilidad de ionización de capas internas. Una aproximación cuasi adiabática es más adecuada.

5.1 Efectos Atómicos

5.1.1 Captura Radiativa de Electrones por Iones Altamente Ionizados (REC)

El proceso REC que es responsable de la línea visible justo después de E_{rek} se conoce desde hace mucho tiempo, principalmente en astrofísica. El mecanismo de este proceso puede entenderse de la siguiente forma: Si un ion altamente ionizado pasa a través de un blanco es posible que electrones del material envolvente sean capturados en una capa interna del proyectil. Esta captura va acompañada por la emisión de un fotón. Para calcular la energía de este fotón supongamos que el electrón se encuentra ligado sólo débilmente en el estado inicial y tiene una distribución de momento bien definida \vec{k}_i determinada por un potencial U_i . Este electrón se mueve con un momento \vec{p}_e hacia el proyectil que se supone en reposo (figura 1.13). Si la energía de amarre del electrón en el estado final es E_f , entonces se tiene la relación:

$$\frac{(\vec{p}_e + \vec{k}_i)^2}{2m_e} + U_i = E_f + E_x \quad (1.20)$$

o bien:

$$E_x = [E_f - E_i] + \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{\vec{p}_e \cdot \vec{k}_i}{m_e} \quad (1.21)$$

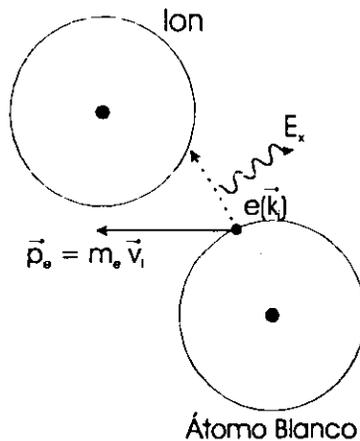


Figura 1.13.: Esquema del proceso de ionización.

El primer término del lado derecho no es más que el valor Q de la reacción. Si el electrón es capturado en una vacante de la capa K y E_i es suficientemente pequeño, entonces $(E_f - E_i) \sim E_{kb}$. Debido al movimiento del proyectil, el electrón adquiere un incremento adicional en su energía determinado por el segundo término. El último término no contribuye a la energía promedio pero determina la forma de la línea. La REC entonces aparecerá adyacente al límite de la serie K y puede identificarse fácilmente al variar la energía del proyectil.

5.1.2 Transiciones de 2 Electrones - 1 Fotón

En colisiones con iones pesados no sólo se producen vacantes múltiples en la capa L , sino que además se tiene una cierta probabilidad de doble ionización en la capa K . Normalmente esas vacantes serán ocupadas por dos transiciones electrónicas independientes acompañadas por la emisión de dos fotones y/o dos electrones Auger. Si la transición ocurre entre las capas L, K entonces la energía liberada en la primer transición será poco más grande que la de la segunda transición K_α . Teóricamente el corrimiento es del orden de 200 eV aunque debería aparecer una línea adicional entre las líneas K_α y K_β en el espectro de rayos X si se producen vacantes dobles en cantidades medibles. La existencia de esta línea llamada hipersatélite K_α^h ha sido reportada por algunos grupos [26, 27, 28]. El efecto es muy pequeño, cerca de 100 veces menor que la tasa de transición normal de la K_α y sólo puede ser medido con un espectrómetro de cristal debido a que se requiere de una resolución muy grande.

La característica más importante del decaimiento radiativo es el hecho de que esta transición correlacionada de dos electrones va acompañada por la emisión de un sólo fotón que tiene una energía de aproximadamente el doble de la energía de transición K_α . El efecto es mucho más pequeño que la transición K_α normal y sólo puede observarse al atenuar la línea K_α . Se ha encontrado que para aluminio, calcio, fierro y níquel, las líneas siempre se corren hacia energías mayores en 100 - 160 eV con respecto al doble de la energía de la K_α . Este corrimiento proviene del apantallamiento reducido en la capa K doblemente ionizada.

5.2 Efectos Moleculares

La aparición de rayos X no característicos fue observada por primera vez en colisiones Ar-Ar de baja energía por Saris en 1972 [29]. Desde entonces se han investigado otros muchos sistemas. Dependiendo de la energía del proyectil y número atómico de éste y del átomo blanco el mismo tipo de radiación cercana a alguna de las líneas características K, L, M se encuentra en todos los casos. Un estudio más cuidadoso de la forma e intensidad de esos espectros revelan que este efecto no puede explicarse en términos de algún proceso conocido de Bremsstrahlung. De manera que se ha propuesto que las transiciones radiativas entre capas internas de estados moleculares formados durante un tiempo corto al desarrollarse la colisión son responsables de los espectros observados.

En teoría este problema molecular aún no se resuelve satisfactoriamente, pero se tienen ciertas condiciones que deben cumplirse para que dichas transiciones puedan ocurrir [30]:

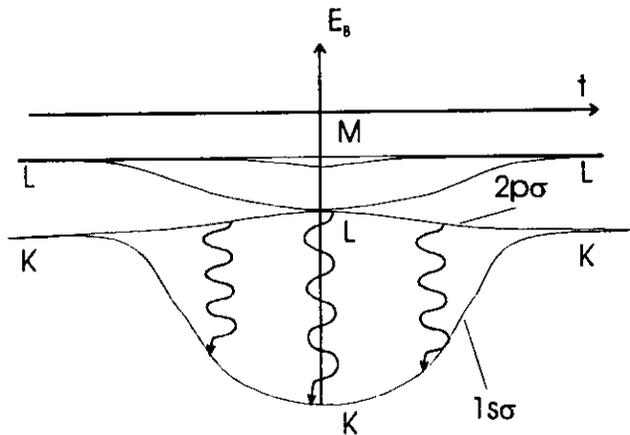


Figura 1.14.: Niveles de energía de la molécula formada por la colisión ion - átomo.

1. Los dos núcleos con cargas Z_1 y Z_2 deben aproximarse mucho durante la colisión, de manera que el campo Coulombiano en la posición de los electrones en las capas internas es aproximadamente el mismo que en el sistema unido con carga $Z = Z_1 + Z_2$. Esta condición casi se cumple si el parámetro de impacto b es menor o igual que el radio hidrogenoide efectivo $a_n = \frac{a_0 n^2}{Z}$ (con $a_0 = 0.53 \times 10^{-8}$ cm, y n el número cuántico

principal) de una capa dada en el sistema unido. Si se restringe esta condición a sistemas simétricos ($Z_1 = Z_2$), se puede obtener una cota inferior para la velocidad del proyectil, v

$$\frac{v}{c} > 2 \times 10^{-4} \frac{Z}{n} \quad (1.22)$$

2. Por otra parte la colisión no puede ser muy rápida. Resulta razonable suponer que el

tiempo de colisión $\tau_c \sim \frac{2a_n}{v}$ debe ser por lo menos igual al período clásico de

revolución $\tau_n = \frac{2\pi a_n}{v}$ de los electrones en la capa correspondiente. Dado que la

velocidad de revolución para la capa n va como $v_n \sim \frac{cZ}{n}$, entonces se obtiene que:

$$\frac{v}{c} < 1.2 \times 10^{-3} \frac{Z}{n} \quad (1.23)$$

Es interesante notar que el cociente de las velocidades mínima y máxima es:

$$\frac{v_{min}}{v_{max}} \sim 0.17, \quad (1.24)$$

que resulta ser independiente del número cuántico de la capa. Para todas las capas atómicas existe un intervalo de velocidades, para el cual la representación molecular es adecuada.

3. Las transiciones de rayos X entre estados moleculares de vida corta son observables sólo si la vida media de la transición espontánea no es más larga que el tiempo de colisión. Ya que

$$\tau_c \leq 0.8 \times 10^{-15} \frac{n^3}{Z^2} \quad (1.25)$$

y

$$\tau_{E1} = 4 \times 10^{-10} \frac{n^2}{Z^4} \quad (1.26)$$

entonces:

$$\frac{\tau_{\epsilon}}{\tau_{E1}} \leq 2 \times 10^{-6} nZ^2. \quad (1.27)$$

Aunque esta razón es pequeña aún para los sistemas más pesados, el efecto puede medirse. Mientras que las dos primeras condiciones se cumplen en una colisión de iones pesados se cree que los electrones de las capas internas seguirán el movimiento nuclear de manera cuasi adiabática en niveles moleculares, como se ilustra en la figura 1.14.

Durante la colisión ocurrirán transiciones de rayos X para cualquier distancia internuclear, siempre que haya vacantes en los niveles más bajos. Es evidente que la energía del fotón de rayos X será más grande si la transición ocurre justo a la distancia de máximo acercamiento. Originalmente, entonces, se esperaba un continuo con un punto final para la energía de transición en el átomo unido E_U .

Sin embargo este punto final no se ha observado en los experimentos, ni para transiciones moleculares en la región K, ni para las regiones M o L. En todos los casos investigados se observa que en los espectros la intensidad de los rayos X emitidos por transiciones entre orbitales moleculares (MO) decrece casi exponencialmente alrededor de E_U^* hasta que es superado por el fondo. Kleber *et. al* [31] proponen que este comportamiento se puede explicar si el cambio dinámico de las energías moleculares durante la colisión se toma en cuenta apropiadamente. Esto significa que es prácticamente imposible obtener información espectroscópica con suficiente precisión a partir de un sólo espectro de una manera simple.

CÁLCULO DE SECCIONES DE PRODUCCIÓN DE RAYOS X

Llamamos *sección eficaz de producción de rayos X* a la probabilidad de producir fotones de una línea particular (K, L, M), ésta es una magnitud física que depende de factores como: el proyectil, la energía de incidencia y el átomo que se bombardea. Para las líneas K se relaciona con la *sección eficaz de ionización* (que corresponde a la probabilidad de ionizar el átomo) mediante la siguiente ecuación:

$$\sigma_{X,i} = \sigma_{i,K} \omega_K f_i \quad (2.1)$$

donde $\sigma_{X,i}$ es la sección eficaz de producción de rayos X, $\sigma_{i,K}$ es la sección eficaz de ionización, ω_K es la fluorescencia y f_i es la intensidad relativa de todas las posibles transiciones que producen radiación en la línea i (para el caso de la capa K: $i = \alpha, \beta$). La fluorescencia es el cociente del número total de fotones X emitidos entre el número total de vacantes en la capa K.

Se han desarrollado varios modelos teóricos para calcular la sección eficaz de ionización. Entre los cuales tenemos:

1. Aproximación de onda plana de Born (PWBA)
2. Aproximación semiclásica (SCA)
3. Aproximación ECPSSR

1. Aproximación de Born de Onda Plana (PWBA)

La descripción de este modelo se hace a partir de la teoría de perturbaciones. Se considera un sistema cuántico bajo la interacción con un potencial V ; el hamiltoniano H del sistema está dado por:

$$H = H_0 + V \quad (2.2)$$

donde H_0 es el hamiltoniano del sistema no perturbado. Entonces, considerando el desarrollo para la teoría de perturbaciones a primer orden con dependencia temporal, se puede expresar la probabilidad por unidad de tiempo para que el sistema efectúe una transición del estado inicial ν_0 a algún estado en el continuo entre ν y $\nu + d\nu$ como:

$$dP_{\nu_0, \nu} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\nu_0, \nu}|^2 \delta(E_\nu - E_{\nu_0}) d\nu \quad (2.3)$$

con $V_{\nu_0, \nu} = \langle \nu | V | \nu_0 \rangle$ y E_i corresponde a la energía del i -ésimo estado del sistema.

La aproximación anterior puede aplicarse al estudio de la colisión entre una partícula que incide con un momento inicial \vec{p}_0 y un átomo, la cual es dispersada con un momento final \vec{p} . Por simplicidad se elige el sistema de referencia de centro de masa. Cuando la colisión es inelástica se da un cambio en las energías del proyectil y del átomo, de manera que las energías inicial y final del sistema serán $E_{\nu_0} = \frac{p_0^2}{2m} + E_0$ y $E_\nu = \frac{p^2}{2m} + E_n$, donde E_0 y E_n corresponden a la energía electrónica inicial y final del átomo respectivamente y m es la masa reducida del sistema, $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$. Entonces ahora se puede expresar la ecuación (2.3) en la forma:

$$dP_{\vec{p}, E_n, \vec{p}_0, E_0} = \frac{4\pi m}{\hbar} |V_{\vec{p}, E_n, \vec{p}_0, E_0}|^2 \delta(p^2 - p_0^2 + 2m(E_n - E_0)) dp_x dp_y dp_z \quad (2.4)$$

donde sucede que:

$$V_{\vec{p}, E_n, \vec{p}_0, E_0} = \iint \varphi_{\vec{p}}^*(\vec{R}) \Psi_n^*(\vec{r}) V_{\varphi, \vec{p}_0}(\vec{R}) \Psi_0(\vec{r}) \varphi_{\vec{p}_0}(\vec{R}) d^3r d^3R \quad (2.5)$$

φ corresponde a la función de onda del proyectil y Ψ corresponde a la función de onda electrónica del átomo, \vec{R} es la posición del ion y \vec{r} la posición del electrón.

Para determinar la sección eficaz de dispersión, $d\sigma_n$, del proyectil cuando el átomo pasa al estado n , es conveniente expresar las diferenciales de momento en coordenadas esféricas, $dp_x dp_y dp_z = p^2 \sin\theta dp d\theta d\phi = p^2 dp d\Omega$, e integrar con respecto a la magnitud del momento. En este caso θ es el ángulo de dispersión del proyectil. La función de estado de la partícula incidente antes de la colisión puede suponerse en la forma de una onda plana. Después de

la colisión, la función de estado del proyectil dispersado corresponde a una onda esférica, que puede aproximarse como una onda plana cuando es vista desde una distancia grande al centro dispersor. Por conveniencia se denotan las funciones de los estados inicial y final de la partícula incidente como:

$$\varphi_{\vec{p}_0} = \sqrt{\frac{m}{p_0}} e^{i\vec{p}_0 \cdot \vec{R} / \hbar}, \quad \varphi_{\vec{p}} = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\vec{p} \cdot \vec{R} / \hbar} \quad (2.6)$$

donde la función inicial se encuentra normalizada, de tal manera que la densidad de flujo incidente \vec{j} es igual a la unidad y la final utilizando la normalización de Dirac. Entonces tenemos que $dP_{\vec{p}, E_n, \vec{p}_0, E_0} = d\sigma_n$, con lo cual la sección eficaz de dispersión queda así:

$$d\sigma_n = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^2} \frac{p}{p_0} \left| \iint e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} V \Psi_n^* \Psi_0 d^3r d^3R \right|^2 d\Omega, \quad (2.7)$$

con $p^2 = p_0^2 - 2mE_n + 2mE_0$ y $\vec{q} = \frac{1}{\hbar}(\vec{p} - \vec{p}_0)$. Aquí, \vec{q} es el momento transferido.

Si el proyectil es un ion con carga $Z_1 e$ y suponiendo que la interacción coulombiana domina durante el proceso de colisión, el potencial V que describe esta colisión es:

$$V(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} - \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{Z_1 e^2}{|\vec{R} - \vec{r}_j|}. \quad (2.8)$$

Sustituyendo este potencial en la ecuación (2.7), el término que contiene la interacción entre núcleos y el proyectil no interviene porque se anula al integrar con respecto a r , debido a la ortogonalidad de las funciones de onda de los electrones del átomo. Por lo tanto:

$$d\sigma_n = \frac{Z_1^2 m^2 e^4}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{p}{p_0} \left| \sum_{j=1}^{Z_2} \iint e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_j} \Psi_n^*(r) \Psi_0(r) d^3r \right|^2 d\Omega \quad (2.9)$$

Al estudiar la ionización es más conveniente trabajar con la magnitud de momento transferido en la colisión, en lugar de la dirección de dispersión del proyectil. Tomando en cuenta que la magnitud de \vec{q} se puede asociar con el ángulo θ como:

$\hbar^2 q dq = pp_0 \sin \theta d\theta$ y $v_i = p_0/m$, entonces al integrar con respecto a $d\phi$ se obtiene la probabilidad de que la partícula incidente en la colisión con un átomo sufra un cambio en el momento entre q y $q + dq$ y que el átomo pase del estado E_0 al E_n dada por:

$$d\sigma_n = 8\pi \left(\frac{Z_1 e^2}{\hbar v_i} \right)^2 \frac{dq}{q^3} |F_{n0}(q)|^2, \quad (2.10)$$

donde

$$F_{n0}(q) = \sum_{j=1}^{Z_1} \int e^{-iq \cdot r_j} \Psi_n^* \Psi_0 d^3r \quad (2.11)$$

corresponde al factor de forma atómico inelástico para el potencial electrostático dado por la ecuación (2.8).

Para calcular el factor de forma se pueden utilizar funciones de estado de los electrones del átomo en la aproximación de partícula independiente y potencial central, de tal manera que:

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{Z_1!}} \mathcal{A}(1, 2, \dots, Z_1) \psi_1(r_1) \psi_2(r_2) \cdots \psi_{Z_1}(r_{Z_1}), \quad (2.12)$$

en esta expresión \mathcal{A} es el operador que antisimetriza a las funciones de onda y las ψ_i son las funciones de estado individuales para cada uno de los electrones. Si suponemos que durante la colisión sólo cambia el estado ψ_i de uno de los electrones de la subcapa i , mientras que el resto permanece sin perturbarse, entonces se puede reducir el factor de forma a:

$$F_n(q) = \int \psi_n^*(\vec{r}) e^{iq \cdot \vec{r}} \psi_i(\vec{r}) d^3r, \quad (2.13)$$

en donde ahora la \vec{r} corresponde a las coordenadas del electrón expulsado.

Regresando al cálculo de la sección eficaz de ionización de un átomo por la colisión con un ion, es conveniente definir una sección eficaz de transferencia de energía para el electrón de la subcapa i , entre ε y $\varepsilon + d\varepsilon$, como:

$$d\sigma_{\alpha} = 8\pi(2j_2 + 1) \left(\frac{Z_1 e^2}{\hbar v_1} \right)^2 \frac{dq}{q^3} |F_{\alpha}(q)|^2 d\varepsilon, \quad (2.14)$$

donde j_2 es el momento angular total de la subcapa s . El factor $2j_2 + 1$ se agrega para tomar en cuenta la degeneración debida a todos los electrones que se encuentran en la subcapa s .

La energía del electrón expulsado es entonces $\frac{p^2}{2m_s} + \hbar\omega_{2s}$, donde p , es el momento final del electrón.

Para hacer más general el cálculo de las secciones de ionización, se definen las cantidades adimensionales W , k y Q de la siguiente manera:

$$\varepsilon = Z_{2s}^2 R_{\infty} W, \quad Q = a_{2s}^2 q^2 \quad \text{y} \quad k = \frac{a_{2s} p}{\hbar}. \quad (2.15)$$

Con $a_{2s} = \frac{n^2 \hbar \omega_{2s}}{Z_{2s} R_{\infty}}$, el radio hidrogenoide efectivo y Z_{2s} , el número atómico efectivo que para el caso de la capa K está dado por $Z_{2K} = Z_2 - 0.3$, R_{∞} es la constante de Rydberg.

Entonces, la sección se transforma a estas nuevas variables y se tiene que $|F_{\alpha}(q)|^2 d\varepsilon = |F_{W_s}(Q)|^2 dW$. Para obtener la sección total de la subcapa s se integra sobre todos los posibles momentos y energías transferidas por el proyectil en la colisión. De esta manera, se puede expresar la sección de ionización como:

$$\sigma_s = (2j_2 + 1) \frac{4\pi Z_1^2 a_{2s}^2}{Z_{2s}^2 \eta_1} f_s, \quad (2.16)$$

con $f_s = \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} dW \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} \frac{dQ}{Q^2} |F_{W_s}(Q)|^2$. Los límites de integración para Q se obtienen a partir de:

$$\hbar q_{\min} = \sqrt{2mE_1} - \sqrt{2m(E_1 - \varepsilon)} \quad (2.17)$$

$$\hbar q_{\max} = \sqrt{2mE_1} + \sqrt{2m(E_1 - \varepsilon)} \quad (2.18)$$

los límites para \mathcal{W} se obtienen a partir de $\varepsilon_{min} = \hbar\omega_{2s}$ y $\varepsilon_{max} = E_1$ si se considera el caso en que el proyectil cede toda su energía al electrón. De esta manera los valores máximo y mínimo para Q y \mathcal{W} son:

$$Q_{min} = \frac{m^2}{m_e} \eta_s \left[1 - \left(1 - \frac{Wm_e}{m\eta_s} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^2; \quad (2.19)$$

$$Q_{max} = \frac{m^2}{m_e} \eta_s \left[1 + \left(1 - \frac{Wm_e}{m\eta_s} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^2; \quad (2.20)$$

$$W_{min} = \frac{\hbar\omega_{2s}}{Z_{2s}^2 R_\infty} = \frac{\theta_s}{n^2}; \quad (2.21)$$

$$W_{max} = \frac{\varepsilon_{max}}{Z_{2s}^2 R_\infty} = \frac{m}{m_e} \eta_s. \quad (2.22)$$

Para fines prácticos generalmente se considera que $\mathcal{W}_{max} = \infty$.

De esta manera se tiene que la función f_s depende de las variables θ_s y η_s , de tal manera que la sección de ionización puede expresarse como:

$$\sigma_s = \sigma_{0s} \frac{f_s(\eta_s, \theta_s)}{\eta_s} = \sigma_{0s} F(\xi_s, \theta_s) \quad (2.23)$$

$$\text{donde definimos } \sigma_{0s} = 4\pi(2j_2 + 1) \frac{Z_1^2 a_{2s}^2}{Z_{2s}^2}.$$

El factor de forma $F_{\psi_s}(Q)$, puede calcularse de manera analítica empleando para ello funciones de onda hidrogenoides para el electrón inicialmente en una capa interna del átomo y para el electrón expulsado utilizando la función de onda de una partícula libre bajo la acción de un potencial coulombiano, dada por [32, 33]:

$$\psi^- = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Gamma\left(1 + \frac{i}{k}\right) e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} F_1\left(\frac{-i}{k}, 1, -i(k\mathbf{r} + \mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}')\right), \quad (2.24)$$

donde ${}_1F_1$ es la función hipergeométrica confluyente y Γ es la función gamma generalizada. Entonces, se puede calcular el factor de forma para la capa K y se tiene que:

$$|F_{Wk}(Q)|^2 = \frac{2^7}{1-e^{-2Q}} Q \left(\frac{Q + \frac{1}{3}k^2 + \frac{1}{3}}{[(Q - k^2 + 1)^2 + 4k^2]^3} \right) \exp \left\{ -\frac{2}{k} \arctan \left(\frac{2k}{Q - k^2 + 1} \right) \right\}, \quad (2.25)$$

con $W = k^2 + 1$.

La PWBA resulta adecuada para describir la ionización a grandes energías, pero sus predicciones son mayores que las secciones medidas a bajas energías [1]. Una de las causas por la cual se da esta desviación con respecto de los resultados experimentales es que en este modelo no se toma en cuenta la desviación del proyectil debido a la interacción con el núcleo del átomo. Esto se puede ver a partir de la obtención de la ecuación (2.9) donde se elimina la dependencia en el potencial debida al núcleo. A grandes velocidades del proyectil, su trayectoria al chocar con un átomo es prácticamente una línea recta y entonces la PWBA describe bien el proceso. Para velocidades bajas se observa una desviación coulombiana del proyectil, que a su vez provoca una disminución en su velocidad cuando pasa cerca del núcleo. Otro factor importante es el hecho de que se supone que el ion es una partícula puntual, lo cual no es cierto, sobre todo a bajas energías. De modo que la PWBA es válida cuando $Z_1 \ll Z_2$ y $\frac{v_1}{v_0} \gg 1$, es decir, a altas energías.

2. Aproximación Semiclásica (SCA)

Propuesto por Bang y Hansteen [34] este modelo pretende explicar la ionización de las capas internas tomando en cuenta la desviación coulombiana del proyectil por el núcleo. Para esto se plantea la solución del problema en términos del parámetro de impacto y la interacción del proyectil con los electrones por medio de teoría de perturbaciones.

De la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo [32], se tiene que la probabilidad de que un ion que se mueve en la trayectoria $\vec{R}(t)$ interactúe con un electrón en la subcapa s y lo expulse del átomo es:

$$P = \frac{1}{\hbar} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} \langle p_s | V(r, t) | s \rangle dt \right|^2, \quad (2.26)$$

donde

$$V(r, t) = \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{R}(t)|} \quad (2.27)$$

en la cual $|s\rangle$ representa el estado inicial del electrón en el átomo y $|p_s\rangle$ el estado final con momento p_s en el continuo, \vec{r} es el vector de posición del electrón y por último $\omega = \frac{\Delta E}{\hbar}$, donde ΔE es el cambio en la energía del electrón. Por otro lado, clásicamente se tiene que la sección eficaz diferencial de dispersión por un potencial central [32] está dada por $d\sigma_s = \pi b db$, en donde b es el parámetro de impacto. Entonces haciendo uso de esta descripción clásica de la colisión, podemos determinar la probabilidad de expulsar un electrón de la capa s de un átomo con una energía E_f como:

$$\frac{d\sigma_s}{dE_f} = \frac{2\pi}{\hbar} \int_0^{\infty} b db \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} \langle p_s | V(r, t) | s \rangle dt \right|^2, \quad (2.28)$$

Debido a esto es que a la presente aproximación se le denomina semiclásica (SCA). La sección eficaz de la capa s se obtiene integrando la ecuación (2.28) sobre todas las energías posibles de transferencia.

La solución más sencilla para la ecuación (2.28) es cuando la trayectoria del proyectil es una línea recta. Por simplicidad se escoge la trayectoria en el plano $y\hat{x}$ como $\vec{R}(t) = b\hat{y} + v_1 t\hat{z}$, donde b es el parámetro de impacto. Entonces la integral en la ecuación (2.26) queda como:

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_f^*(r) \psi_i(r) d^3r \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\omega t} dt}{|\vec{r} - \vec{R}(t)|} \right\} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_f^*(r) \psi_i(r) d^3r \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\omega t} dt}{\sqrt{x^2 + (b-y)^2 + (v_1 t - z)^2}} \right\} \quad (2.29) \\
&= \frac{2}{v_1} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_f^*(r) \psi_i(r) e^{i\omega t} K_0(\omega \rho / v_1) d^3r
\end{aligned}$$

donde $K_0(x)$ es la función modificada de Bessel de orden cero y $\rho = x^2 + (b-y)^2$. El cálculo de esta integral se efectúa considerando funciones de onda hidrogenoides para el electrón en el estado ligado y en el continuo, de la forma: $\psi_{klm} = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ y con energía final $E_f = \hbar^2 k^2 / 2m_e$, donde Y_{lm} son las funciones armónicas esféricas y la función radial $R_{kl}(r)$ para el estado en el continuo está dada por Bethe [35] como:

$$R_{kl}(r) = \frac{(-ir)^l}{(2l+1)!} e^{-r/2} {}_1F_1(-(k-l-1), 2l+2, r) \quad (2.30)$$

donde los números l, m corresponden al momento angular orbital del electrón y a sus proyecciones en el eje z . De esta manera la sección de transferencia de energía E_b , ecuación (2.28), se expresa en forma general como [36, 37]:

$$\left(\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right)^{st} = 4\pi Z_1 \frac{m_e e^4}{E_1 \hbar^2} \int_0^\infty b db \sum_{lm} |M_b|^2, \quad (2.31)$$

donde los elementos de matriz M_b están dados por:

$$\begin{aligned}
M_b(k, l, m) &= (4\pi)^{-1/2} \int r^2 dr d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) e^{i\omega r} K_0(q\rho) R_f^*(r) R_i(r) \\
&= \int_0^\infty w dw A_m^l(q, w, b) F_\beta^l(s) \quad (2.32)
\end{aligned}$$

donde $q = w/v_1$, $s^2 = q^2 + w^2$,

$$A_m^l(q, w, b) = \frac{1}{s^2} \left((2l+1) \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right)^{1/2} P_l^m(q/s) J_m(bw) \quad (2.33)$$

y

$$F_f^l(s) = \int_0^{\infty} r^2 dr j_l(sr) R_f^*(r) R_l(r). \quad (2.34)$$

Donde $P_l^m(x)$ son los polinomios asociados de Legendre, $J_m(x)$ son las funciones de Bessel y $j_l(x)$ son las funciones esféricas de Bessel.

Cuando la energía del proyectil es grande, la sección de ionización total calculada con la SCA suponiendo una trayectoria recta para el proyectil, coincide con la PWBA.

Cuando la velocidad del proyectil es pequeña, un resultado importante es que la sección de transferencia de energía E_f para una trayectoria en línea recta es proporcional a potencias

de $q_i \approx \frac{\hbar\omega_{2i} + E_f}{\hbar v_1}$, como:

$$\left(\frac{d\sigma_x}{dE_f} \right)^{nl} \propto \begin{cases} q_i^{-10} \text{ para } K, L_1 \\ q_i^{-12} \text{ para } L_2, L_3 \end{cases} \quad (2.35)$$

El cálculo de las secciones de transferencia de energía E_f utilizando trayectorias hiperbólicas, más reales que el caso de la línea recta, es mucho más complicado. Por este motivo Bang y Hansteen [34] se restringen al caso en que $a_{2i}^{-1} \ll q_i$, de tal manera que se puede suponer que el término monopolar del potencial es el dominante, es decir:

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}(t)|} \approx \begin{cases} \frac{1}{R(t)} & \text{para } r < R \\ \frac{1}{r} & \text{para } r > R \end{cases} \quad (2.36)$$

La trayectoria hiperbólica se describe en forma paramétrica:

$$\begin{aligned} x &= d(\cosh w + \varepsilon), & y &= d\sqrt{\varepsilon^2 - 1} \sinh w, & z &= 0 \\ R &= d(\varepsilon \cosh w + 1), & t &= \frac{d}{v_1}(\varepsilon \sinh w + w) \end{aligned} \quad (2.37)$$

donde ε es la excentricidad de la hipérbola y d es la mitad de la distancia de máximo acercamiento del proyectil. De esta forma, cuando se tienen colisiones lentas, $\xi, \ll 1$, las secciones utilizando trayectorias recta e hiperbólica se relacionan como:

$$\left(\frac{d\sigma_x}{dE_f}\right)^{hyp} = e^{-\pi d_0} \left(\frac{d\sigma_x}{dE_f}\right)^{st} \quad (2.38)$$

Cálculos para la sección de ionización de la capa K utilizando la aproximación monopolar y las trayectorias hiperbólicas son dados por Hansteen [38]. También se han presentado expresiones exactas para el cálculo de las secciones de ionización de la capa K a partir de la SCA utilizando funciones relativistas para los electrones y tomando el potencial de interacción, ecuación (2.27), sin considerar ninguna aproximación [39, 40, 41].

3. Aproximación ECPSSR

El modelo descrito por esta teoría es el que permite obtener resultados que reproducen mejor los experimentos. Fue propuesto por Brandt y Lapicki [10], y consiste en realizar correcciones a la PWBA, debidas a los efectos de: desviación coulombiana del proyectil, pérdida de energía del proyectil durante la colisión debido a la interacción con el núcleo del átomo blanco, y efectos relativistas de los electrones. A continuación se describen las correcciones a la PWBA que conforman la ECPSSR.

3.1 Efectos de Ligadura y Polarización

En la colisión ion-átomo, cuando la velocidad del ion es pequeña, los efectos de su presencia son más notorios en los electrones del átomo blanco, ya que se tiene un tiempo de interacción mayor y se alteran sus estados iniciales. Además cuando la velocidad del ion es pequeña se necesita que el ion penetre más dentro de la capa atómica para poder expulsar un electrón de las capas internas del átomo blanco. De manera que cuando el ion se encuentra cerca del núcleo aumenta la energía de ligadura de los electrones, por lo que disminuye la sección de ionización. Este efecto de ligadura se describe en [42] para la capa K utilizando la aproximación de estados estacionarios perturbados (PSS) [1, 43]. Para considerar este efecto de ligadura se cambia la energía reducida de enlace θ , por otra que tome en cuenta este efecto. Esto se logra al introducir un factor de corrección por ligadura

ϵ_s^B de manera que la energía de enlace reducida corregida resulta $\epsilon_s^B \theta_s$. Este factor de corrección está dado por:

$$\epsilon_s^B = 1 + \frac{\langle \Delta E_s \rangle}{\hbar \omega_{2s}}, \quad (2.39)$$

en donde $\langle \Delta E_s \rangle$ es el cambio promedio en la energía de enlace de la subcapa s durante la colisión. El cálculo de dicho factor de corrección se hace a partir del cambio en la energía de ligadura del electrón ΔE_s , debido a un ion que incide con parámetro de impacto b . Este cambio se puede calcular utilizando teoría de perturbaciones a primer orden, y entonces:

$$\Delta E_s(R) = \int \Psi_s^*(\vec{r}) \frac{Z_1 e^2}{|\vec{R}(t) - \vec{r}|} \Psi_s(\vec{r}) d^3\vec{r}, \quad (2.40)$$

donde $\vec{R}(t)$ corresponde al vector de propagación del proyectil y $\Psi_s(\vec{r})$ es la función de onda no perturbada del electrón en la subcapa s . Si suponemos que la trayectoria del ion es una línea recta, junto con funciones de onda hidrogenoides para Ψ_s , entonces el valor de ΔE_s puede expresarse en función de la variable $\lambda = R(t)/a_{2s}$ para las capas K, L. El valor $\langle \Delta E_s \rangle$ se determina evaluando ΔE_s en el punto de máximo acercamiento, o sea, $\lambda = b/a_{2s}$, y calculando el promedio sobre todos los parámetros de impacto posibles, entonces:

$$\langle \Delta E_s \rangle = \frac{\int_0^\infty \Delta E_s \left(\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right)_b \lambda d\lambda}{\int_0^\infty \left(\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right)_b \lambda d\lambda} \quad (2.41)$$

donde $\left(\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right)_b$ son las secciones de transferencia de energía final al electrón E_f dado el parámetro de impacto b y el superíndice s se refiere a que se trata de trayectorias rectilíneas. Estas secciones se expresan en términos de la SCA (ver sección 2 de este capítulo). Entonces tenemos que el factor ϵ_s^B puede expresarse como función de las velocidades

reducidas ξ_s , (definidas como $\xi_s = \frac{v_1}{\frac{1}{2}\theta_s v_{2s}} = \frac{n}{q_{0s} a_{2s}}$, donde $\theta_s = \frac{n^2 \hbar \omega_{2s}}{Z_{2s} R_\infty}$) en la forma [44]:

$$\varepsilon_s^B = 1 + \frac{2Z_1}{\theta_s Z_{2s}} g_s(\xi_s), \quad (2.42)$$

con $g_s(\xi)$ definida como:

$$g_s = (1 + 9\xi + 31\xi^2 + 98\xi^3 + 12\xi^4 + 25\xi^5 + 4.2\xi^6 + .0515\xi^7) / (1 + \xi)^9 \varepsilon_s^B \quad (2.43)$$

Otro cambio en los estados iniciales de un átomo durante la colisión con un ion es el debido a la atracción de la nube electrónica hacia el ion cuando éste pasa por afuera de las capas internas. En ese momento se da una polarización en los estados de los electrones del átomo blanco. Esto hace que aumente la sección eficaz de ionización. El efecto es importante a velocidades medias o grandes del proyectil, donde para expulsar electrones de las capas internas no necesita penetrar mucho en las capas del átomo. Se define un factor de corrección ε_s^P para θ , debido al efecto de polarización de manera análoga a como se hizo con el de ligadura. Para ello primero se considera el desarrollo en serie del potencial de interacción entre el ion y el electrón del átomo hasta el término cuadrupolar:

$$\frac{Z_1}{|\bar{R} - \bar{r}|} = \frac{1}{R} + \frac{\bar{R} \cdot \bar{r}}{R^3} + \frac{1}{2} \left(\frac{3(\bar{R} \cdot \bar{r})^2}{R^5} - \frac{r^2}{R^3} \right) + \dots, \quad (2.44)$$

después se expresa a los estados iniciales no perturbados del electrón mediante osciladores armónicos isotrópicos. De esta forma se considera el efecto de la polarización de estos osciladores armónicos por el paso de iones cargados [45, 46]. El cambio promedio en la frecuencia de oscilación generado por la interacción con el ion, sobre todos los parámetros de impacto mayores que a_{2s} , se expresa de la siguiente forma:

$$\Delta \omega(\omega) = \frac{4\pi Z_1}{v_1} \left(x K_0(x) K_1(x) + \frac{Z_1 \omega}{v_1^3} I(x) \right), \quad (2.45)$$

donde $x = b\omega/v_1$, K_0 y K_1 son las funciones modificadas de Bessel y la función $I(x)$ se detalla más adelante. El primer término de esta ecuación corresponde al elemento de orden

dipolar del potencial de interacción entre el ion y el electrón, mientras que el segundo término es el resultado del elemento cuadrupolar del potencial, el cual comprende la polarización del movimiento del electrón. Con base en estas ideas, el factor de polarización se expresa como:

$$\varepsilon_i^p(\xi_i, \theta_i; c_i) = 1 - \frac{2Z_1}{Z_2\theta_i} h_i(\xi_i; c_i), \quad (2.46)$$

y definimos

$$h_i(\xi_i; c_i) = \frac{2n}{\theta_i \xi_i^3} I\left(\frac{c_i n}{\xi_i}\right), \quad (2.47)$$

aquí c_i es una constante que depende de la subcapa que se esté considerando en el proceso de ionización. El valor para la capa K es $c_K = \frac{1}{2}$. Y la función $I(x)$ está dada, con un 1% de error para valores $0 < x \leq 0.035$, por:

$$I(x) = \frac{3}{4} \pi \left(\ln \frac{1}{x^2} - 1 \right); \quad (2.48)$$

para $0.035 < x \leq 3.1$ tenemos:

$$I(x) = e^{-2x} (0.031 + 0.210x^{1/2} + 0.005x - 0.069x^{3/2} + 0.324x^2)^{-1} \quad (2.49)$$

y para $3.1 < x \leq 11$:

$$I(x) = \frac{e^{-2x}}{x^{1.6}}. \quad (2.50)$$

Finalmente si $x > 11$ se considera $I(x) = 0$.

Si se combinan los efectos de ligadura y polarización se obtiene un factor de corrección ζ , definido como:

$$\zeta_r(\xi_r) = 1 + \frac{2Z_1}{Z_2 \theta_r} (g_r(\xi_r) - h(\xi_r; c_r)) \quad (2.51)$$

Por último, obtenemos que el efecto de ligadura y polarización se toma en cuenta dentro de la PWBA cambiando θ , por ζ , θ , y dividiendo ξ , entre ζ , de manera que la sección de ionización corregida resulta:

$$\sigma_i^{PSS} = \sigma_i^{PWBA}(\xi_r / \zeta_r, \zeta_r \theta_r). \quad (2.52)$$

3.2 Efecto de Desviación Coulombiana

Si un ion incide a altas velocidades sobre un átomo, la interacción con el núcleo no altera de manera apreciable su trayectoria, pero al considerar velocidades del ion cada vez más pequeñas esta interacción resulta cada vez más notoria, produciendo cambios en la trayectoria del ion y disminuyendo la velocidad del proyectil. Para tomar en cuenta estos efectos, el proyectil debe considerarse como una función de onda coulombiana, o bien, considerar una trayectoria hiperbólica en lugar de una trayectoria recta.

Basbas *et. al.* [47] y Brandt y Lapicki [48,9], derivan un factor de corrección para considerar el efecto de la desviación coulombiana. Este factor se obtiene a partir de:

$$\left(\frac{d\sigma_i}{dE_f} \right)^{hyp} = e^{-\pi d q_0 r} \left(\frac{d\sigma_i}{dE_f} \right)^{sl} \quad (2.53)$$

donde los superíndices *hyp* y *sl* se refieren a las trayectorias hiperbólica y rectilínea

respectivamente, $d = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_1}$ es la mitad de la distancia de máximo acercamiento del ion

en una colisión de frente, $\hbar q_0 = \frac{\hbar \omega_{21}}{v_1}$ es el mínimo momento que puede ser transferido y

$\tau = 1 + \frac{E_f}{\hbar\omega_{2s}}$. Considerando la sección diferencial de ionización sobre una trayectoria recta en el límite de colisiones lentas, en términos de q_0 , de manera que:

$$\left(\frac{d\sigma_s}{dE_f}\right)^{sl} \propto (q_0\tau)^{-(10+2l_s)} \quad (2.54)$$

y al integrar sobre los valores posibles de τ desde 1 hasta ∞ , se obtiene la sección de ionización corregida por la desviación coulombiana, dada por:

$$\sigma_s^C = C_s(\pi dq_0)\sigma_s^{PWBA} \quad (2.55)$$

Donde el factor de desviación coulombiana queda definido como:

$$C_s(\pi dq_0) = (9 + 2l_s)E_{10+2l_s}(\pi dq_0) \quad (2.56)$$

donde l_s es el momento angular orbital del electrón en la subcapa s ($l_s = 0$ para las capas K y L_1 , y $l_s = 1$ para L_2 y L_3), y $E_l(x)$ es la integral exponencial de orden l , dada por [49]:

$$E_l(x) = \int_x^\infty e^{-u} u^{-l} du \quad (2.57)$$

Los efectos de ligadura y polarización se pueden combinar con la corrección por desviación coulombiana, para considerar estos efectos en forma conjunta, de tal manera que la sección de ionización se expresa como:

$$\sigma_s^{CPSS} = C_s(\pi dq_0\zeta_s)\sigma_s^{PWBA}(\xi / \zeta_s, \zeta_s, \theta_s) \quad (2.58)$$

3.3 Efectos Electrónicos Relativistas

Los efectos relativistas en los electrones del átomo comienzan a ser importantes cuando se tienen elementos pesados y cuando la velocidad del proyectil es baja. Cuando $Z_2 > 50$ es necesario emplear funciones de onda relativistas para describir los electrones del átomo. Al utilizar este tipo de funciones de onda la densidad de electrones resulta ser mayor en las cercanías del núcleo, al comparar con funciones de onda no relativistas, de manera que las velocidades de los electrones en las capas internas resultan ser mayores. Entonces, si la energía del proyectil es baja la colisión debe tener lugar cerca del núcleo para que sea

posible expulsar algún electrón y ya que estos tienen velocidades mayores a las estimadas, el mínimo momento que se pueda transferir será mayor. Como resultado, estos efectos electrónicos relativistas provocan un aumento en las secciones de ionización de las capas internas.

Como el cálculo de las secciones utilizando la PWBA es en general complicado al utilizar funciones relativistas, Brandt y Lapicki [9] desarrollan una corrección relativista para la PWBA en forma similar al método empleado para los efectos de ligadura y polarización. Para ello, primero se considera el hecho de que cuando $\xi_i \ll 1$ la sección de ionización en la aproximación PWBA es proporcional a la cuarta potencia de:

$$T_{\max} = 2m_e v_1^2 \cdot m_e \theta_1 \omega_{21} \xi_i^2, \quad (2.59)$$

donde T_{\max} es la máxima energía que se puede transferir al electrón (de masa $m_e = 1$ en unidades atómicas). Después se establece una distribución local para la masa relativista del electrón en un potencial central en función de r . Esto es, se establece la masa relativista del electrón $m^R(r)$ como una función que depende de la distancia con respecto al núcleo. Esto puede hacerse a partir del teorema de Virial [50], de manera que la masa relativista de un electrón en un potencial central queda en términos de potencias de $\frac{Z_{2s}}{r}$, en la forma siguiente[‡]:

$$m^R(r) = \left[1 + \left(\frac{Z_{2s}}{2rc^2} \right)^2 \right]^{1/2} + \frac{Z_{2s}}{2rc^2}. \quad (2.60)$$

Esta función se evalúa en el valor promedio de $\langle R(t) \rangle = \alpha b$ para una trayectoria recta con parámetro de impacto b y donde $\alpha = \sinh 1 = 1.1752$. Luego al promediar $m^R(\alpha b)$ sobre todos los parámetros de impacto, análogamente a la ecuación (2.41), se obtiene el factor de corrección relativista dado por:

$$m_e^R(\xi_i) = (1 + 11y_i^2)^{1/2} + y_i, \quad (2.61)$$

[‡] Si la masa del electrón no estuviera en unidades atómicas, se tendría que la masa relativista del electrón es $m_e^R(r) = m^R(r) m_e$, donde $m^R(r)$ es un factor de corrección para m_e en función de r .

con $y_s = \frac{0.40 \left(\frac{Z_{2s}}{137} \right)^2}{n \xi_s}$ para las capas K y L₁.

Con lo anterior y comparando con la ecuación (2.59) se encuentra que la corrección relativista se obtiene reemplazando ξ_s por $[m_s^R(\xi)]^K \xi_s$ o también cambiando η_i por $m_s^R \eta_i$ en la sección PWBA no relativista. Entonces, podemos definir la velocidad reducida relativista como:

$$\xi_s^R = [m_s^R(\xi)]^K \xi_s. \quad (2.62)$$

Si se consideran en conjunto los efectos relativista, de desviación coulombiana y el de ligadura y polarización, la sección de ionización corregida por todos estos efectos es:

$$\sigma_s^{CPSSR} = C_s (\pi d q_0 \zeta_s) \sigma_s^{PWBA} (\xi_s^R / \zeta_s, \zeta_s, \theta_s). \quad (2.63)$$

3.4 Efecto por Pérdida de Energía

Comúnmente se calcula la sección PWBA a partir de las ecuaciones (2.16) o (2.23), considerando los límites de integración con $Q_{max} \rightarrow \infty$ en lugar del límite exacto, ecuación (2.20). Esta aproximación se basa en las condiciones $m \ll m_e$ y $\varepsilon = \hbar\omega_{2s} + E_f \ll E_1$.

Cuando la energía de incidencia es pequeña, es decir, $\varepsilon \approx E_s$, entonces la consideración acerca de Q_{max} no es adecuada y por lo tanto deben utilizarse los límites exactos. Brandt y Lapicki [10] proponen una corrección para tomar en cuenta este hecho. A partir de la ecuación (2.54), se describe la sección diferencial con los límites de integración exactos, en la forma:

$$\left(\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right)^{EPWBA} = \left(\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right)^{PWBA} \left[\left(\frac{q_0}{q_{min}} \right)^{\nu+1} - \left(\frac{q_0}{q_{max}} \right)^{\nu+1} \right], \quad (2.64)$$

donde se tiene que $\nu = 9 + l_{2s}$ y q_{min} , q_{max} son las transferencias de momento mínima y máxima respectivamente, dadas por las ecuaciones (2.17) y (2.18). Integrando la ecuación (2.64) sobre todos los estados finales E_f posibles, se puede expresar la sección de ionización como sigue:

$$\left(\frac{d\sigma_z}{dE_f}\right)^{EPWBA} = f_z(z_z) \left(\frac{d\sigma_z}{dE_f}\right)^{PHBA}, \quad (2.65)$$

aquí tenemos que

$$f_z(z_z) = \frac{1}{2^{\nu}(\nu-1)} \left[(\nu z_z - 1)(1+z_z)^{\nu} + (\nu z_z + 1)(1-z_z)^{\nu} \right], \quad (2.66)$$

y

$$z_z = \left(1 - \frac{m_1 \hbar \omega_{2z}}{mE_i} \right)^{1/2}. \quad (2.67)$$

Por otra parte, cuando la energía del ion incidente es muy pequeña ya no es conveniente tomar la aproximación $q_{mn} = q_{0z} \approx \frac{\hbar \omega_{2z}}{v_1}$. En este caso habrá que tomar la q_{mn} exacta a partir de la ecuación (2.17), de manera que:

$$q_{mn} = \frac{P_0 - P}{\hbar} = K_i - K_f = \frac{2q_0}{1 + (1 - \Delta)^{1/2}} \quad (2.68)$$

donde $\Delta = \frac{E_i - E_{if}}{E_i}$ y E_{if} es la energía final del ion después de la colisión. Lapicki y

Lososky [51] muestran que cuando se toma en cuenta la pérdida de energía del ion entonces el factor de corrección por desviación coulombiana, ecuaciones (2.55) y (2.56), debe cambiarse el argumento dq_{0z} por:

$$Z_1 Z_2 m (K_f^{-1} - K_i^{-1}) = \frac{Z_1 Z_2}{m v_i v_f} (K_i - K_f). \quad (2.69)$$

A partir de las ecuaciones (2.67), (2.68) y (2.69) se encuentra que para tomar en cuenta el efecto de pérdida de energía en la corrección por desviación coulombiana (ecuación (2.55)),

basta con multiplicar dq_{0z} por $\frac{2}{z_z(1+z_z)}$. De esta manera la sección de ionización considerando pérdida de energía y desviación coulombiana queda en la forma:

$$\sigma_s^{RC} = C_s \left(\frac{2\pi dq_{0s}}{z_s(1+z_s)} \right) f(z_s) \sigma_s^{PWBA}. \quad (2.70)$$

La unión de la sección eficaz anterior con las correcciones por los efectos electrónicos relativistas y los de ligadura y polarización, se efectúa tomando en cuenta esta corrección que hay que hacer en todos los parámetros que contengan a q_0 , por pérdida de energía. Tendremos entonces que la sección de ionización que considera todos estos efectos puede escribirse así:

$$\sigma_s^{ECPSSR} = C_s \left(\frac{2\pi dq_{0s} \zeta_s}{z_s(1+z_s)} \right) f_s(z_s) \sigma_s^{PWBA}(\xi_s^R / \zeta_s, \zeta_s \theta_s); \quad (2.71)$$

ahora tenemos que

$$z_s = \left(1 - \frac{\zeta_s \hbar \omega_{L_s} m_1}{m E_1} \right)^{1/2}. \quad (2.72)$$

3.5 Correcciones a la Teoría ECPSSR

Diferentes correcciones aplicadas a la teoría ECPSSR han sido propuestas con el propósito de mejorar los resultados del modelo ya que se han encontrado desviaciones con respecto a los resultados experimentales. Aquí sólo se mencionan las que tienen mayor importancia para este trabajo. Estas correcciones están enfocadas principalmente al cambio de la energía de ligadura del electrón debido a la presencia del proyectil.

Estudios realizados en las capas L [52, 53] muestran que los cálculos de los cocientes σ_{L1}/σ_{L2} y σ_{L1}/σ_{L3} tienen discrepancias significativas dependiendo del tipo de corrección por efecto de ligadura que se utilice. Ésta depende por una parte de la dificultad de reproducir el efecto del nodo en la función de onda del nivel $2S_{1/2}$ [54] y por otra parte, de la forma en cómo se considera la interacción entre el proyectil y el electrón.

La determinación del efecto de ligadura efectuada por medio de la PSS se hizo considerando la perturbación del proyectil sobre un electrón ligado al átomo. En este caso el electrón se consideró independiente del proyectil ya que durante la interacción el electrón no forma parte de ningún tipo de estado ligado al proyectil.

3.5.1 Corrección de Átomo Unido (UA)

Andersen *et. al.* [55,37] comentan que cuando $\xi, \leq 1$, (es decir, cuando la velocidad de interacción sea menor que la del electrón del átomo), es posible la modificación de la función de onda del electrón, de manera que cambian la energía de ligadura y velocidad de éste. Por ejemplo, en el caso de la capa K, el cambio en la energía de ligadura del electrón calculada a partir de la ecuación (2.40), para una distancia R dada y con funciones de onda hidrogenoides no perturbadas de radio orbital $r_K \approx a_{2K}$ es:

$$\Delta E_K(R, r_K) = \frac{Z_1 e^2}{R} \left[1 - \left(1 + \frac{R}{r_K} \right) \exp \left\{ \frac{-2R}{r_K} \right\} \right]. \quad (2.73)$$

Si la colisión es lenta, la función de onda del electrón puede *relajarse* y cambiar de tal manera que corresponda a un estado en el que la energía de ligadura del electrón con el átomo y el ion sea mínima. Esta función de onda relajada puede estimarse considerando que tiene la misma forma que antes de la colisión, sólo que ahora con el radio orbital r'_K . Este radio debe ser tal que minimice la energía de ligadura del electrón, dada como:

$$E_B(r'_K) = \frac{e^2 a_0}{2r'^2_K} - \frac{Z_{2K} e^2}{r'_K} + \Delta E_K(R, r'_K), \quad (2.74)$$

el primer término de esta expresión corresponde a la energía cinética del electrón y el segundo al potencial de atracción por el núcleo apantallado. El tercer término está dado por la ecuación (2.73), evaluada en r'_K en lugar de r_K . La aproximación anterior en su caso más extremo se conoce como de átomo unido (*United Atom, UA*), ya que el electrón se puede suponer como si estuviera moviéndose en el potencial de un átomo con número atómico $Z_2 + Z_1$. La distancia R depende del parámetro de impacto del ion y para la de mínima separación al núcleo está dada por:

$$R_{min} = \frac{b_0}{2} + \sqrt{\frac{b_0}{4} + b^2}, \quad (2.75)$$

donde $b_0 = 2d$ es la distancia de máximo acercamiento en una colisión frontal. Pero como el cálculo de la sección de transferencia de energía al electrón, ecuación (2.35), está

aproximadamente dado en términos de potencias de $q_{2z}^{-1} = r_{ad} = \frac{\hbar\omega_{2z}}{\hbar v_1}$, entonces se sugiere evaluar el cambio en la de energía de ligadura en [37]:

$$R^2 = [R_{min}^2 + r_{ad}^2]^K \quad (2.76)$$

Aquí a r_{ad} se le conoce como distancia adiabática de la colisión. De esta forma, puede determinarse el factor de corrección análogamente al de la ecuación (2.39), a partir de la ecuación (2.74) evaluando R en la distancia R', ecuación (2.76), e integrando con respecto a los parámetros de impacto b posibles. La ventaja que presenta evaluar en R' es que el efecto de esta corrección por ligadura desaparece cuando se tiene $\xi \gg 1$. Además, si $\xi \ll 1$, se puede ver que los resultados no difieren mucho si se utiliza la ecuación (2.75) o la ecuación (2.76). Estudios de la capa K considerando esta corrección para elementos con $22 \leq Z \leq 30$ muestran mejores ajustes que la ECPSSR. En general se ha observado que lo anterior es útil aun para $\xi_K < 0.25$ en la capa K.

El inconveniente que presenta esta corrección es que el radio r'_K se tiene que determinar de la ecuación (2.74) por medio de iteraciones y depende del elemento blanco, lo que es más complicado que la simple corrección a partir de la ecuación (2.73). Todo lo anterior también se puede aplicar en forma similar al estudio de las capas L.

3.5.2 Corrección de Orbital Molecular (MO)

Otra corrección es la que involucra diferentes procesos de tipo molecular que pueden influir en la ionización sobre todo a bajas energías [56], aunque otros estudios [57] muestran que existe la probabilidad de que las desviaciones en las secciones de ionización no provengan de la captura electrónica, ni del movimiento del electrón en órbitas cuasi-moleculares ni de la excitación por átomos del blanco en retroceso. Es por esto que se propone que dichas desviaciones son producto de la formación de orbitales moleculares (MO) durante la colisión a bajas energías [58]. Primero se supone que cuando $\xi < 1$ domina la aproximación UA y para $\xi > 1$ debe dominar la de átomos separados. De manera que se define una función $\alpha(\xi)$ tal que sólo puede tomar valores en el intervalo $0 \leq \alpha(\xi) \leq 1$ y además con las propiedades de que $\alpha = 0$ si se considera la aproximación SA ($\xi \gg 1$) y α

= 1 si se considera la aproximación UA ($\xi \ll 1$). La función que cumple estas condiciones y cuya definición resulta conveniente es:

$$\alpha(\xi) = f(\xi)\alpha(\xi_D), \quad (2.77)$$

donde:

$$f(\xi) = \exp\left\{-\frac{(\xi - \xi_D^2)}{\xi^2}\right\}, \quad (2.78)$$

$$\alpha_s(\xi) = \frac{1 + e^{-\omega_s}}{1 + e^{-(\xi - \xi_D^2)/\xi^2}}. \quad (2.79)$$

Los parámetros ξ y ξ_D se definen como:

$$\xi_D = \frac{2d}{a_{2s}} + \sqrt{\left(\frac{2d}{a_{2s}}\right)^2 + \xi^2}, \quad (2.80)$$

$$\xi_0 = C_M \xi_M \text{ y } a = C_A \xi_M \quad (2.81)$$

con

$$\xi_M = \frac{Z_1(Z_{2s} + Z_1)}{Z_{2s}^2}, \quad (2.82)$$

y C_M , C_A son parámetros que se determinan a partir del mejor ajuste a datos experimentales. Las funciones $f(\xi)$ y $a_s(\xi)$ se toman de esta manera para que la función $\alpha(\xi)$ represente un cambio continuo y gradual, sin variaciones bruscas, entre las dos aproximaciones extremas: SA, UA. Es por medio de esta función α que se dan las correcciones en la ECPSSR a través de los siguientes pasos:

1. La Z_{2s} se cambia por $Z_{2s}^\alpha = Z_{2s} + \alpha Z_1$. Consecuentemente todos los términos que dependen de ésta cambian de la misma manera, por ejemplo ξ , cambia por ξ^α .
2. Se cambia θ_{2s} por θ_{2s}^α , donde:

$$\theta_i^\alpha = \frac{\hbar\omega_{2i}}{(Z_{2i} + \alpha Z_1)^2 R_\infty}. \quad (2.83)$$

Podemos ver que para $\alpha = 1$ tenemos la aproximación UA: $\theta_i^\alpha = \theta_i^{UA}$; y si $\alpha = 0$ se tiene la SA: $\theta_i^\alpha = \theta_i$.

3. El factor de corrección por ligadura y polarización ζ_i , ecuación (2.51), se cambia por:

$$\zeta_i^\alpha = 1 + 2(1 - \alpha)Z_1 \frac{g(\xi_{2i}) - h(\xi_{2i})}{Z_{2i}^\alpha \theta_i^\alpha}. \quad (2.84)$$

De esta manera se tiene que cuando $\alpha = 0$, no cambia la ECPSSR y cuando $\alpha = 1$ se tiene la aproximación UA-ECPSSR. A este modelo en conjunto se le denota por MECPSSR. El efecto MO se traduce en este caso en un aumento en la energía de ligadura del electrón, pero también tiene que aumentar la velocidad orbital, por lo tanto el efecto neto es un aumento en la sección de ionización. En este modelo si $Z_i = 1, 2$ y $Z_{2\alpha} > 20$, se tiene que ξ_M es muy pequeña y entonces $\alpha(\xi) \approx 0$, por lo que no se espera la presencia de orbitales moleculares. Sólo para Z_i grandes y valores de ξ pequeños se espera que el efecto MO sea importante e incremente la sección de ionización con respecto a la sección ECPSSR. Comparaciones previas de la MECPSSR con resultados experimentales muestran buenos ajustes, aunque se tiene el inconveniente del ajuste de los parámetros C_M y C_A con datos experimentales, lo cual hace que este modelo sea de un carácter semi - empírico.

4. Teoría de Perturbación Adiabática

En colisiones cuasi - simétricas, la vacante compartida entre los orbitales moleculares (MO) $1s\sigma$ y $2p\sigma$ en el canal de salida de la colisión es el mecanismo principal de ionización para el MO $1s\sigma$ [59, 60, 61]. Este mecanismo va siendo dominado gradualmente por la excitación coulombiana directa al volverse más asimétricas las colisiones.

Se puede hacer una descripción alternativa de la ionización directa del MO $1s\sigma$ utilizando la teoría de perturbación adiabática [62]. En el límite adiabático la ionización se da predominantemente a distancias internucleares las cuales son mucho más pequeñas que el radio de la capa K de átomo unido. Se ha mostrado que bajo estas circunstancias la

excitación coulombiana de un electrón que ocupa un MO puede ser vista como una superposición de dos componentes, cada uno correspondiente a la excitación coulombiana del electrón activo, fijo en el centro de carga, debido a los dos núcleos del sistema.

4.1 Teoría de Perturbación Adiabática con Carga MO Variable

Para colisiones lentas no muy asimétricas puede describirse la ionización de las capas internas considerando la excitación del electrón activo ocupando un MO momentáneo, siendo esto producto de los núcleos del proyectil y del blanco. Un modelo simple dentro de esta descripción es aproximar el MO momentáneo de dos centros mediante funciones de onda de un centro teniendo como origen el centro de cargas. De esta manera, la amplitud de transición entre un estado inicial ψ_0 y el estado final ψ_n con eigenvalores de energía E_0 y E_n y momento orbital electrónico l_0 e l_n respectivamente, está dado por la teoría de perturbación adiabática como

$$I_n(p) = -\frac{ie^2}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp\left\{i \int \omega dt'\right\} \left\langle \psi_n \left| \left(\frac{Z_1}{|\vec{r} - \alpha \vec{R}|} + (-1)^{l_n - l_0} \frac{Z_2}{|\vec{r} - \beta \vec{R}|} \right) \right| \psi_0 \right\rangle \quad (2.85)$$

donde p es el parámetro de impacto, $\hbar\omega = E_n - E_0$ y Z_1e y Z_2e corresponden a las cargas nucleares del proyectil y del blanco. Los parámetros $\beta = \frac{Z_1^*}{(Z_1^* + Z_2)}$ y $\alpha = 1 - \beta$, donde

Z_1^*e es un tipo de *carga efectiva* que será determinada más tarde, define la posición del centro de cargas para una separación internuclear dada R .

La ecuación (2.85) muestra que tanto el proyectil como el blanco contribuyen a la amplitud de transición para todos los valores de R . En [2] se muestra que cuando $R \rightarrow \infty$ la amplitud de transición proviene sólo del proyectil, que es equivalente a decir que $\alpha = 1$. Entonces $\beta = 0$ y el término del blanco no contribuye. En este límite, el centro de cargas coincide con el núcleo del blanco. La condición asintótica cuando $\beta \rightarrow 0$ para $R \rightarrow \infty$ sugiere dependencia de Z_1^* en R , lo cual satisface las condiciones: $Z_1^* \rightarrow 0$ y $R \rightarrow \infty$; $Z_1^* \rightarrow Z_1$ y $R \rightarrow 0$.

Para poder determinar la dependencia de Z_1^* en R , se utilizan funciones de onda que satisfagan la ecuación de Schrödinger, de modo que:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \frac{Z_T e^2}{r}\psi + V_s(R)\psi = E\psi \quad (2.86)$$

donde m es la masa del electrón y $Z_T = Z_1^* + Z_{2K}$. Por definición tenemos que:

$$Z_{2K} = Z_2 \cdot \frac{5}{16} \approx Z_2 \cdot 0.3, \quad (2.87)$$

es la carga apantallada usual del núcleo blanco y Z_T es la carga total efectiva nuclear empleada para describir los estados estacionarios del electrón activo. En la ecuación (2.86), $V_s(R)$ corresponde al potencial de apantallamiento debido a los electrones externos pasivos, que se supone constante para una distancia internuclear dada R . La energía de ionización del electrón activo se obtiene a partir de la ecuación (2.86) y resulta [63]:

$$I = Z_T^2 R_\infty - V_s(R), \quad (2.88)$$

Entonces el parámetro de apantallamiento $\theta(Z_T) = \frac{I}{Z_T^2 R_\infty}$ está dado por:

$$\theta(Z_T) = 1 - \frac{V_s(R)}{Z_T^2 R_\infty} \quad (2.89)$$

La energía de ionización puede evaluarse utilizando teoría de perturbaciones a primer orden. Para el electrón activo se tiene:

$$I = \left\langle \psi_0(\vec{r}) \left| \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right| \psi_0(\vec{r}) \right\rangle + \left\langle \psi_0(\vec{r}) \left| \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \alpha \vec{R}|} \right| \psi_0(\vec{r}) \right\rangle + \left\langle \psi_0(\vec{r}) \left| \frac{Z_2 e^2}{|\vec{r} + \beta \vec{R}|} \right| \psi_0(\vec{r}) \right\rangle \quad (2.90)$$

$$- \frac{1}{2} \left\langle \psi_0(\vec{r}) \psi_0(\vec{r}') \left| \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right| \psi_0(\vec{r}') \psi_0(\vec{r}) \right\rangle - \left\langle \psi_0(\vec{r}) \left| V_s(R) \right| \psi_0(\vec{r}) \right\rangle$$

Los términos que aparecen en la ecuación (2.90) corresponden a la energía cinética, los potenciales de interacción proyectil - blanco, y el potencial debido a la interacción con el

otro electrón de la capa K (apantallamiento externo). Empleando para ψ_0 la función de onda 1s que satisface la ecuación (2.86), se llega a que:

$$I = -Z_T^2 R_\infty + 2Z_1 Z_T R_\infty G(u) + 2Z_2 Z_T R_\infty G(\gamma u) - \frac{5}{8} Z_T R_\infty - V_s(R) \quad (2.91)$$

donde

$$u = \frac{\alpha Z_T}{Z_{2K}} b_2 R \quad (2.92)$$

y

$$\gamma = \frac{Z_1}{Z_2} \quad (2.93)$$

con $b_2 = \frac{1}{a_{2K}} = \frac{Z_{2K}}{a_0}$ y a_0 es el radio de Bohr del estado base del átomo de hidrógeno. La

función $G(u)$ está dada por:

$$G(u) = \frac{1 - (1 + u)e^{-u}}{u} \quad (2.94)$$

Para colisiones asimétricas en el límite adiabático la ionización se da para valores pequeños de R y se puede considerar $\gamma b_2 R \ll 1$. Dado que $\alpha \frac{Z_T}{Z_{2K}} \approx 1$, la energía de ionización (ecuación (2.91)) puede aproximarse por:

$$I \approx -Z_T^2 R_\infty + 2Z_1 Z_T R_\infty G(b_2 R) + 2Z_T R_\infty \left(Z_2 - \frac{5}{16} \right) - V_s(R) \quad (2.95)$$

A partir de esta ecuación y de la definición de Z_{2K} , ecuación (2.87), podemos ver que el parámetro de apantallamiento está dado como:

$$\theta = -1 + \frac{2Z_1 G(b_2 R)}{Z_T} + \frac{2Z_{2K}}{Z_T} - \frac{V_s(R)}{Z_T^2 R_\infty} \quad (2.96)$$

Dado que $Z_T = Z_1^* + Z_{2K}$ la ecuación (2.96) será idéntica a la ecuación (2.89) si uno hace:

$$Z_1^* = Z_1 G(b_2 R). \quad (2.97)$$

Con esta elección, $\gamma b_2 R \sim Z_1 / Z_2$ cuando $Rk \rightarrow \infty$. Entonces la aproximación $\gamma b_2 R \ll 1$ queda justificada para todos los valores de R en colisiones asimétricas.

Como el propósito es determinar la sección de ionización total, el siguiente paso es promediar la Z_1^* , dada por la ecuación (2.97), sobre todas las posibles rutas que puede seguir el proyectil. Para obtener este promedio se utiliza el siguiente procedimiento, propuesto en [47]:

$$Z_1^* = Z_1 g(\xi) \quad (2.98)$$

donde:

$$g(\xi) = \frac{1 + 5\xi + 7.14\xi^2 + 4.27\xi^3 + 0.947\xi^4}{(1 + \xi^5)} \quad (2.99)$$

y el parámetro adiabático se determina en la manera usual, $\xi = \frac{2\sqrt{\eta}}{\theta(Z_{2K})}$, donde

$$\eta = \frac{mE_1}{M_1 Z_{2K}^2 R_\infty} \quad \text{con } E_1 \text{ y } M_1 \text{, la energía cinética y la masa del proyectil respectivamente. A}$$

menos que la dependencia de Z_1^* en R sea indicada explícitamente, el promedio dado por la ecuación (2.98) será supuesto implícitamente a partir de aquí.

La evaluación del parámetro de apantallamiento por medio de la ecuación (2.89) es una tarea muy complicada. En [62] se describe un procedimiento alternativo. Los valores de θ , determinados experimentalmente para valores discretos de Z , se ajustan por una función continua $\theta(Z)$. La dependencia de θ en R puede ser tomada en cuenta al calcular el valor de esta función en $Z_T(R) = Z_{2K} + Z_1^*(R)$. Entonces, la colisión de un proyectil pesado en un blanco para un parámetro de impacto pequeño será descrita por el parámetro θ que evoluciona progresivamente desde el átomo separado hasta los límites del átomo unido, reproduciendo aproximadamente los valores experimentales intermedios. Por lo tanto, el cálculo de la sección total se hará siguiendo el mismo método de promediar mencionado

antes, es decir, tomando $Z_r = Z_{2K} + Z_1^*$, con Z_1^* dada por la ecuación (2.98) para evaluar $\theta(Z_r)$. Se tiene que la función:

$$\theta(Z) = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{Z}{137} \right)^2 \right] \ln \left\{ Z \left(c_1 |Z - 20| - 35 \right)^3 + \frac{c_2}{1 + (c_3 Z)^6} + c_4 \right\} \right]^{1/c_5}, \quad (2.100)$$

con $c_1 = 0.0051$, $c_2 = 0.0030$, $c_3 = 0.0060$, $c_4 = 0.1705$ y $c_5 = 2.35$, reproduce los valores recomendados para las energías de ionización de la capa K, para elementos con $10 < Z < 103$ con desviaciones menores al 0.16 %.

Entonces, tomando las funciones de onda que satisfacen la ecuación (2.86) y empleando la ecuación (2.98) para determinar la carga nuclear efectiva Z_r , la posición del centro de cargas y el parámetro de apantallamiento, uno puede considerar simultáneamente varios aspectos físicos que se originan en la transición del límite adiabático al régimen de velocidades intermedias. La evolución radial de las funciones de onda, la variación del parámetro de apantallamiento, y, en consecuencia, el papel de los electrones pasivos en la determinación de la energía de ligadura del electrón activo, y el corrimiento del centro de carga hacia el núcleo blanco son, todos ellos, tomados en cuenta.

El uso del promedio (2.98) para Z_1^* da valores promedio independientes del tiempo para los parámetros ω , α , β . Para poder evaluar la sección de ionización total para el MO $1s\sigma$, se tomará otra aproximación introduciendo esos parámetros en la ecuación (2.85) para obtener una expresión que pueda ser manipulada fácilmente, esto es:

$$I_n(p) = -\frac{ie^2}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \left\langle \psi_n \left| \left(\frac{Z_1}{|\vec{r} - \alpha \vec{R}|} + (-1)^{l_0 + l_1} \frac{Z_2}{|\vec{r} - \beta \vec{R}|} \right) \right| \psi_0 \right\rangle \quad (2.101)$$

4.2 La Sección Eficaz Escalada

Puede verse de la ecuación (2.101) que para transiciones dipolares $l_0 + l_1 = 1$ y amplitudes de transición del proyectil y el blanco se cancelan casi por completo [64]. Por lo tanto, la contribución dominante a la ionización coulombiana directa del MO $1s\sigma$ proviene del término monopolar, que puede ser tratado convenientemente por medio del formalismo del vector de corriente [65]. El término del blanco en la ecuación (2.101) corresponde al

término de retroceso de la SCA en el límite muy asimétrico [66]. Cuando este término se retira, se recupera la expresión usual de la SCA para la amplitud de transición.

Para transiciones monopolares, la integración sobre las coordenadas electrónicas espaciales en la ecuación (2.101) puede evitarse utilizando el procedimiento descrito en [65]. Siguiendo los mismos pasos mostrados ahí, se puede expresar la amplitud de transición monopolar como:

$$I_n(p) = -\frac{4\pi i e^2}{\hbar \omega^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\omega t) v \cdot (Z_1 \alpha \vec{J}(\alpha \vec{R}) + Z_2 \beta \vec{J}(\beta \vec{R})), \quad (2.102)$$

donde $\vec{J}(\vec{R}) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi_n^*(\vec{R}) \nabla \psi_0(\vec{R}) - \psi_0(\vec{R}) \nabla \psi_n^*(\vec{R}))$ es el vector de corriente asociado a la transición $0 \rightarrow n$ y $v = \frac{d\vec{R}}{dt}$ es la velocidad relativa de los núcleos en colisión.

El vector de corriente será determinado con funciones de onda ligadas y continuas que satisfagan la ecuación de Schrödinger (2.86), con los parámetros promediados Z_T y V , obtenidos de las ecuaciones (2.98) y (2.89), junto con la ecuación (2.100), respectivamente. Entonces, el MO $1s\sigma$ estará representado por las funciones de onda:

$$\psi_0 = A_0 \exp\{-bR\} \quad (2.103)$$

con $A_0 = \frac{b^{3/2}}{\sqrt{\pi}}$ y $b = Z_1/a_0$. Por otra parte, la función de onda del electrón s con número de onda k está dada por:

$$\psi_k^* = A_k^* \exp(ikR) {}_1F_1\left(1 - \frac{ib}{k}; 2; -2ikR\right) \quad (2.104)$$

siendo $A_k^* = \exp\left(\frac{\pi b}{2k}\right) \Gamma(1 - ik/b)$ y ${}_1F_1(a, b, z)$ la función confluyente hipergeométrica [49].

Para valores pequeños de k , se tiene la aproximación $|A_k|^2 \approx 2\pi b/k$.

Empleando estas funciones de onda en la descripción del electrón activo para los estados inicial y final, el vector de corriente puede escribirse como [65]:

$$\bar{J}(\bar{R}) = \frac{\omega}{3i} A_0 A_k^* \exp\{-(b + ik)R\} \frac{\Gamma(4)\bar{R}}{[\Gamma(2 + ib/k)]^2} \times \int_0^1 ds \exp(2sikR) s^{\left(\frac{1+b}{k}\right)} (1-s)^{\left(\frac{1-b}{k}\right)} \quad (2.105)$$

y la amplitud de transición:

$$I_n(p) = -\frac{4\pi ie^2}{\hbar\omega^2} \left(\frac{\omega A_0 A_k^* \Gamma(4)}{3i[\Gamma(2 + ib/k)]} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \bar{v} \cdot \bar{R} \int_0^1 ds s^{\left(\frac{1+b}{k}\right)} \times (1-s)^{\left(\frac{1-b}{k}\right)} [Z_1 \alpha^2 \exp(-\zeta\alpha R) + Z_2 \beta^2 \exp(-\zeta\beta R)] \quad (2.106)$$

con $\zeta = b + ik(1 - 2s)$. En el límite adiabático, cuando la ionización se da para distancias internucleares que son mucho más pequeñas que $1/b$, se tiene que $|\zeta|R \ll 1$ y la siguiente aproximación es válida:

$$Z_1 \alpha^2 \exp(-\zeta\alpha R) + Z_2 \beta^2 \exp(-\zeta\beta R) \approx (Z_1 \alpha^2 + Z_2 \beta^2) \left[1 - \left(\frac{Z_1 \alpha^3 + Z_2 \beta^3}{Z_1 \alpha^2 + Z_2 \beta^2} \right) \zeta R \right] \approx (Z_1 \alpha^2 + Z_2 \beta^2) \exp(-\zeta \phi R) \quad (2.107)$$

donde

$$\phi = \frac{Z_1 \alpha^3 + Z_2 \beta^3}{Z_1 \alpha^2 + Z_2 \beta^2} = \frac{\alpha}{\Lambda} \quad (2.108)$$

con

$$\Lambda = \frac{1 + \gamma g(\xi)}{1 + \gamma^2 g(\xi)}. \quad (2.109)$$

Al introducir la aproximación (2.107) en la ecuación (2.106), la amplitud de transición puede reescribirse como:

$$I_n(p) = \left(\frac{\alpha^2}{\phi^3} (1 + \gamma g(\xi)) \right) \left(-\frac{4\pi ie^2}{\hbar\omega^2} (\phi^3 Z_1) \int dt \exp(i\omega t) (\phi \bar{v}) \cdot \bar{J}(\phi \bar{R}) \right). \quad (2.110)$$

Entonces, la amplitud de Briggs de dos términos se redujo a una sola integral, que formalmente equivale a la amplitud típica de un centro en la SCA, con el parámetro adicional de escalamiento ϕ y el factor multiplicativo dentro del primer par de brackets. La sección eficaz de ionización del MO $1s\sigma$ puede entonces evaluarse a partir de los resultados ya conocidos de la SCA, simplemente se hacen las siguientes sustituciones:

$Z_1 \rightarrow \phi^j Z_1$, $\nu \rightarrow \phi\nu$, $p \rightarrow \phi p$. Sin embargo Z_T reemplaza a Z_{2K} en las funciones de onda electrónicas.

Se llega entonces a la expresión para la sección eficaz de ionización en la forma:

$$\sigma_{1s\sigma} = \Lambda^6 (1 + \gamma g(\xi))^2 \frac{\sigma_{0K}}{\theta} F(\xi_B / \Lambda) F_* \quad (2.111)$$

siendo

$$F_* = \left(\frac{2\pi dq_0}{\exp(2\pi dq_0) - 1} \right) \left(1 + \frac{5}{14} \frac{dq_0 \Lambda}{\xi_B} \right)^{-1} \quad (2.112)$$

el factor modificado de Coulomb y $F(\xi_B/\Lambda)$ es el primer término de la expansión en series de potencias de la sección reducida [62]. La extensión para valores más grandes del parámetro (ξ_B/Λ) puede hacerse por medio de la función universal aproximada de Brandt y Lapicki [48]:

$$F(x) = \frac{2^9}{45} x^8 (1 + 1.72x^2)^{-4} \quad (2.113)$$

Los parámetros σ_{0K} , ξ_B , dq_0 y $\bar{\theta}$ son redefiniciones de aquéllos utilizados comúnmente en la teoría de ionización de la capa K [65], denotados por: $\sigma_{0K} = 8\pi \alpha_0^2 Z_1^2 / Z_1^2 / Z_{2K}^4$, $\xi_B = 2\sqrt{\eta} / \bar{\theta}$, $dq_0 = 4Z_1(Z_2 / Z_{2K}) (m / M) / \bar{\theta}^2 \xi_B^3$, $\bar{\theta} = \theta(Z_T) / \alpha^2$. M es la masa reducida del sistema, m la masa del electrón. Los parámetros η y ξ fueron definidos antes. Todas estas definiciones son válidas en la aproximación $\alpha Z_T / Z_{2K} \approx 1$.

Los resultados anteriores fueron obtenidos empleando funciones de onda hidrogenoides no relativistas. En la región adiabática los efectos relativistas deben tomarse en cuenta para

evaluar la sección eficaz. De acuerdo con [10] el parámetro ξ_B debe ser reemplazado por $\xi_{BR} = 2\sqrt{\eta_R / \bar{\theta}}$, donde $\eta_R = \left[(1 + 1.1y^2)^{1/2} + y \right] \eta$. El parámetro y está dado por $y = 0.4(Z_{2K} / 137)^2 \Lambda / \xi_B \alpha^2$, debido al escalamiento antes mencionado y también porque se utiliza la carga nuclear Z_T para describir al electrón activo. Entonces la expresión (2.111) se convierte en:

$$\sigma_{1\alpha}^R = \Lambda^6 (1 + \gamma g(\xi))^2 \frac{\sigma_{0K}}{\bar{\theta}} F(\xi_{BR} / \Lambda) F_c \quad (2.114)$$

Capítulo 3

DESARROLLO EXPERIMENTAL

En este Capítulo se describe el funcionamiento de los principales componentes del dispositivo experimental utilizado para hacer las mediciones de secciones eficaces de producción de rayos X. También se explican de manera general el procedimiento seguido para llevar a cabo los experimentos y la reducción de resultados experimentales a datos fácilmente manejables.

1. Dispositivo Experimental

1.1 Funcionamiento del Acelerador Pelletron

Para realizar las mediciones de secciones eficaces de producción de rayos X se utilizó un acelerador de tipo *Tandem* denominado *Pelletron* (modelo 9SDH-2 de National Electrostatic Corp.), en el que se puede utilizar casi cualquier tipo de ion como proyectil. La terminal de este acelerador permite obtener potenciales de hasta 3 MV. Una descripción detallada del funcionamiento de este tipo de acelerador se puede encontrar en [67]. A continuación se describe brevemente el modo en que dicho acelerador opera.

La principal diferencia del acelerador Pelletron con respecto a los aceleradores Van de Graaff convencionales es que se utiliza un nuevo sistema de carga, en el que en lugar de emplear la tradicional banda aislante ahora se reemplaza dicha banda por una cadena que consiste de pequeños cilindros metálicos, con orillas cuidadosamente redondeadas, unidos por juntas plásticas. Estas juntas giran en sistemas auto lubricantes que no requieren ser aceitados. Cadenas de este tipo permiten hasta 14,000 hr de operación. En algunos aceleradores más recientes la vida de la cadena ha sido mayor de 40,000 hr.

En la figura 3.1 se muestra el principio de operación del sistema de carga del Pelletron. Viajando sobre la primera polea P_1 , los cilindros de la cadena entran a la zona de interacción del inductor I_1 , el cual se encuentra energizado por el potencial $-V$; como

resultado se induce una carga $+q$ en los cilindros. La forma de los inductores y ranuras es la misma para toda la cadena. La carga es entonces transmitida del cilindro a la polea p_1 , cuyo potencial se incrementa hasta $+V$; entonces la carga es transferida a la polea auxiliar P_2 , en la cual el potencial es $N + V$. El inductor I_5 , cuyo potencial es $N + V$ y que se encuentra conectado a esa polea, induce una carga $-q$ en cada uno de los cilindros que se mueve de regreso. Las cargas negativas son entonces transferidas a la polea p_3 , cargándola hasta el potencial $N - V$. Bajo la influencia de ese potencial en la polea, el inductor I_4 , que está conectado a ella, carga los cilindros de la polea al entrar en su región de interacción. De esta manera se previene una descarga. El inductor I_6 , al operar con un potencial $+V$, neutraliza la carga en el cilindro que se mueve de regreso, ayudando también a prevenir descargas.

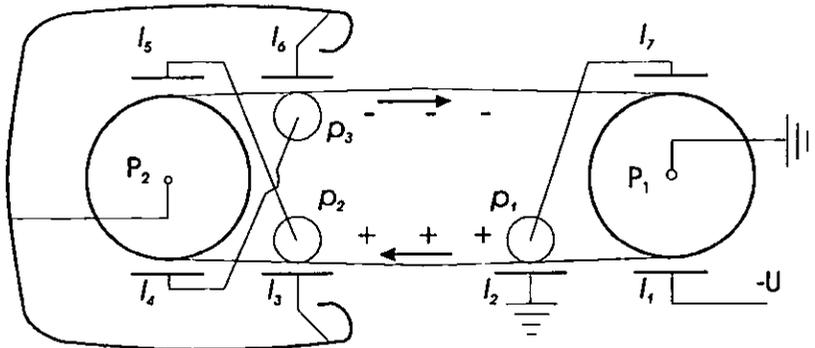


Figura 3.1.: Esquema del sistema de carga de un acelerador Pelletron.

Las cadenas de tipo Pelletron se pueden mover a velocidades cercanas a 15 m/s. En una atmósfera de SF_6 bajo una presión de 6 atm una sola cadena puede transportar hasta $75 \mu A$ en cada dirección, es decir, un total de $150 \mu A$. Dado que hay 27 cilindros por cada metro de cadena, a esta velocidad lineal tenemos 405 cilindros viajando a través de cada inductor durante cada segundo. Se pueden emplear varias cadenas paralelas para aumentar la capacidad de corriente. En el caso del acelerador Pelletron modelo 9SDH-2 del IFUNAM se cuenta con dos cadenas paralelas.

Como se mencionó antes el acelerador empleado es de tipo Tandem; esto quiere decir que el proceso de aceleración se realiza en más de una etapa. Los principios de aceleración de

iones en múltiples etapas por variación de carga fueron propuestos en la década de los 30's por el científico americano Dempster y por los científicos alemanes Gerthsen y Peter.

En la figura 3.2 se muestra el principio de operación de un acelerador de dos etapas, conocido comúnmente como Tandem. Un haz de iones positivos se produce en una fuente al exterior del acelerador. Este haz pasa a través de un canal en el que se tiene gas a baja presión; la interacción de los iones con el gas produce iones negativos por adición de electrones. El haz de iones negativos es entonces dirigido a un imán analizador que permite seleccionar los iones con una razón q/m dada. Después los iones son inyectados en el tubo acelerador, cuya sección inicial se encuentra aterrizada. La terminal de alto voltaje, que se encuentra al otro lado del tubo acelerador, en este caso tiene un potencial positivo del orden de algunos MV. Los iones son acelerados entonces hasta obtener una energía correspondiente al valor de este potencial, y entonces mientras pasan a través de un canal *stripping* en la parte media del acelerador pierden electrones y se convierten en iones positivos. El *stripper* utilizado en este caso es nitrógeno (N_2). Después de la conversión a iones positivos, el haz es acelerado nuevamente hasta una energía correspondiente al potencial en la terminal de alto voltaje; la salida del tubo acelerador también se encuentra aterrizada. El mismo voltaje V_0 es entonces utilizado dos veces para darle a las partículas mayor energía durante el proceso.

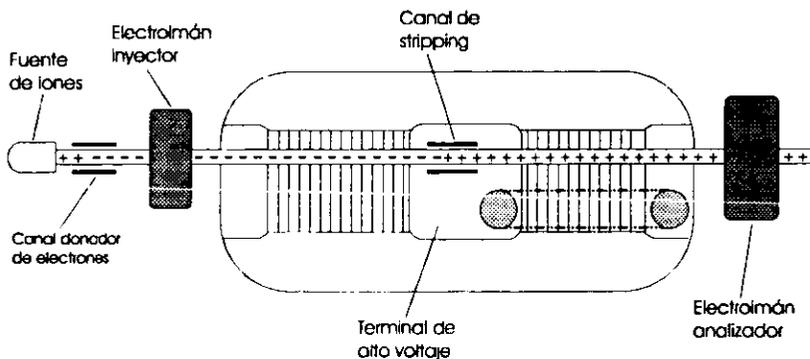


Figura 3.2.: Principio de operación de un acelerador tandem.

Las energías que se pueden lograr dependen del grado de ionización n de los iones acelerados (este coeficiente, que determina la carga del ion $q = n \times e$ en teoría puede llegar a

ser igual al número atómico en el caso extremo). La máxima energía que se puede obtener en un acelerador Tándem está entonces dada por la relación:

$$E_{max} = V_0(1 + q) \quad (3.1)$$

Además hay que considerar 50 keV adicionales, producto del proceso de inyección desde la fuente al tubo acelerador.

En los experimentos realizados en este trabajo se utilizó un haz de $^{12}\text{C}^{4+}$ cuyas energías variaban entre 6 MeV y 9 MeV, obteniéndose corrientes entre 10 μA y 60 μA .

1.2 Cámara de Análisis

Como no se contaba con una cámara de análisis con la geometría adecuada para realizar los experimentos en el acelerador Pelletron, fue necesario construir una nueva línea dedicada al análisis con PIXE. El diseño y construcción de dicha línea se apegó tanto como fue posible al diseño original de las otras líneas del Pelletron. Esto con el fin de garantizar compatibilidad entre los dispositivos controladores y disponibilidad de refacciones en caso necesario.

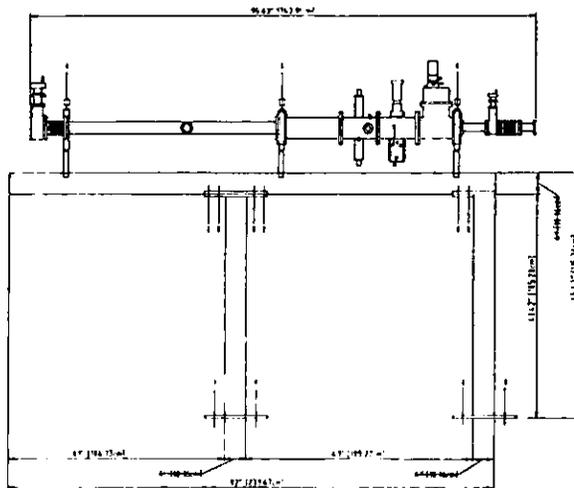


Figura 3.3: Esquema de la línea PIXE construida.

La línea se encuentra a 30° con respecto al acelerador. Y está constituida de la siguiente forma (ver figura 3.3): inmediatamente después de la salida del electroimán analizador del

acelerador se tiene una válvula electroneumática de cortina modelo GV2500-P de MDC Vacuum Products Corp.; después se colocó un fuelle para permitir una alineación más fácil de la línea con respecto al acelerador; a continuación se tiene un tramo de tubo de acero inoxidable de 1 m de largo en T; la derivación de este tramo puede emplearse para bombeo de apoyo, pruebas de fuga o venteo de la línea; más adelante se cambia el diámetro de la línea mediante un adaptador y se tiene otro tramo de tubo de aproximadamente 50 cm; después de este vienen los dispositivos de control del haz, que son juego de rejillas manuales modelo BDSM-8, monitor de perfil de haz modelo BPM-80 y caja de Faraday modelo FC-16P, todos ellos de NEC; justo antes de la cámara se cuenta con otra válvula electroneumática de cortina modelo GV-1500V-P de MDC Vacuum Products Corp. y otro fuelle, para permitir alinear la cámara con la línea y con el resto del acelerador; finalmente se tiene la cámara, que se encuentra aislada del resto de la línea mediante un tramo de Nylon, para poder integrar la corriente en la misma.

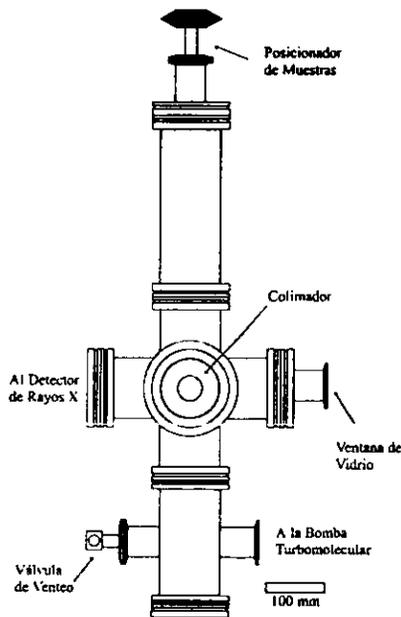


Figura 3.4.: Vista lateral de la cámara de análisis empleada en los experimentos.

Para realizar los experimentos se utilizó una cámara de análisis provisional, construida con base en una cruz de acero inoxidable marca MDC Vacuum Prod. El vacío que se puede

obtener en la cámara de análisis va de 10^5 torr hasta 10^6 torr, mediante una bomba turbomolecular Alcatel modelo PTM-5101. El vacío se mide mediante un controlador de válvulas de vacío Granville-Phillips modelo 307, utilizando un arreglo de dos termopares y dos medidores iónicos.

Debido a la geometría que se tiene en esta cámara provisional se pueden hacer hasta tres tipos de análisis diferentes sobre una misma muestra: PIXE, RBS y PESA. La disposición de los detectores se muestra en la figura 3.5.

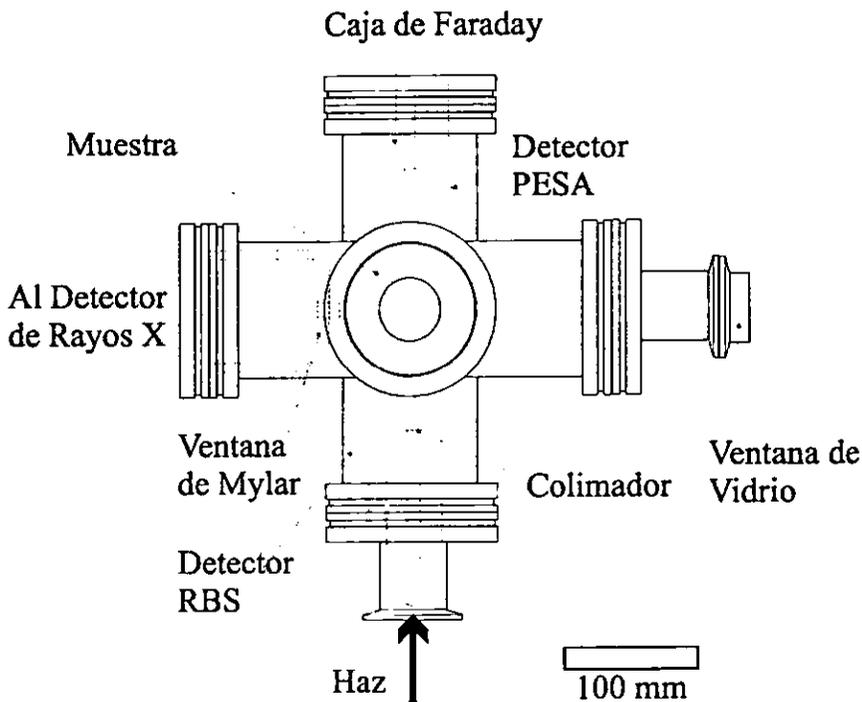


Figura 3.5.: Vista superior de la cámara de análisis. Se puede apreciar la disposición de los detectores empleados para los diferentes tipos de análisis.

1.3 Detector de Rayos X

Se utilizó un detector de Ge de alta pureza para baja energía (LEGe) marca Canberra modelo GL0055P para medir los rayos X producidos. Las especificaciones de dicho detector, según el fabricante, son:

- 50 mm² de área
- 5 mm de espesor
- 5 μm de espesor de la ventana de Be
- resolución de 155 eV FWHM a 5.9 keV.

Es necesario conocer la eficiencia absoluta del detector para tener una cuantificación exacta de los rayos X producidos en el blanco. Para realizar la calibración de dicho detector se utilizaron películas delgadas (~ 50 μg/cm²) MicroMatter, evaporadas sobre Mylar. También se utilizaron algunos de los blancos empleados para la medición de secciones con el fin de comparar los resultados. Las películas fueron bombardeadas con protones de entre 1.5 MeV y 2.5 MeV; debido a que se tuvieron que realizar varias caracterizaciones, ya que se cambiaba la posición del detector al ser utilizado para otros experimentos.

La eficiencia se determinó a partir de las ecuaciones (1.16), (1.19). Las $\sigma_K(E_0)$ se obtuvieron de las tablas de *secciones de referencia* de Paul y Sacher [68]. Las $\sigma_R(E_0)$ se calculan a partir de la fórmula de Rutherford [69]. Los valores para ω_K se tomaron de las tablas de Krause [70] y los de f se obtuvieron a partir de las razones de las intensidades K_α / K_β de Khan y Karimi [71].

Las curvas de eficiencia obtenidas se muestran en las figuras 3.6, 3.7 y 3.8. Se utilizó la función analítica de Gallagher y Cipolla [72] en su región de baja energía ajustada a los valores experimentales de la eficiencia dada por:

$$\varepsilon(E_X) = \frac{\Omega'}{4\pi} \exp\{-\alpha' E_X^{-\beta'}\}, \quad (3.2)$$

los parámetros Ω' , α' y β' fueron determinados por medio de un ajuste por mínimos cuadrados no lineales. Es necesario tomar en cuenta que el borde de absorción del germanio queda dentro de la región estudiada, por lo que para los elementos cercanos al Ge es más conveniente utilizar una *eficiencia puntual* en lugar de utilizar la expresión anterior.

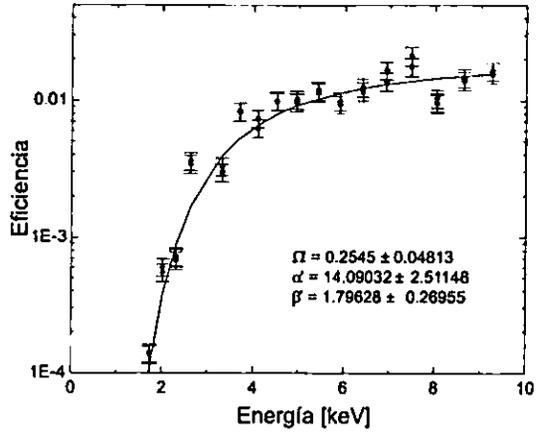


Figura 3.6.: Eficiencia del detector de Rayos X para la 1ª serie de experimentos.

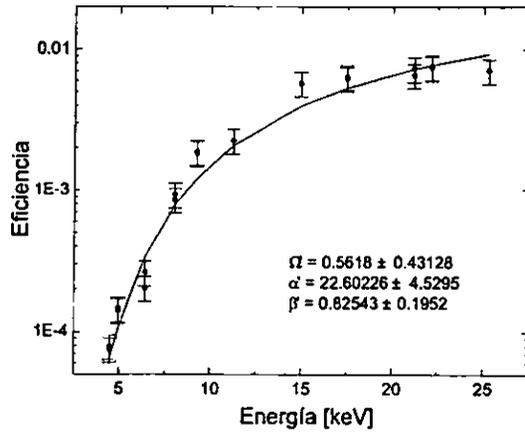


Figura 3.7.: Eficiencia del detector de Rayos X para la 2ª serie de experimentos.

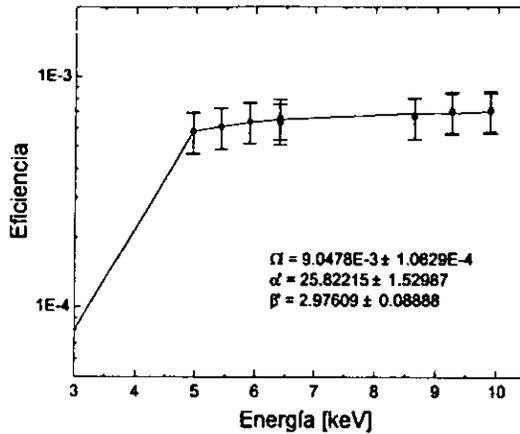


Figura 3.8: Eficiencia del detector de Rayos X para la 3ª serie de experimentos.

1.4 Detector de Partículas

Para detectar los iones retrodispersados o transmitidos se utilizaron detectores de partículas PIPS Canberra modelo PD-25-12-100, con las siguientes características:

- 50 mm² de área activa
- resolución de 12 keV para α
- espesor mínimo de agotamiento de 100 μ m

Este tipo de detectores presentan algunas ventajas con respecto a los antiguos detectores de barrera superficial como: la corriente de fuga es muy pequeña, eficiencia mejorada de conteo, ya que se minimiza la distancia del detector de silicio al borde del contenedor (0.9 mm); se pueden calentar hasta 100 °C; la ventana de entrada puede limpiarse fácilmente; tienen un fondo pequeño, típicamente menos de 0.05 cuentas/hr/cm en el intervalo de energía de 3 MeV a 8 MeV.

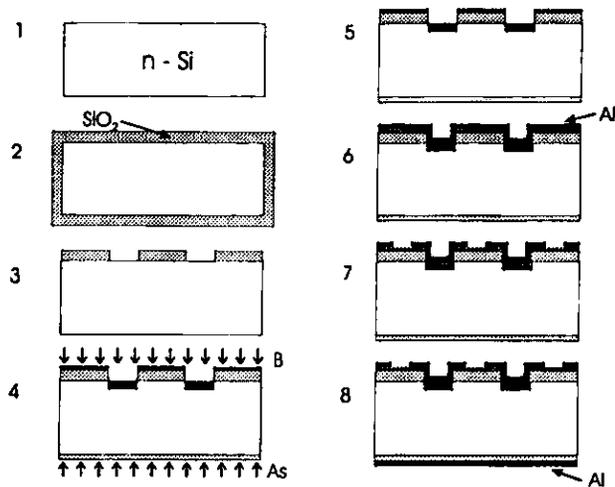


Figura 3.9.: Proceso de fabricación de un detector PIPS.

El proceso de manufactura (ver figura 3.9) de estos detectores incluye implantación de iones y se realiza con la tecnología típica de producción de circuitos integrados por medio de fotolitografía en óxido de silicio de alta calidad. La implantación de iones permite juntas abruptas con bordes bien definidos de manera que se tienen un fondo pequeño y una baja corriente de fuga.

2. Medición de las Secciones Eficaces de Producción de Rayos X K

Para realizar las mediciones de secciones eficaces de producción de rayos X se utilizó el dispositivo experimental antes descrito (ver figuras 3.4 y 3.5). Un haz de $^{12}\text{C}^{4+}$ atravesaba un colimador de 2 mm de diámetro e incide a 45° de la normal al blanco.

Los rayos X producidos fueron registrados por el detector de rayos X de LEGe antes descrito. Este detector se encuentra perpendicular al haz y a 45° de la normal del blanco. Las señales producidas por este detector se procesan mediante un amplificador Canberra modelo 2026. Los pulsos se registran mediante una tarjeta multicanal PCA-3 Oxford, para PC. La resolución medida para el sistema de detección de rayos X fue de 160 eV FWHM para la línea de Mn K_α de 5.9 keV. Los rayos X producidos en el blanco deben atravesar la ventana de Mylar de la cámara de 12 μm de espesor.

Para determinar el número de protones retrodispersados o transmitidos por la muestra se utilizó el detector de partículas PIPS antes mencionado. Este detector se colocó como se muestra en la figura 3.5, utilizando el tipo de geometría IBM[†]. Cuando el PIPS se empleaba para detectar los iones transmitidos se colocaba un colimador de 1 mm de diámetro, para evitar que dicho detector sufriera daños. El ángulo sólido que subtende el detector se midió directamente siendo éste de $1.4 \times 10^{-4} \pm 3.8 \times 10^{-4}$ sr en el caso del arreglo PESA y de $4.3 \times 10^{-3} \pm 1.1 \times 10^{-4}$ sr en el caso de RBS. La señal del detector PIPS era procesada por un amplificador Canberra modelo 2022. Los pulsos se registraban mediante la misma tarjeta multicanal PCA-3 al mismo tiempo que se colectaban los de rayos X, gracias a un multiplexor Oxford modelo DMR-108A, el cual puede llegar a manejar hasta 8 señales provenientes de igual número de detectores diferentes con la misma tarjeta multicanal PCA-3.

Los espectros PESA o RBS eran utilizados como una integración absoluta de la carga que era acumulada en la muestra (ver ecuación (1.19)), de manera que las mediciones de secciones eficaces eran también absolutas y no fue necesario renormalizarlas.

Las películas fueron hechas por evaporación de los elementos seleccionados sobre substratos de grafito, esto con el fin de evitar retrodispersión del mismo haz. Se procuró que fueran lo suficientemente delgadas para poder aplicar las aproximaciones de película delgada antes mencionadas. Aunque en algunos casos fueron un poco más gruesas de lo esperado, para estas películas se aplicó la corrección por atenuamiento en los resultados obtenidos.

El procedimiento que se seguía durante los experimentos es el siguiente: primero se eligieron el haz ($^{12}\text{C}^{4+}$) y el intervalo en el que la energía podía variar, este fue de 6 MeV a 9 MeV, que para $^{12}\text{C}^{4+}$ equivale a ir de 0.5 MeV/uma hasta 0.75 MeV/uma; se seleccionaban algunas de las películas y eran bombardeadas, obteniéndose simultáneamente los espectros de rayos X y de iones retrodispersados; una vez que toda la serie de películas era bombardeada a cierta energía ésta última se variaba en pasos de 0.5 MeV; el procedimiento se repetía hasta barrer todo el intervalo de energía seleccionado. La calibración del detector

[†] En esta geometría la normal a la muestra es coplanar tanto con el detector de partículas como con el haz de iones.

de rayos X se hacía como se mencionó antes, al principio o final de los experimentos y cuidando que las condiciones en las que se encontraba el detector fueran las mismas que las tenidas durante la serie correspondiente de experimentos. En las figuras 3.10 y 3.11 se muestran espectros típicos obtenidos durante los experimentos.

Una vez que se obtenían los espectros de rayos X y de iones retrodispersados, éstos eran analizados utilizando programas de cómputo para obtener las áreas de los picos de interés. En el caso de los espectros de rayos X se utilizó el programa AXIL [73] y para el caso de los espectros de RBS se utilizó el programa RUMP[74, 75].

Ya que se tienen estos resultados simplemente se sustituyen en la ecuación (1.16), junto con los otros parámetros (eficiencia, fluorescencias y cocientes K_{β}/K_{α}) y se obtienen entonces las secciones eficaces de producción de rayos X buscadas $\sigma_Z(E)$.

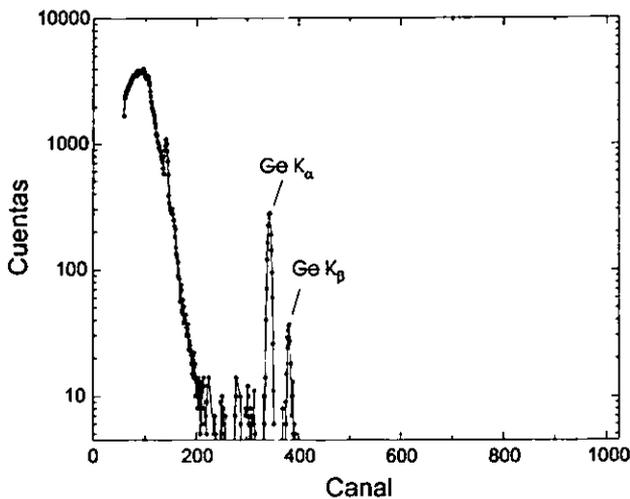


Figura 3.10.: Espectro de PIXE. Corresponde a $^{12}\text{C}^{+4} \rightarrow \text{Ge}$. La energía de bombardeo es 9 MeV.

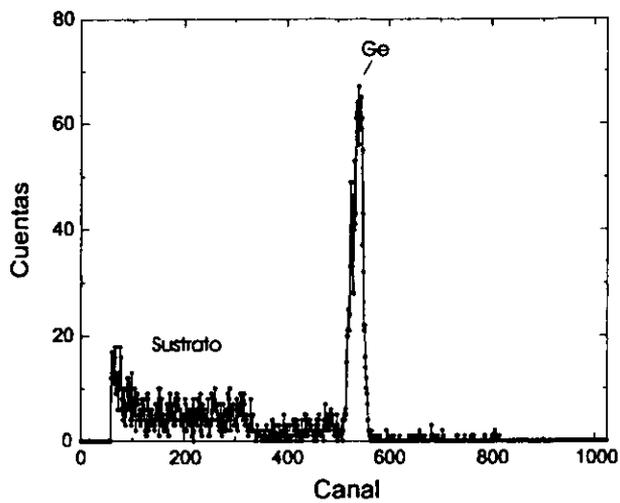


Figura 3.11.: Espectro de RBS. Corresponde a $^{12}\text{C}^{4+} \rightarrow \text{Ge}$. La energía de bombardeo es 9 MeV.

ANÁLISIS DE RESULTADOS

En este capítulo se muestran las secciones eficaces de producción de rayos X K y las secciones eficaces de ionización de la capa K medidas, se hace una discusión acerca de los parámetros que fueron ajustados para realizar los cálculos con la teoría MECPSR y se comparan los resultados experimentales obtenidos en este trabajo, las predicciones de las teorías MECPSR y MO directo y resultados experimentales anteriores. También se hace una comparación general entre todos los resultados en función de variables de interés.

1. Secciones Eficaces de Producción de Rayos X K

En la siguiente tabla se presentan las secciones eficaces de producción de rayos X K inducidos por iones de ¹²C sobre los elementos indicados.

Tabla 4.1.: Secciones eficaces de producción de rayos X medidas.

Azufre			Galio		
Energía [MeV]	Sección [barns]	Incertidumbre %	Energía [MeV]	Sección [barns]	Incertidumbre %
6.0	2.46E+02	22	6.0	1.69E+00	18
7	5.75E+03	22	6.5	2.31E+00	18
8	3.46E+03	22	7.0	3.06E+00	18
8.0	1.53E+03	22	7.5	4.02E+00	18
8.5	8.65E+03	22	8.0	5.36E+00	18
Calcio			Germanio		
Energía [MeV]	Sección [barns]	Incertidumbre %	Energía [MeV]	Sección [barns]	Incertidumbre %
6.0	2.07E+01	17	6.0	1.11E+00	16
7.0	2.62E+02	17	6.5	1.50E+00	16
7.5	2.77E+02	17	7.0	2.17E+00	16
8.0	1.53E+02	17	7.5	2.82E+00	16
8.5	2.72E+02	17	8.0	3.81E+00	16
9.0	3.65E+02	17	8.5	5.04E+00	16
			9.0	5.25E+00	16

Titanio		
Energía [MeV]	Sección [barns]	Incertidumbre %
6.0	2.44E+01	18
6.5	3.35E+01	18
7.0	4.38E+01	18
7.5	5.47E+01	18
8.0	7.91E+01	18
8.5	9.94E+01	18
9.0	1.32E+02	18

Paladio		
Energía [MeV]	Sección [barns]	Incertidumbre %
6.0	5.64E-02	16
6.5	8.40E-02	16
7.0	1.22E-01	16
7.5	1.60E-01	16
8.0	1.94E-01	16
8.5	2.28E-01	16
9.0	3.01E-01	16

Manganeso		
Energía [MeV]	Sección [barns]	Incertidumbre %
6.0	1.18E+01	16
6.5	1.65E+01	16
7.0	2.24E+01	16
7.5	2.77E+01	16
8.0	3.53E+01	16
8.5	4.40E+01	16
9.0	5.61E+01	16

Plata		
Energía [MeV]	Sección [barns]	Incertidumbre %
6.0	4.78E-02	16
6.5	7.22E-02	16
7.0	9.36E-02	16
7.5	1.20E-01	16
8.0	1.39E-01	16
8.5	1.76E-01	16
9.0	2.14E-01	16

Fierro		
Energía [MeV]	Sección [barns]	Incertidumbre %
6.0	7.22E+00	18
6.5	9.80E+00	18
7.0	1.27E+01	18
7.5	1.65E+01	18
8.0	2.04E+01	18
8.5	2.76E+01	18
9.0	3.33E+01	18

Indio		
Energía [MeV]	Sección [barns]	Incertidumbre %
6.0	3.54E-02	16
6.5	5.13E-02	16
7.5	9.68E-02	16
8.0	1.06E-01	16
8.5	1.17E-01	16
9.0	1.61E-01	16

Cobre		
Energía [MeV]	Sección [barns]	Incertidumbre %
6.0	1.17E+00	17
	1.02E+00	17
6.5	7.10E+00	17
7.0	1.10E+01	17
	6.84E+00	17
7.5	1.26E+01	17
	7.39E+00	17
8.0	1.01E+01	17
	3.93E+00	17
8.5	1.75E+01	17
	1.54E+01	17
	2.08E+01	17
9.0	2.53E+01	17
	4.25E+01	17

2. Ajuste de los Parámetros C_A y C_M

Para los primeros cálculos y resultados preliminares se utilizaron los parámetros C_A y C_M ajustados para bombardeo con ^{16}O publicados en [58]; pero se pudo observar que si se consideraban pequeñas variaciones de dichos parámetros, éstas provocaban cambios apreciables en la función definida por la ecuación (2.77), como se puede ver en las figuras 4.1 y 4.2. A partir de las figuras 4.30 y 4.28 se puede hacer una comparación general entre el comportamiento de la teoría MECPSSR, si se utilizan los coeficientes para ^{16}O reportados con anterioridad, y el comportamiento de dicha teoría, usando los parámetros obtenidos en este trabajo para el bombardeo con ^{12}C respectivamente.

Para ajustar los parámetros C_A y C_M definidos por la ecuación (2.81) se utilizó la prueba de la χ^2 para una función de distribución de tipo normal [76] de los cocientes de las secciones experimentales entre las secciones teóricas, dados por:

$$S_{TEO} = \frac{\sigma_K^{exp}}{\sigma_K^{TEO}} \quad (4.1)$$

donde σ_K^{TEO} corresponde a la sección eficaz de ionización de la capa K predicha por las teorías MECPSSR y MO directo en cada caso.

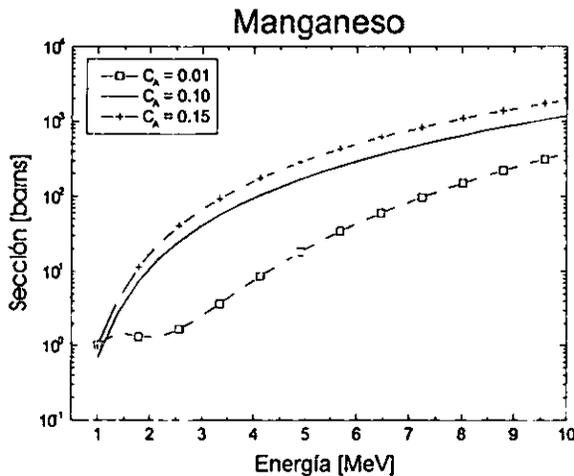


Figura 4.1.: Sección eficaz de ionización para bombardeo con iones de ^{12}C sobre Mn, predicha por la teoría MECPSSR para diferentes valores del coeficiente C_A .

Plata

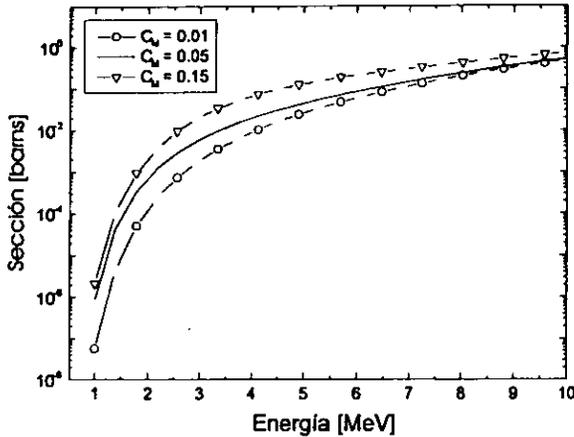


Figura 4.2.: Sección eficaz de ionización para bombardeo con iones de ^{12}C sobre Ag, predicha por la teoría MECPSSR para diferentes valores del coeficiente C_A .

Dicha distribución normal se supuso centrada en 1 y con una desviación típica de 0.1. Esta hipótesis es demasiado *fuerte*, de manera que nunca se pudo probar como verdadera. Sin embargo sí permitió minimizar los valores de χ^2 para la distribución antes mencionada, como se muestra en las figuras 4.3 y 4.4. El hecho de que se haya considerado la hipótesis de una distribución normal con las características antes mencionadas es razonable, porque suponiendo que la teoría fuera suficientemente *buena*, entonces uno esperaría que la distribución de los cocientes definidos por la ecuación (4.1) se encontrara centrada en 1, es decir, la teoría y los resultados experimentales deberían coincidir. Y además se esperaría que hubiera cierta dispersión debido a factores experimentales. No es posible evaluar directamente el tipo de distribución de los cocientes debido a que ésta depende fuertemente de los parámetros C_A y C_M seleccionados. Se hizo una adaptación del programa para calcular las secciones eficaces de ionización con la teoría MECPSSR de modo que permitiera calcular las cantidades estadísticas de interés y así ajustar los parámetros C_A y C_M , considerando que los *mejores* parámetros serían aquéllos para los cuales la χ^2 fuera mínima. Y se obtuvo que: $C_M = -0.09$ y $C_A = 0.28$.

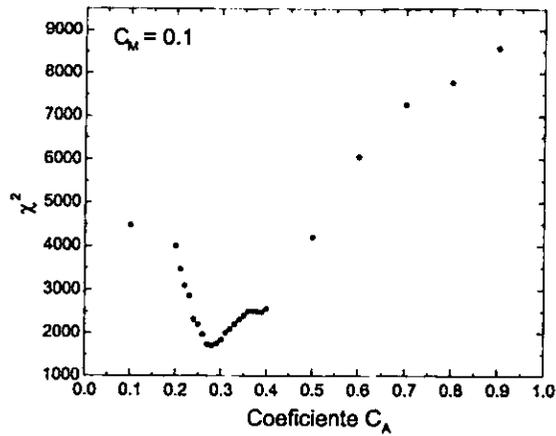


Figura 4.3.: Valor de χ^2 para la distribución graficada en la figura 4.28, en función del parámetro C_A considerando al parámetro C_M fijo e igual a 0.1. Se puede apreciar un mínimo para $0.25 < C_A < 0.3$.

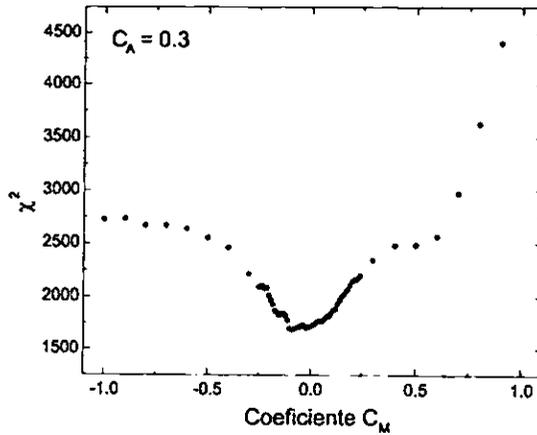


Figura 4.4.: Valor de χ^2 para la distribución graficada en la figura 4.28, en función del parámetro C_M considerando al parámetro C_A fijo e igual a 0.3. Se puede apreciar un mínimo cerca de $C_M = 0$ tal que $C_M < 0$.

3. Comparación entre las Secciones Eficaces de Ionización de la Capa K

Las secciones eficaces de ionización de la capa K obtenidas en este trabajo se muestran en las figuras 4.5 a 4.25. En cada caso se tiene una gráfica del intervalo de interés abarcado en este trabajo y una gráfica en la cual se muestra la posición de los resultados obtenidos con respecto a otras mediciones realizadas con anterioridad. Se grafica la sección eficaz de ionización de la capa K en función de la energía de bombardeo de los iones de $^{12}\text{C}^{4+}$, para cada uno de los elementos estudiados. Los resultados se comparan con las predicciones de la teoría ECPSSR con la corrección de MO (MECPSSR) y con la teoría de Perturbación Adiabática aplicada a la ionización del MO $1s\sigma$ por interacción coulombiana directa (MO directo). También se hace la comparación con resultados experimentales obtenidos por otros autores.

En los casos de S, Ca, Ti, Ga, y Pd los resultados obtenidos cubren un intervalo que no se había estudiado con anterioridad, aún cuando ya se tenían mediciones de secciones eficaces de producción de rayos X K para estos elementos. En el caso del In no se encontraron resultados anteriores reportados en la literatura con los cuales comparar.

Se puede observar que, salvo por un pequeño porcentaje, en general hay consistencia entre las teorías MECPSSR y MO directo. Aunque para las colisiones menos asimétricas, o sea, S, Ca y aún Ti la diferencia entre las predicciones de ambas teorías se incrementa, teniendo siempre los valores predichos por la MECPSSR por arriba de aquéllos predichos por la MO directo. A partir del Mn las predicciones de ambas teorías se encuentran muy próximas e incluso se observa que hay regiones donde ambas son prácticamente idénticas.

Al comparar los resultados obtenidos en este trabajo con los resultados anteriores se puede notar que concuerdan dentro del intervalo de incertidumbres para el caso de colisiones asimétricas, mientras que para colisiones simétricas nuestros resultados se encuentran por debajo de las mediciones anteriores y en los casos particulares de S y Ca nuestros resultados presentan una gran dispersión. Análisis posteriores mostraron que los sustratos se encontraban contaminados con S, por lo cual las mediciones de secciones eficaces para este elemento no son confiables.

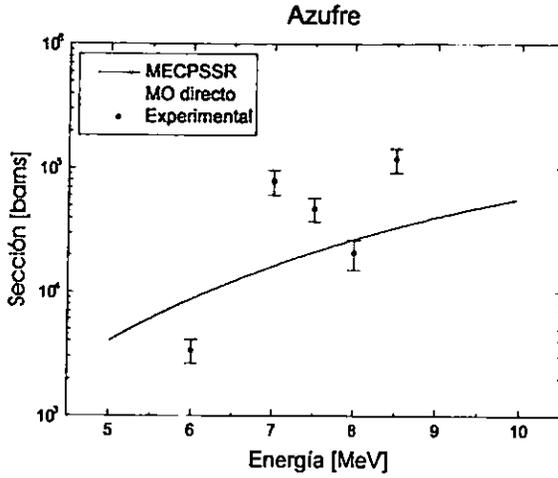


Figura 4.5.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en S en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo.

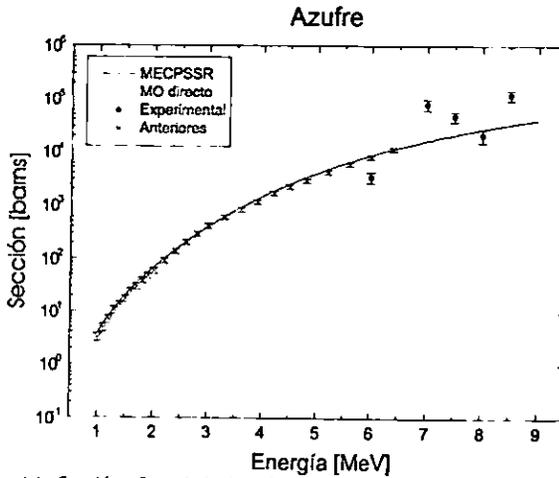


Figura 4.6.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en S en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo y con resultados publicados con anterioridad [77].

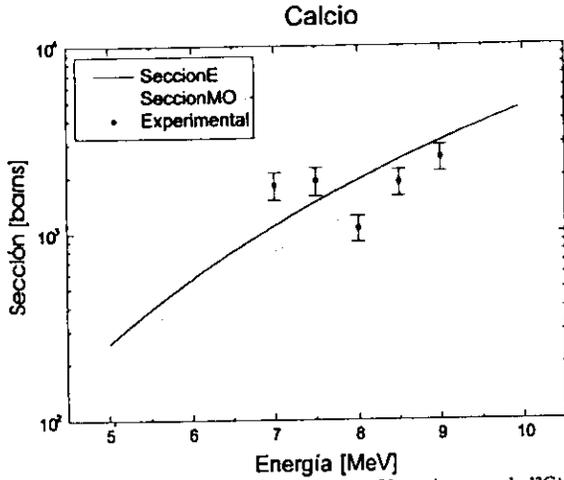


Figura 4.7.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en Ca en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo.

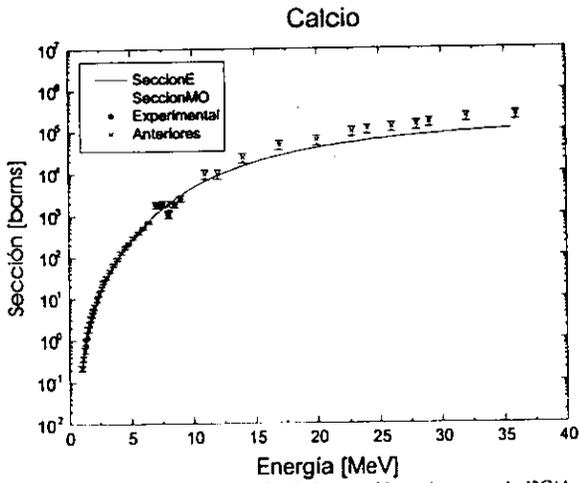


Figura 4.8.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en Ca en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo y con resultados publicados con anterioridad [78, 80].

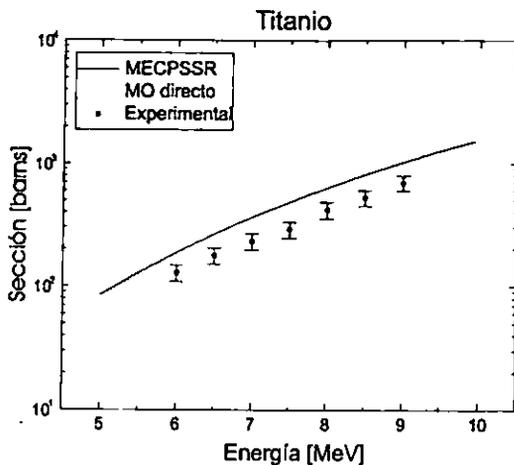


Figura 4.9.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{4+}$ en Ti en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo.

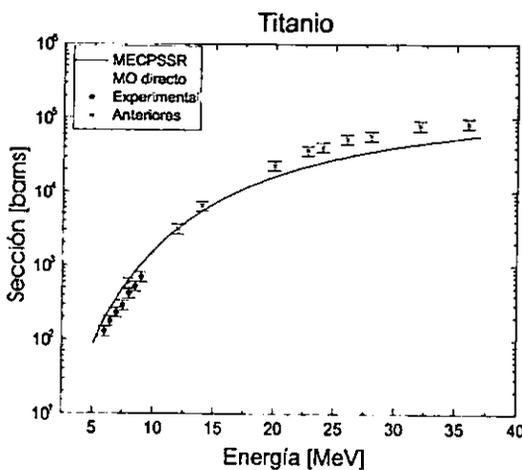


Figura 4.10.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{4+}$ en Ti en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo y con resultados publicados con anterioridad [80].

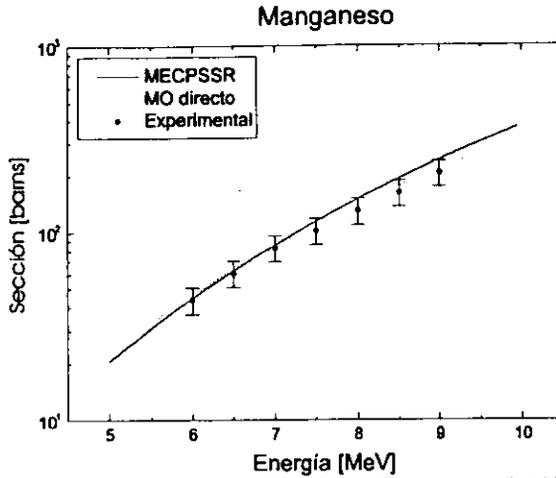


Figura 4.11.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en Mn en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo.

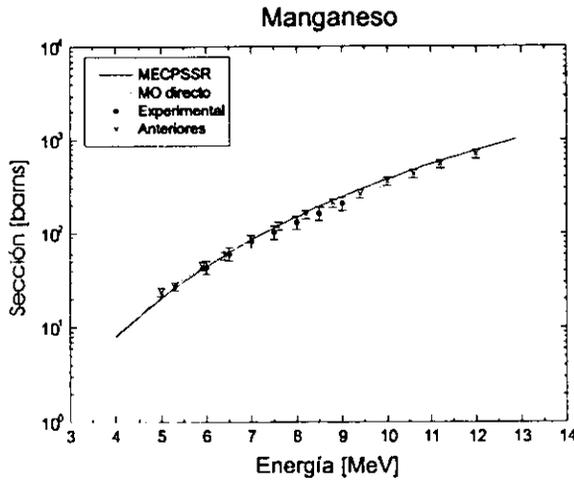


Figura 4.12.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en Mn en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo y con resultados publicados con anterioridad [79].

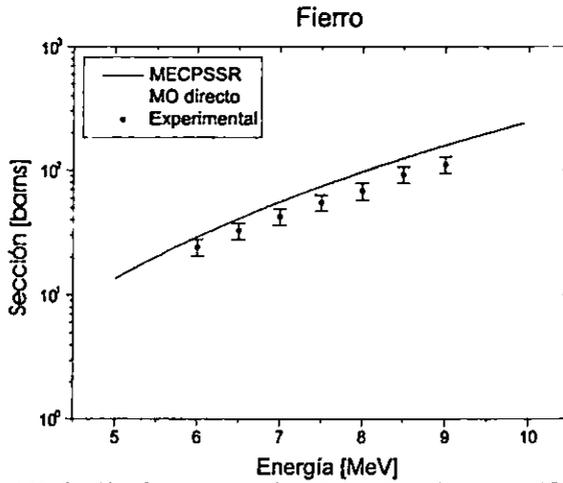


Figura 4.13.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en Fe en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo.

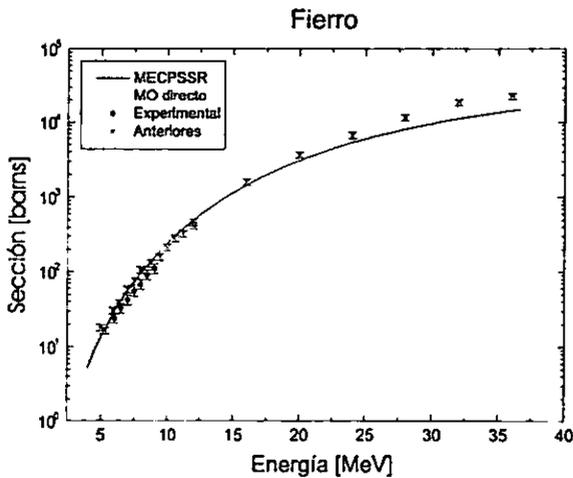


Figura 4.14.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en Fe en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo y con resultados publicados con anterioridad [79, 80].

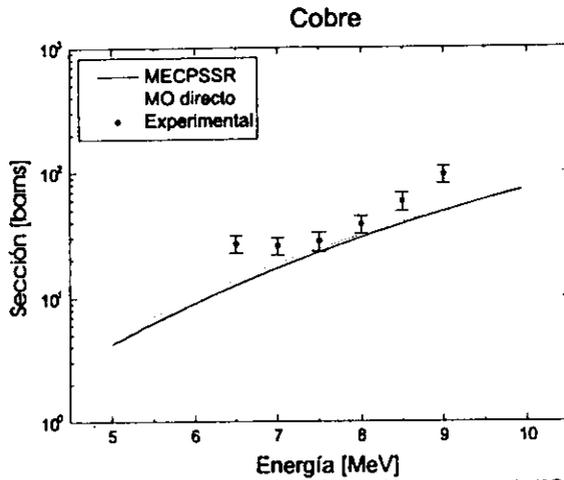


Figura 4.15.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{4+}$ en Cu en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo.

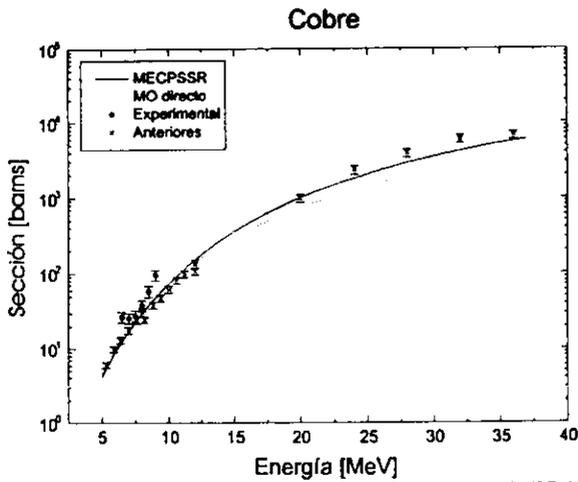


Figura 4.16.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{4+}$ en Cu en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo y con resultados publicados con anterioridad [79, 80].

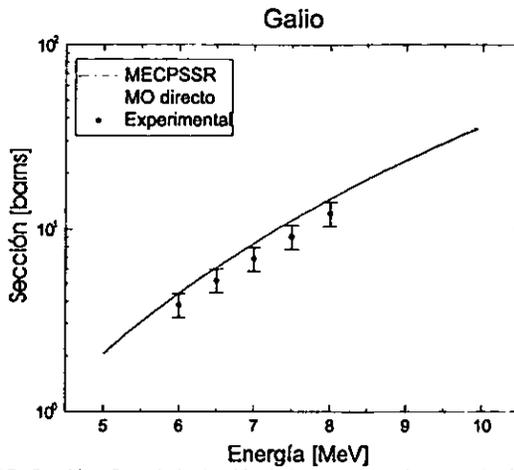


Figura 4.17.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en Ga en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSR y MO directo.

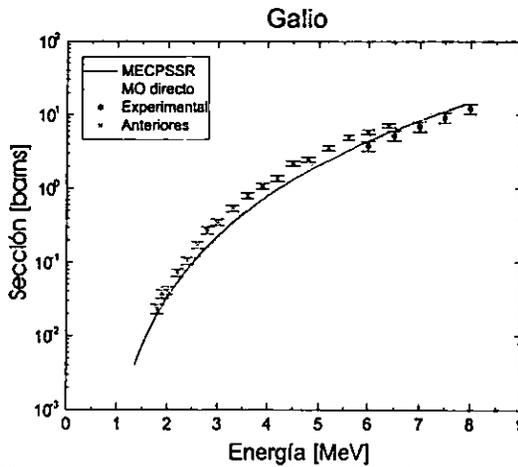


Figura 4.18.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en Ga en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSR y MO directo y con resultados publicados con anterioridad [78].

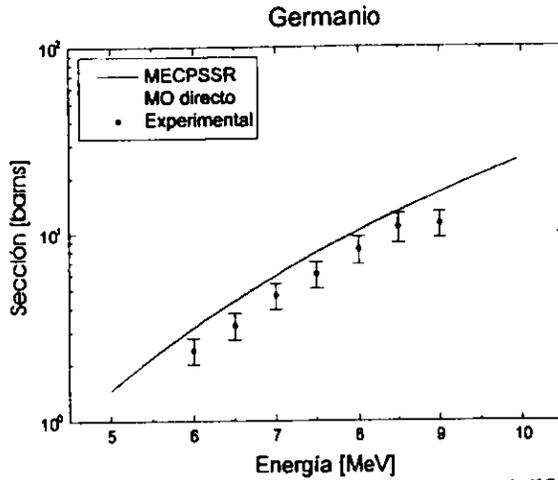


Figura 4.19.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en Ge en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo.

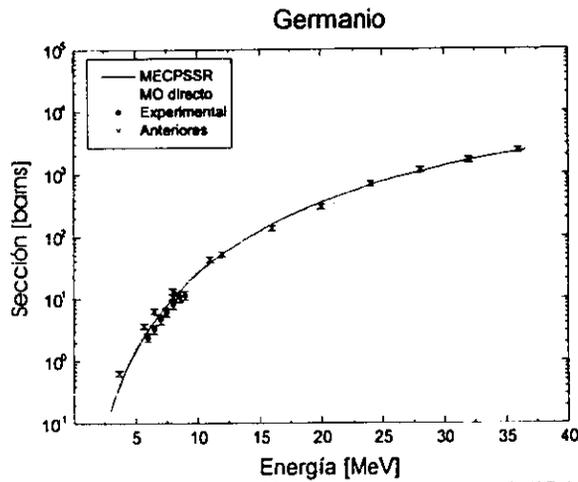


Figura 4.20.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en Ge en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo y con resultados publicados con anterioridad [80, 81].

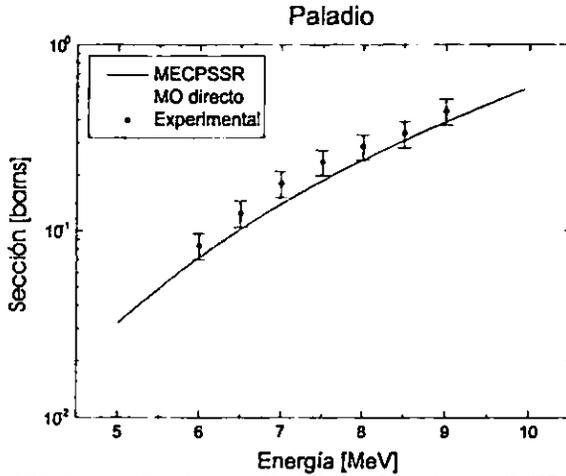


Figura 4.21.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en Pd en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo.

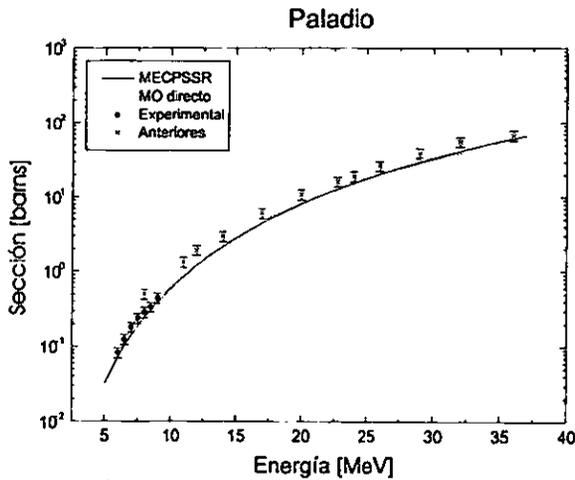


Figura 4.22.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en Pd en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo y con resultados publicados con anterioridad [80].

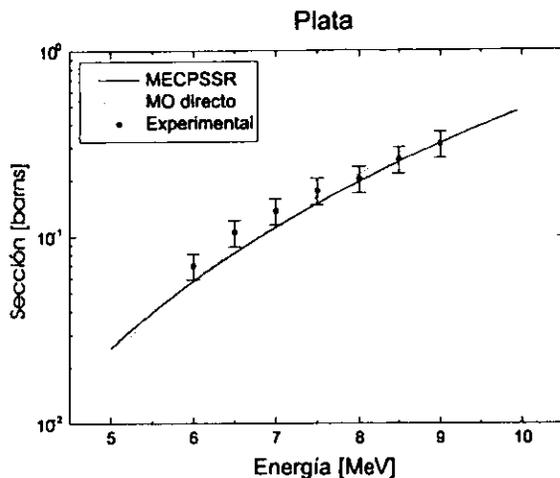


Figura 4.23.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en Ag en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo.

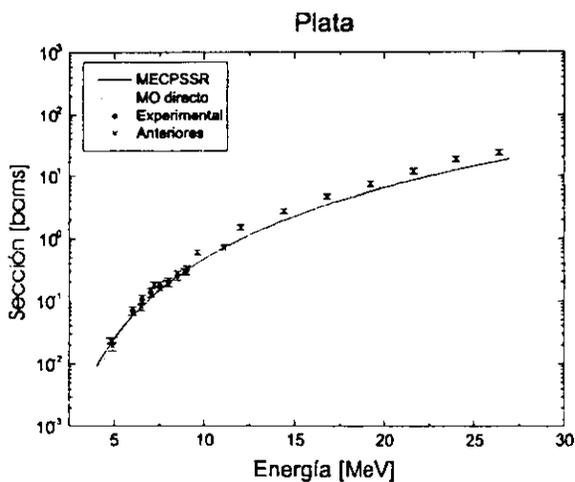


Figura 4.24.: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en Ag en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo y con resultados publicados con anterioridad [81, 82].

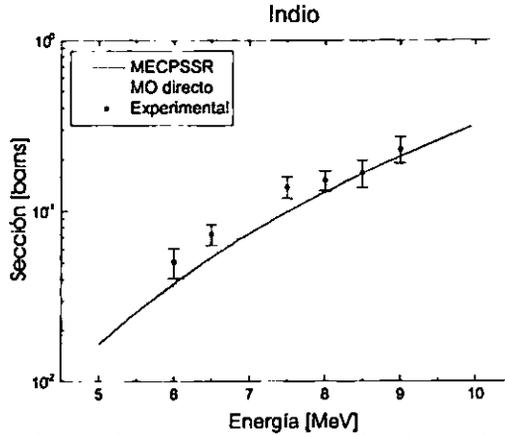


Figura 4.25: Sección eficaz de ionización de la capa K por impacto de $^{12}\text{C}^{+4}$ en In en función de la energía de bombardeo. Se comparan los resultados experimentales con las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo.

Con respecto a las incertidumbres experimentales calculadas, éstas van desde aproximadamente el 16% del valor informado, para casi todos los resultados, hasta aproximadamente el 22% (en los peores casos) del valor obtenido. La eficiencia del detector de rayos X es la principal contribuyente a dichas incertidumbres.

Para tener una idea más clara del comportamiento de los resultados experimentales en conjunto, se utilizaron los cocientes de las secciones experimentales entre las teóricas, definidos en la ecuación (4.1).

Estos cocientes se grafican en función de la velocidad relativista reducida ξ_K^R , definida en la sección 3.1 del capítulo 2.

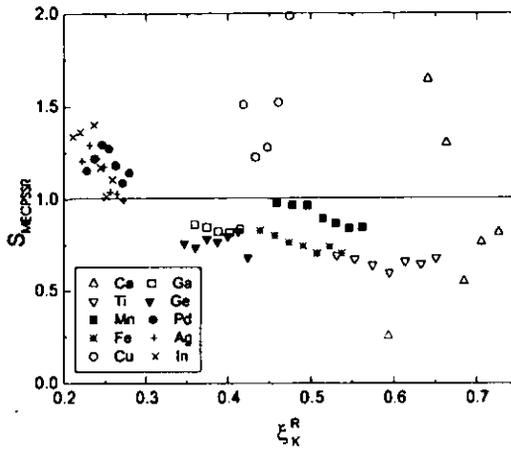


Figura 4.26.: Cocientes de las secciones eficaces de ionización medidas en este trabajo entre las predicciones obtenidas con la teoría MECPSSR, en función de la velocidad reducida ξ_K^R .

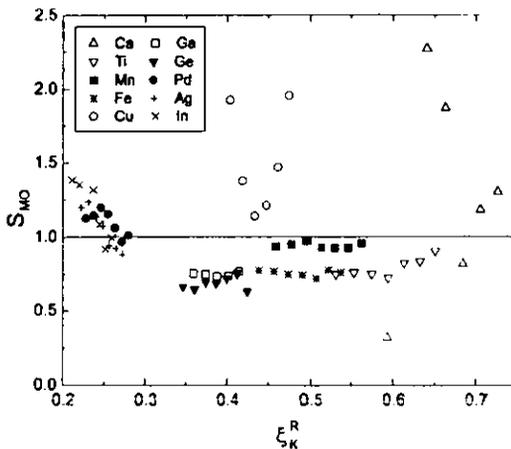


Figura 4.27.: Cocientes de las secciones eficaces de ionización medidas en este trabajo entre las predicciones obtenidas con la teoría MO directo, en función de la velocidad reducida ξ_K^R .

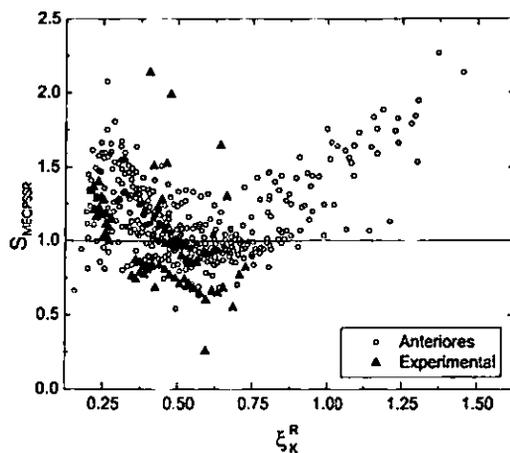


Figura 4.28: Cocientes de las secciones eficaces de ionización medidas en este trabajo y las publicadas con anterioridad entre las predicciones obtenidas con la teoría MECPPSSR, en función de la velocidad reducida ξ_K^R .

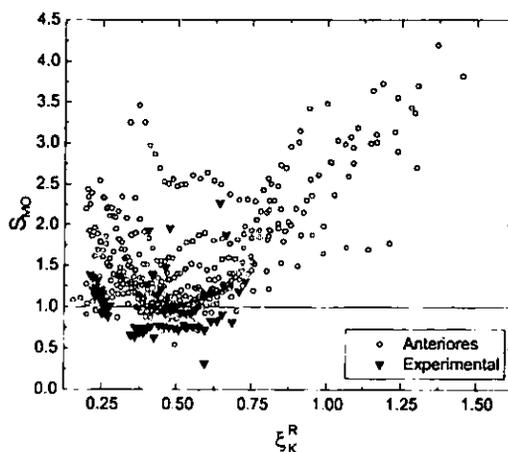


Figura 4.29: Cocientes de las secciones eficaces de ionización medidas en este trabajo y las publicadas con anterioridad entre las predicciones obtenidas con la teoría MO directo, en función de la velocidad reducida ξ_K^R .

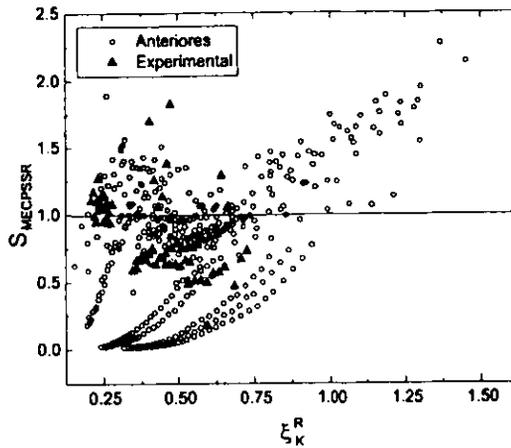


Figura 4.30.: Cocientes de las secciones eficaces de ionización medidas en este trabajo y las reportadas con anterioridad entre las predicciones obtenidas con la teoría MECPSSR utilizando los parámetros C_A y C_M de ^{16}O , en función de la velocidad reducida ξ_K^R .

En las figuras 4.26 y 4.27 se hace una comparación de los cocientes definidos por la ecuación (4.1) para los resultados obtenidos en este trabajo. Así mismo, en las figuras 4.28 y 4.29 se comparan todos los resultados experimentales reportados con anterioridad y los resultados de este trabajo. Se puede ver que en el caso de las predicciones de la teoría MECPSSR la teoría subestima el valor de la sección para energías pequeñas en colisiones no tan asimétricas, así como al tomar ξ_K^R valores cada vez más grandes. Se podría definir una región de validez para $0.4 < \xi_K^R < 0.9$, ya que es en ese intervalo donde los cocientes están más cercanos a 1. Por otra parte, las predicciones de la teoría MO directo subestiman el valor de la sección en la mayoría de los casos, de tal manera que S_{MO} parece formar un mínimo alrededor de $\xi_K^R = 0.5$, muy cercano a 1; por lo que también se podría hablar de una región de validez de esta teoría alrededor de este valor de ξ_K^R .

CONCLUSIONES

En el presente trabajo se obtuvieron mediciones de secciones eficaces de producción de rayos X K y de ionización de la capa K por incidencia de iones de $^{12}\text{C}^{+4}$, sobre blancos delgados de S, Ca, Ti, Mn, Fe, Cu, Ga, Ge, Pd, Ag, In. En algunos casos nuestras mediciones complementan los resultados reportados con anterioridad por otros autores. En el caso particular del In no se encontraron mediciones anteriores a las que se realizaron en este trabajo.

Se pudo comprobar que las secciones eficaces obtenidas en este trabajo son consistentes en la mayoría de los casos con las mediciones anteriores, dentro del intervalo de incertidumbre. Además también se observa consistencia, por lo menos en el intervalo estudiado, con los valores predichos por las teorías MECPSSR y MO directo.

Para el caso de la teoría MECPSSR se logró hacer un ajuste de los parámetros C_A y C_M con base en todo el conjunto de mediciones con el que se contaba; tanto mediciones de secciones eficaces publicadas en la literatura como los resultados obtenidos en este trabajo. No se ha encontrado que alguien más haya informado en la literatura otro ajuste de dichos parámetros además del trabajo realizado por O. Benka *et. al* [58] para el caso de incidencia de iones de ^{16}O .

Al comparar el comportamiento general de las predicciones de las teorías MECPSSR y MO directo con respecto a los resultados experimentales, en función de la velocidad reducida ξ_K^R , podemos ver que la forma que tienen los cocientes J_{TED} es similar, aunque en el caso de la teoría MO directo hay una mayor dispersión. En ambos casos parece haber un mínimo, cuyo valor es muy cercano a 1, el cual en principio debería corresponder a una región de validez, en la cual las teorías reproducen fielmente el comportamiento experimental. Esta región se ubica en el caso de la teoría MECPSSR aproximadamente en el intervalo $0.4 < \xi_K^R < 0.9$; para valores de ξ_K^R que se encuentran fuera de ese intervalo la teoría predice valores menores que los que se han medido. Para el caso de la teoría MO directo se observa que la región de validez

se da para valores cercanos a $\xi_K^R = 0.5$, aproximadamente se define un intervalo tal que $0.4 < \xi_K^R < 0.6$.

Para ambas teorías, se puede ver que las predicciones se encuentran, en la mayoría de los casos, por debajo de los resultados experimentales. Además, en el caso de colisiones no tan asimétricas los valores predichos por la teoría MECPSSR se encuentran siempre por arriba de los valores predichos por la teoría de MO directo. Al irse volviendo las colisiones más asimétricas estas discrepancias entre las teorías van desapareciendo, de manera tal que se observan regiones en las que ambas teorías son indistinguibles.

Cabe hacer mención que durante el desarrollo de este trabajo se diseñaron y construyeron una nueva línea y la respectiva cámara de análisis en el acelerador Pelletron, debido a que las ya existentes no contaban con la geometría requerida para el tipo de mediciones que nos interesaba hacer. Esta nueva línea presenta una geometría ideal para ser utilizada en el desarrollo de diferentes aplicaciones, como por ejemplo análisis con PIXE, RBS o PESA.

REFERENCIAS

- 1 D. H. Madison and E. Merzbacher, *Atomic Inner Shell Processes*, Vol.1, B. Crasemann Ed., (Academic Press, New York, 1975).
- 2 J. S. Briggs, *J. Phys.* **B8** (1975) L485.
- 3 S. A. E. Johansson, J. L. Campbell and K. Malmqvist Eds., *Particle Induced X-Ray Emission Spectrometry (PIXE)*. (Wiley, New York, 1995).
- 4 T. A. Cahill, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* **30** (1980) 211.
- 5 M. R. Khan and D. Crumpton, *CRC Crit. Rev. Anal. Chem.* **11** (1981) 161.
- 6 M. R. Khan and D. Crumpton, *CRC Crit. Rev. Anal. Chem.* **11** (1981) 101.
- 7 J. V. Mitchell and K. M. Bartfoot, *Nucl. Sci. Appl.* **1** (1981) 99.
- 8 S. A. E. Johansson and J. L. Campbell, *PIXE: A Novel Technique for Elemental Analysis*, (Wiley, Chichester, 1988)
- 9 W. Brandt and G. Lapicki, *Phys. Rev.* **A20** (1979) 465.
- 10 W. Brandt and G. Lapicki, *Phys. Rev.* **A23** (1981) 1717.
- 11 M. Budnar, A. Mühleisen, M. Hribar, H. Janzekovic', M. Ravnikar, Z. Smit, and M. Zitnik, *Nucl. Instr. Meth.* **B63** (1992) 377.
- 12 J. H. Scofield, *Phys. Rev.* **A9** (1974) 1041.
- 13 J. M. Hansteen, O.M. Johnsen, and L. Kocbach, *At. Data Nucl. Data Tables* **15** (1975) 305.
- 14 K. Murozono, K. Ishii, H. Yamazaki, S. Matzuyama, S. Iwazaki, *Nucl. Instr. and Meth.* **B150** (1999) 76.
- 15 S. A. E. Johansson, *Int. J. PIXE* **2** (1992) 33.
- 16 G. F. Knoll, *Radiation Detection and Measurement*, (Wiley, New York, 1989).

- 17 J. Wang and J. L. Campbell, Nucl. Instr. and Meth. **B54** (1991) 499.
- 18 M. Geretschlager, Nucl. Instr. and Meth. **B28** (1987) 289.
- 19 J. L. Campbell, J. Wang, and W. J. Teesdale, Nucl. Instr. and Meth. **B43** (1989) 490.
- 20 G. I. Johansson, X-Ray Spectrom. **11** (1982) 194.
- 21 L. Rodríguez, J. Miranda and A. Oliver, J. X-Ray Sci. Tech., **4** (1994) 221.
- 22 J. L. Campbell and J. A. Cookson, Nucl. Instr. and Meth. **B3** (1984) 185.
- 23 H. D. Betz, Rev. Mod. Phys. **44** (1975) 465.
- 24 T. A. Carlson, C. W. Nestor, N. Wasserman and J. D. Mc Dowell, Atomic Data **2** (1970) 63.
- 25 P. H. Stelson, IEEE Trans. Nucl. Sc. **NS-23** (1976) 1164.
- 26 J. P. Briand, P. Chevallier, M. Tavernier and J. P. Roset, Phys. Rev. Lett. **27** (1971) 777.
- 27 A. R. Knudson, D. J. Nagel P. G. Burkhalter and K. L. Dunning, Phys. Rev. Lett. **26** (1971) 1149.
- 28 J. McWherter, J. Bolger, C. F. Moore and P. Richard, J. Phys. **B6** (1973) 2468.
- 29 F. W. Saris, W. F. van der Weg, H. Tawara and R. Laubert, Phys. Rev. Lett. **28** (1972) 717.
- 30 P. Armbruster, G. Kraft, P. Mokler, B. Fricke and H. J. Stein, Physica Scripta **A10** (1974) 175.
- 31 M. Kleber, H. D. Betz, F. Bell, H. Panke, W. Stehling and E. Spindler, Phys. Rev. Lett. **34** (1975) 1256.
- 32 L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Mecánica Cuántica No Relativista, Curso de Física Teórica*, Vol. 3, (Reverté, Barcelona, 1983).
- 33 M. R. C. McDowell y J. P. Coleman, *Introduction to the Theory of Ion - Atom Collisions*, (North Holland, Amsterdam, 1970).
- 34 J. Bang and J. M. Hansteen, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **31** (1959) 1.
- 35 H. A. Bethe and Merzbacher, *Handbuch der Physik*, Ed. S. Flügge, Vol. 35, Edit. Springer, Berlin, 1957.

- 36 L. Kocbach, J. Phys. **B9** (1976) 2269.
- 37 J. U. Andersen, E. Laegsgaard and M. Lund, Nucl. Instr. and Meth. **192** (1982) 79.
- 38 J. M. Hansteen and O. P. Mosebekk, Nucl. Phys. **A201** (1973) 541.
- 39 O. Aashamar and L. Kocbach, Z. Phys. **A279** (1976) 237.
- 40 M. Pauli and D. Trautmann, J. Phys. **B11** (1978) 667.
- 41 M. Pauli, F. Röseler and D. Trautmann, J. Phys. **B11** (1978) 2511.
- 42 G. Basbas, W. Brandt and R. H. Ritchie, Phys. Rev. **A 7** (1973) 1971.
- 43 L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*. (McGraw Hill, U.S.A., 1968).
- 44 G. Basbas, W. Brandt and R. Laubert, Phys. Rev. **A 17** (1978) 1655.
- 45 J. C. Ashley, R. H. Ritchie and W. Brandt, Phys. Rev. **B 5** (1972) 2392.
- 46 K. W. Hill and E. Merzbacher, Phys. Rev. **A 9** (1974) 156.
- 47 G. Basbas, W. Brandt and R. Laubert, Phys. Rev. **A 7** (1973) 983.
- 48 W. Brandt and G. Lapicki, Phys. Rev. **A 10** (1974) 474.
- 49 M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover, New York, 1970).
- 50 M. E. Rose and T. A. Welton, Phys. Rev. **86** (1952) 432.
- 51 G. Lapicki and W. Losonsky, Phys. Rev. **A 20** (1979) 481.
- 52 E. Perillo, G. Spadaccini, M. Vigilante, P. Cuzzocrea and N. De Cesare, Il Nuovo Cim. **D9** (1987) 71.
- 53 E. Perillo, P. Cuzzocrea, N. De Cesare, G. Spadaccini and M. Vigilante, J. Phys. **B20** (1987) 6079.
- 54 M. Vigilante, P. Cuzzocrea, N. De Cesare, F. Murolo, E. Perillo and G. Spadaccini, Nucl. Instr. and Meth. **B51** (1990) 232.
- 55 J. U. Andersen, E. Laegsgaard, M. Lund and C. D. Mark, Nucl. Instr. and Meth. **132** (1976) 507.

- 56 U. Wille and R. Hippler, Phys. Rep. **132** (1986) 129.
- 57 M. Geretschläger and O. Benka, Phys. Rev. **A34** (1986) 866.
- 58 O. Benka, M. Geretschläger and H. Paul, J. Physique **C9** (1987) 251.
- 59 W. E. Meyerhof, Phys. Rev. Lett. **31** (1973) 1341.
- 60 W. E. Meyerhof, R. Anholt, T. K. Saylor, S. M. Lazarus and A. Little, Phys. Rev. **A14** (1976) 1653.
- 61 R. Anholt and W. Meyerhof, Phys. Rev. **A16** (1977) 190.
- 62 E. C. Montenegro and G. M. Sigaud, J. Phys. **B18** (1985) 299.
- 63 E. Merzbacher and H. W. Lewis, *Handbuch der Physik*, Vol. 34, (Springer, Berlin, 1959).
- 64 P. A. Amudsen, J. Phys. **B11** (1978) L737.
- 65 E. C. Montenegro and A. G. de Pinho, J. Physics **B15** (1982) 1521.
- 66 D. H. Jakubassa and P. A. Amudsen, J. Phys. **B12** (1979) L725.
- 67 W. Scharf, *Particle Accelerators and their Uses*, (Harwood Academic Publishers, Chur, 1986).
- 68 H. Paul and J. S. Sacher, At. Data Nucl. Data Tables **42** (1989) 105.
- 69 W. K. Chu, J. M. Mayer and M. A. Nicolet, *Backscattering Spectrometry*, (Academic Press, New York, 1978).
- 70 M. O. Krause, J. Phys. Chem. Ref. Data, **8** (1979) 307.
- 71 M. R. Khan and M. Karimi, X-Ray Spectrom. **9** (1980) 32.
- 72 W. J. Gallagher and S. J. Cipolla, Nucl. Instr. and Meth. **122** (1974) 405.
- 73 P. Van Espen, H. Nullens and W. Maenhaut, *Microbeam Analysis 1979*, (Newbury San Francisco Press, San Francisco, 1979).
- 74 I. Vickridge and G. Amsel, Nucl. Instr. and Meth. **B45** (1990) 6.
- 75 G. Vizkelethy, Nucl. Instr. and Meth. **B45** (1990) 1.
- 76 E. Kreyszig, *Introducción a la Estadística Matemática*, (LIMUSA, México, 1985).
- 77 H. Paul, J. Muhr, Phys. Reports **135** (1986) 47.

- 78 M. Geretschläger, Ž. Šmit, O. Benka, Phys. Rev. **A41** (1990) 123.
- 79 S. Fazinić, T. Tadić, I. Bogdanović, M. Jakšić, I. Orlić, V. Valković, Nucl. Instr. and Meth. **B114** (1996) 232.
- 80 R. M. Wheeler, R. P. Chaturvedi, J. L. Dugan, J. Tricomi and P. D. Miller, Phys. Rev **A13** (1976) 958.
- 81 D. Mitra, M. Sarkar, D. Bhattacharya, P. Sen, G. Kuri, G. Lapicki, Nucl. Instr. and Meth. **B124** (1997) 453.
- 82 T. J. Gray, P. Richard, R. L. Kauffman, T. C. Holloway, R. K. Gardner, G. M. Light and J. Guertin, Phys. Rev **A13** (1976) 1344.