



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

DEPENDENCIA DE LAS SECCIONES EFICACES DE RAYOS-X POR IMPACTO DE IONES PESADOS CON EL NUMERO ATOMICO DEL PROYECTIL.

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
F I S I C O
P R E S E N T A :
JUAN ANTONIO HARADA OLIVARES



ASESOR: DR. JAVIER MARTIN DEL CAMPO



FACULTAD DE CIENCIAS SECCION ESCOLAR

TESIS CON FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



UNIVERSIDAD DE CHILE
VICERRECTORÍA
ACADÉMICA

M. EN C. ELENA DE OTEYZA DE OTEYZA
Jefa de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito:
"Dependencia de las secciones eficaces de rayos X por impacto de iones
pesados con el número atómico del proyectil"

realizado por HARADA OLIVARES JUAN ANTONIO

con número de cuenta 8852845-4 , pasante de la carrera de Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis

Propietario

DR. JAVIER MIRANDA MARTIN DEL CAMPO

Propietario

DR. ARMANDO ORTIZ REBOLLO

Propietario

M. EN C. AUGUSTO CABRERA MANUEL

Suplente

DR. ALEJANDRO CRESPO SOSA

Suplente

M. EN C. OSCAR GENARO DE LUCIO MORALES

Javier Miranda
Armando Ortiz
Augusto Cabrera
Alejandro Crespo
Oscar Genaro de Lucio Morales

Consejo Departamental de



Patricia Goldstein Menache

DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE
Coordinadora de Licenciatura de Físicas

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

A mi esposa y a mi hijo, a quienes les agradezco infinitamente
su comprensión y los muchos sacrificios y privaciones
derivados de la conclusión de mi carrera:

Elizabeth Segundo García
Kenji Antonio Harada Segundo

A mi mamá y a mi hermano, los cuales me brindaron
su ayuda sin la cual no hubiera sido
posible el término de mi carrera:

Aurea Olivares Morales
Eduardo Harada Olivares

Con cariño a mis hermanos:
Jesús Salvador Harada Olivares
María del Carmen Harada Olivares

A la memoria de mi abuelita:
Juanita O.M.

AGRADECIMIENTOS

A mi asesor, el Dr. Javier Miranda M. del C. Por su ayuda y la dirección de este trabajo de tesis.

Al Dr. Luis Rodríguez Fernández, por su invaluable ayuda.

A mis sinodales:

M. en C. Oscar Genaro de Lucio Morales.

M. en C. Augusto Cabrera Manuel.

Dr. Alejandro Crespo Sosa

Dr. Armando Ortiz Rebollo.

por la revisión de este trabajo y todas sus sugerencias para el mejoramiento del mismo.

Al Sr. Karim López Guzmán y al Sr. Francisco J. Jaimes por su valiosa y atenta ayuda en todo el trabajo experimental desarrollado en el "Laboratorio del Acelerador Peletron NEC 9SDH-2 de 3 MV".

Agradezco a los pocos profesores y profesoras que a lo largo de mi carrera profesional, se preocuparon en elevar el nivel académico de los estudiantes de la Facultad de Ciencias.

Se reconoce el apoyo financiero parcial de DGAPA-UNAM (proyecto IN-101097) y de CONACIT (proyectos F036-9109 y G-0010-E).

ÍNDICE

| | |
|---|----------|
| ÍNDICE | iii |
| CAPÍTULO 1 | 1 |
| 1. INTRODUCCIÓN | 1 |
| 2. RESUMEN | 3 |
| CAPÍTULO 2 | 5 |
| 1. EMISIÓN DE RAYOS X INDUCIDA POR PARTÍCULAS (<i>PIXE</i>) | 5 |
| 1(a). Introducción | 5 |
| 1(b). Conceptos y teoría | 6 |
| 1(c). Transiciones | 7 |
| 2. INTENSIDADES DE LAS LÍNEAS Y RAZONES DE EMISIÓN DE RAYOS X | 10 |
| 3. PRODUCCIÓN DE FLUORESCENCIA DE LA CAPA <i>L</i> Y LAS PROBABILIDADES DE TRANSICIÓN COSTER-KRONIG PARA ELEMENTOS CON NÚM. ATÓMICO ENTRE 25 Y 96 | 11 |
| 4. INTRODUCCIÓN A LAS TEORÍAS DE IONIZACIÓN DE CAPAS INTERNAS DEL ÁTOMO | 13 |
| 4(a). Notación y variables fundamentales | 14 |
| 4(b). La Teoría <i>SCA</i> | 16 |
| 4(c). La Teoría <i>PWBA</i> | 20 |
| 4(d). La Teoría <i>ECPSSR</i> | 24 |
| 4(d-1). Efectos de ligadura y de polarización | 25 |
| 4(d-2). Efecto de desviación coulombiana | 27 |
| 4(d-3). Efectos electrónicos relativistas | 27 |
| 4(d-4). Cálculos a partir de la teoría <i>ECPSSR</i> | 29 |
| 4(d-5). Correcciones a la teoría <i>ECPSSR</i> | 29 |
| 4(d-5i). Corrección " <i>Separated atom approximation, SA</i> " (aproximación de átomo separado) | 31 |
| 4(d-5ii). Corrección " <i>United Atom, UA</i> " (aproximación de átomo unido) | 31 |

| | |
|--|----|
| 4(d-Siii). Corrección de aproximación considerando orbitales moleculares "MO" y la aproximación "MECPSSR" | 32 |
| 4(d-Siv). Corrección de aproximación "UA-ECPSSR" | 32 |
| 5. RETRODISPERSIÓN DE RUTHERFORD (RBS) | 33 |
| CAPÍTULO 3 | 38 |
| 1. DESCRIPCIÓN DE LA LÍNEA DEL HAZ DEL ACELERADOR PELETRON PARA EXPERIMENTOS CON RAYOS-X CARACTERÍSTICOS POR IMPACTO CON IONES | 38 |
| 1(a). Cámara de dispersión | 43 |
| 1(b). Detectores y electrónica asociada | 46 |
| 1(c). La eficiencia de los detectores utilizados en los experimentos | 48 |
| 2. LAS MUESTRAS UTILIZADAS EN EL EXPERIMENTO | 49 |
| 3. MEDICIÓN DE LAS SECCIONES DE PRODUCCIÓN DE RAYOS-X <i>L</i> | 50 |
| 4. DESARROLLO EXPERIMENTAL | 51 |
| CAPÍTULO 4 | 53 |
| 1. RESULTADOS | 53 |
| 1(a). Calibración del sistema de detección, "la eficiencia" | 53 |
| 1(b). Obtención del espesor de blancos utilizadas en los experimentos | 56 |
| 1(c). Obtención experimental de las Secciones de ionización y de producción de rayos-X | 57 |
| 2. DISCUSIÓN | 63 |
| 3. CONCLUSIONES | 65 |
| 4. APÉNDICE | 67 |
| 5. REFERENCIAS | 68 |

CAPÍTULO 1

1. INTRODUCCIÓN

El proceso físico de la emisión de rayos-X característicos después del impacto de iones contra átomos blanco, se conoce desde décadas atrás (De Lucio [1]). La producción de rayos-X por impacto con *iones pesados* (como ^{12}C) ha sido estudiada por diversos autores (Fazinic *et al.* [2]). Una compilación elaborada por Orlic (*et al.* [3]) indica que un trabajo extenso se ha desarrollado sobre la producción de secciones eficaces en Au y otros elementos, mediante el impacto con protones, deuterones y partículas α ; también se tienen datos para el impacto con iones pesados, pero solamente para pocos tipos de proyectiles y para un intervalo limitado de energía. El desarrollo de modelos teóricos que describan las *secciones eficaces de producción de rayos-X por impacto con iones pesados*, no ha visto un avance significativo, al menos en la década anterior. Pocos son en realidad los resultados experimentales y teóricos obtenidos hasta la fecha. Las teorías existentes referentes a la producción de rayos-X por impacto con iones pesados, son muy escasas y con poco avance y se enfocan en las líneas *K* que en las líneas *L* y menos aún para las líneas *M*. Son las líneas *L*, las que se estudian en este trabajo.

De entre las técnicas nucleares más utilizadas en la espectroscopia, está por un lado, la denominada *PIXE* (Particle Induced X-Ray Emission) y por otro lado la denominada *RBS* (Rutherford Backscattering Spectrometry). Estas dos técnicas mutuamente complementarias permiten realizar un análisis cuantitativo multielemental muy completo y fino de los materiales blanco a estudiar. *RBS* analiza la interacción de un haz de partículas cargadas con núcleos de los átomos de la muestra a analizar. *PIXE* sirve para analizar los procesos de excitación y de ionización de las capas atómicas por la interacción con un haz de partículas cargadas, con la subsecuente desexcitación mediante la emisión de rayos-X. Una de las magnitudes más importantes en *PIXE*, es la *sección eficaz de producción de rayos-X*, denotada como σ_X . Los modelos casi no se han probado en cuanto a la dependencia de σ_X con el número atómico del proyectil. El trabajo más completo al respecto, lo realizaron Bogdanovic y sus colaboradores en

1999 [4] (ver también [4']), trabajo en el que midieron individualmente las secciones de producción de rayos-X correspondientes a la capa L , con iones de ^{12}C , en el intervalo de energía de 0.22 a 0.83 MeV u^{-1} sobre blancos de Cd, In, Sb, Te, Ba, Tb e Yb.

En este trabajo de tesis se hizo algo similar, pero con iones de ^{12}C , ^{16}O y ^{19}F , en el intervalo de energía de 0.5 a 0.75 MeV u^{-1} y sobre un blanco de YbF_3 . Así pues, se hizo un intento por observar la dependencia de las secciones eficaces de producción de rayos-X L por impacto de iones pesados con el número atómico del proyectil. Los resultados experimentales obtenidos son comparados con las teorías sobre la ionización de las capas atómicas internas mediante colisiones ion-átomo *PWBA* (teoría de Born de onda plana) y *ECPSSR* (aproximación con un estado estacionario perturbado, el cual incorpora varios ajustes a las teorías *PWBA* y *SCA*) mediante la utilización del programa de cómputo *ISICS* [5] (el cual está basado en dichas teorías); también se comparan con los resultados obtenidos por Bogdanovic y sus colaboradores en 1999, ya mencionados. En este último trabajo, los autores compararon satisfactoriamente sus resultados experimentales con la teoría de la aproximación semiclassical con su corrección al átomo unido *SCA-UA* (por sus siglas en inglés) sobre la ionización de las capas atómicas internas mediante colisiones ion-átomo. Por lo dicho anteriormente, se puede mencionar que los experimentos realizados en esta tesis, entran dentro de los problemas experimentales y teóricos no resueltos de nuestra época.

2. RESUMEN

La mayor parte del trabajo experimental publicado acerca de la ionización de las capas internas de un átomo inducida por el impacto con partículas cargadas, se ha concentrado en la ionización de las capas K y L mediante el impacto con protones y partículas α . Los datos medidos están resumidos en trabajos de compilación realizados por varios autores. Este interés se debe al hecho de que la ionización de las capas internas es de gran importancia en el desarrollo de diferentes tipos de aplicaciones, tal como la ya mencionada emisión de rayos-X inducida por partículas $PIXE$, en cálculos de poder de frenamiento, en implantación de iones y en el estudio de sólidos y de plasmas. Para los datos publicados acerca de la ionización de las capas K , L o M inducida por iones más pesados que partículas α , es bastante diferente. Los datos son muy escasos en cuanto al tipo de elementos blanco estudiados, a los intervalos de energía y a los proyectiles utilizados, particularmente para la ionización de la capa L . Con mucha frecuencia, los autores solamente presentan las secciones eficaces de producción de rayos-X totales de las capas L , lo cual probablemente se debe a la muy baja razón de producción de rayos-X, además de la escasa resolución de los detectores de rayos-X de Si(Li) para estos casos específicos. Algunas de las limitaciones experimentales han sido superadas con el mejoramiento de la resolución en la energía de los detectores de Si(Li) (de 135 eV a 5.9 keV), o por el uso de espectrómetros de cristal de alta resolución. Un número limitado de estudios existe sobre la ionización de la capa L por impacto mediante iones de carbón (Mahli y Gray [6], informaron acerca de las secciones eficaces de producción de rayos-X de $L\alpha_{1,2}$, $L\gamma_1$ y $L\gamma_{2,3(6)}$ para Yb y Au para energías entre 0.5 y 3.0 MeV·u⁻¹).

La capa L presenta una base particularmente sensible para poner a prueba directamente las teorías de ionización (las cuales expondremos más adelante), ya que consiste de tres subcapas, todas ellas con diferentes propiedades. Simultáneamente con los trabajos experimentales, diferentes modelos clásicos y de mecánica cuántica se han desarrollado para describir la ionización de las capas internas del átomo blanco. A continuación se describe el itinerario seguido a lo largo de este trabajo. El *Cap. 2* comienza con una introducción a la técnica de análisis nuclear $PIXE$, en la cual se incluyen las ecuaciones utilizadas en este trabajo. Se introducen dos secciones, las cuales

contienen elementos para obtener las secciones de producción de rayos-X, tales como los conceptos de *intensidades de las líneas y razones de emisión de rayos-X y de producción de fluorescencia de la capa L* y las *probabilidades de transición Coster-Kronig*. Se introducen las teorías más comunes en la literatura sobre la ionización de las capas internas del átomo mediante un haz de partículas cargadas. Nos importan en especial la *ECPSSR* y la *SCA*, ya que son utilizadas en este trabajo para comparar, nuestros resultados experimentales (la *ECPSSR* a través del programa de cómputo *ISICS* y la *SCA* porque Bogdanovic comparó con esta teoría satisfactoriamente sus resultados). Posteriormente se da una introducción a la técnica de análisis nuclear *RBS*, ya que mediante ella se realizó la calibración del sistema de detección del dispositivo experimental utilizado en nuestros experimentos. En el *Cap. 3* se da la descripción detallada del dispositivo experimental utilizado en los experimentos. Tal descripción incluye la línea del acelerador Peletron para experimentos con rayos-X característicos por impacto con iones. Se da una introducción sobre las muestras utilizadas en el experimento y sobre las secciones de producción de rayos-X *L*. Seguidamente se presenta una subsección de introducción al dispositivo experimental. El *Cap. 4* corresponde a los datos experimentales obtenidos, al análisis de los mismos y a la presentación de los resultados experimentales. Como parte de los resultados obtenidos, se muestran las gráficas obtenidas. Se da un valor representativo para la eficiencia del sistema de detección, otro para el espesor de la película delgada utilizada. También se dan los valores obtenidos para las secciones de producción de rayos-X correspondientes a las líneas *L*, que se logró distinguir claramente (las más intensas). Se hace una comparación gráfica entre nuestros resultados experimentales, los resultados teóricos obtenidos mediante el programa de cómputo *ISICS* y con los resultados experimentales que obtuvo Bogdanovic *et al.* [4], [4']. Se discuten los resultados obtenidos y las comparaciones mencionadas. Finalmente damos nuestras conclusiones sobre los resultados obtenidos.

CAPÍTULO 2

1. EMISIÓN DE RAYOS X INDUCIDA POR PARTÍCULAS (*PIXE*)

1(a). INTRODUCCIÓN.

La emisión de rayos-X inducida mediante partículas *PIXE* (Particle Induced X-Ray Emission), es una herramienta poderosa no destructiva, útil en el análisis multielemental de la composición química de diversos tipos de muestras [7]. Toma tan sólo unos pocos minutos en realizar la irradiación para cada muestra. Esta técnica utiliza iones con energías en el intervalo de 0.5 a 10 MeV/uma y detectores de rayos-X de estado sólido Si(Li). La mayoría de los elementos por encima del Na en la tabla periódica, pueden analizarse en el intervalo de energía de rayos-X de 1 a 100 keV. Con espectrómetros de cristal o con detectores semiconductores de ventana reducida, el intervalo puede extenderse por debajo del Be. La energía de los rayos-X emitidos es característica de los átomos bombardeados y el número de rayos-X característicos producidos es proporcional a la concentración elemental. Treinta y cinco elementos diferentes pueden ser analizados simultáneamente. Cuando la muestra contiene varios elementos, el espectro obtenido puede ser relativamente complicado. La ventaja del uso de iones pesados, radica en que las secciones eficaces de producción de rayos-X inducidos por ellos, son significativamente más altas que las producidas mediante protones, aumentando con ello la eficiencia del método de *PIXE*.

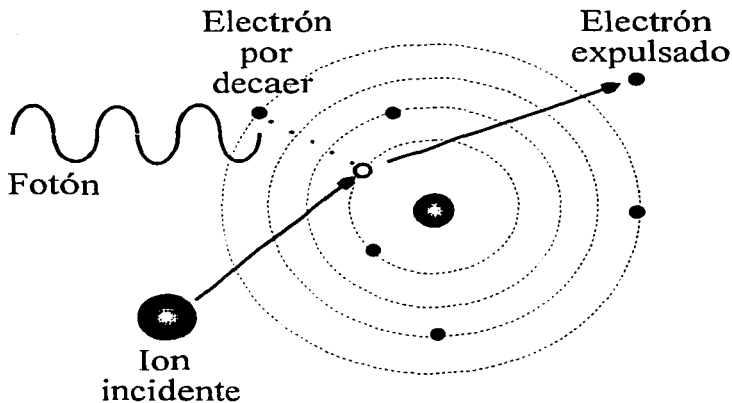


Fig. 2.1 Proceso físico de la técnica PIXE.

1(b). Conceptos y teoría.

La emisión de rayos-X inducida mediante iones (partículas cargadas) es un proceso que pasa por varias etapas [7]; en primer lugar, el ion crea vacantes en las capas electrónicas del átomo blanco, después estas vacantes son ocupadas por electrones de capas externas y el exceso de energía se manifiesta con la emisión de *fotones* o como *electrones Auger*. Tal situación se esquematiza en la figura 2.1.

En la figura 2.2 se muestran las transiciones más comunes para vacantes iniciales en las capas *K* o *L* (en alguna de sus subcapas). En la figura anterior se da la notación convencional (denominada notación de Siegbahn). Las líneas son generalmente agrupadas en tres grandes subgrupos denominados α , β , y γ , de acuerdo a sus energías de rayos-X. Las líneas α son más intensas que las β , las cuales son a su vez, más intensas que las γ .

Hay unas 13 líneas *K*, 37 líneas *L* y 39 líneas *M* comúnmente observadas, aunque para elementos con números atómicos pequeños, todas estas líneas pueden observarse mediante un detector con resolución en energía muy alta.

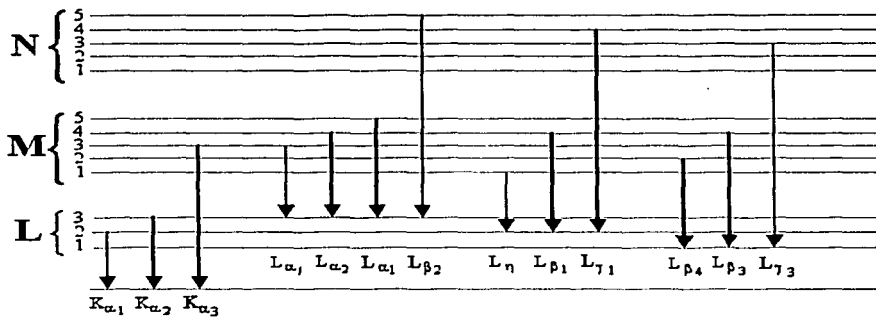


Figura 2.2 Niveles de energía atómicos y transiciones atómicas que dan origen a rayos X. La nomenclatura se señala en la figura.

1(c). TRANSICIONES.

La notación de Siegbahn utiliza los símbolos K , L_1 , L_2 , L_3 , M_1 , y así sucesivamente, para nombrar las subcapas electrónicas saliendo desde el núcleo atómico (decreciendo en energía, la cual está cuantizada). La capa K no posee subcapas, la capa L tiene tres subcapas, las cuales están etiquetadas como L_i ($i = 1$ a 3), la capa M tiene cinco subcapas etiquetadas como M_i ($i = 1$ a 5) y la capa N tiene siete subcapas etiquetadas como N_i ($i = 1$ a 7). Estas letras son utilizadas para etiquetar las líneas de rayos-X características de acuerdo a las transiciones electrónicas que las producen, lo cual da origen a grupos de líneas de rayos-X bien determinadas, las cuales se nombran según la capa de la cual se expulsó el electrón original. Una línea que fué producida por una vacante en la capa K se llamará *línea K*, si fué causada por una vacante en la capa L será una *línea L*, y así sucesivamente. Por la existencia de niveles de energía cuantizados en las capas electrónicas del átomo, el electrón expulsado en tal proceso puede corresponder a diferentes capas, lo mismo que el electrón que ocupa la vacante correspondiente. El electrón que llena la vacante puede provenir de un gran número de transiciones, lo cual está sujeto a las reglas de selección en las transiciones atómicas. Esto produce una cantidad de líneas K , de líneas L , y así sucesivamente. Tales líneas se distinguen por su intensidad relativa dentro de su grupo. Así por

ejemplo, la línea K más intensa será etiquetada como $K\alpha$, la siguiente menos intensa será la $K\beta$. Estas líneas pueden deberse a cierto número de transiciones, las cuales se distinguen mediante la utilización de un subíndice (1, 2, 3,...), distinguiéndose así las líneas $K\alpha_1, K\alpha_2, K\beta_1, K\beta_2, \dots$. En la figura 2. 2, se esquematizan las líneas más importantes para el análisis mediante la técnica de PIXE.

Por otra parte, la probabilidad de producir los fotones de rayos-X de una cierta línea, se denomina *Sección Eficaz de Producción de Rayos-X*, la cual es una magnitud que depende de varios factores, tales como el tipo de proyectil, la energía de incidencia del proyectil, y el átomo blanco en cuestión. Para líneas K , tal magnitud se relaciona con la probabilidad de ionizar el átomo (*Sección eficaz de ionización*) mediante la relación:

$$\sigma_{x,i} = \sigma_{I,K} \omega_K P_i \quad (2.1)$$

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 *producción de fluorescencia* (fluorescence yield) y P_i es la *intensidad relativa de todas las posibles transiciones que producen radiación en la línea i*. Es decir, $\sigma_{x,i}$ es la intersección de las probabilidades $\sigma_{I,K}$, ω_K y P_i , las cuales son probabilidades independientes (es por ello que $\sigma_{x,i}$ se expresa como un producto).

La producción de fluorescencia (fluorescencia simplemente), es igual al cociente del número total de fotones-X emitidos entre el número total de vacantes en la capa K . Para la capa L y capas superiores, la nomenclatura es más complicada y se tiene que además de las transiciones radiativas de electrones precedentes de capas superiores, se pueden presentar transiciones no radiativas entre las subcapas L_1, L_2 , y L_3 . Por lo que si se crea una vacante en la subcapa L_1 , ésta puede llenarse con un electrón de la subcapa L_2 , dejando a su vez una vacante que se ocupa con otro electrón de la subcapa L_3 . El resultado final, es que se tiene una vacante en la subcapa L_3 . A este tipo de transiciones no radiativas, se les conoce como transiciones *Coster-Kronig* (más adelante se dedica una sección para tales transiciones). Es necesario conocer las secciones de ionización y las

fluorescencias para cada subcapa, por lo que se tiene que para la sección de producción de las líneas L más utilizadas en la técnica de *PIXE*:

$$\sigma_{X,L_a} = (\sigma_{L_1} f_{13} + \sigma_{L_1} f_{12} f_{23} + \sigma_{L_2} f_{23} + \sigma_{L_3}) \omega_3 F_{3a}; \quad (2.2)$$

$$\sigma_{X,L_\beta} = \sigma_{L_1} \omega_1 F_{1\beta} + (\sigma_{L_1} f_{12} + \sigma_{L_2}) \omega_2 F_{2\beta} + (\sigma_{L_1} f_{13} + \sigma_{L_1} f_{12} f_{23} + \sigma_{L_2} f_{23} + \sigma_{L_3}) \omega_3 F_{3\beta}; \quad (2.3)$$

$$\sigma_{X,L_\gamma} = \sigma_{L_1} \omega_1 F_{1\gamma} + (\sigma_{L_1} f_{12} + \sigma_{L_2}) \omega_2 F_{2\gamma}; \quad (2.4)$$

$$\sigma_{X,L_t} = (\sigma_{L_1} f_{13} + \sigma_{L_1} f_{12} f_{23} + \sigma_{L_2} f_{23} + \sigma_{L_3}) \omega_3 F_t; \quad (2.5)$$

donde las σ_{L_i} son las secciones de ionización de las subcapas i ; ω_i son las fluorescencias i , f_{ij} es la probabilidad se que ocurra una transición *Coster-Kronig* de la capa j a la i ; F_{ix} es la probabilidad de que ocurra una transición radiativa tomada como la fracción de rayos-X originados por una vacante en la subcapa L_n y la cual contribuye a la línea L_x . Como se puede observar, en las ecuaciones de la (2.2) a la (2.5), para poder calcular la sección de producción de rayos-X de cada una de las líneas L , se necesita conocer el valor de las secciones de ionización para cada subcapa. Pero se puede definir una *fluorescencia promedio* y entonces utilizar una *intensidad relativa a la línea i* , en analogía con el caso de la capa K , resultando así:

$$\sigma_{X,L} = \sigma_{i,L} \omega_L P_i; \quad (2.6)$$

donde $\sigma_{i,L}$ es la sección de ionización total de la capa L , ω_L es la fluorescencia promedio y P_i es la intensidad relativa. El uso de la ecuación (2.6) está restringido porque P_i depende de la energía de incidencia del proyectil. La energía del fotón emitido en uno de los procesos descritos anteriormente, es característica del elemento que se utiliza como blanco. Es por esto que con la medición de tal energía, se puede saber mediante *PIXE*, cuál o cuáles son los elementos constitutivos de tal muestra. A través de la técnica de *PIXE*, es posible realizar un análisis multielemental de diferentes muestras, tales como muestras biomédicas, dermatológicas, neurobiológicas, fluidos biológicos, aerosoles atmosféricos, muestras geológicas y arqueológicas y análisis de materiales (Van Grieken [8]). La técnica de *PIXE* en la Física tiene aplicaciones en la

implantación de iones, en cálculos de poder de frenamiento, en estudios sobre sólidos y plasmas. Además, esta técnica ha contribuido al mejoramiento de las diferentes teorías sobre ionización de las capas internas del átomo, al ser esta técnica un medio para comparar tales teorías con los resultados experimentales.

2. INTENSIDADES DE LAS LÍNEAS Y RAZONES DE EMISIÓN DE RAYOS X

Tan pronto como ocurre una vacante en una subcapa específica, puede ser ocupada por medio de varias transiciones desde diferentes subcapas más altas. Para calcular la probabilidad de que cierta transición i ocurra, se debe conocer primero la razón del ancho radiativo parcial $\Gamma_i(R)$, de tal transición al ancho radiativo total, $\Gamma_s(R)$ correspondiente a la subcapa s . Así, la razón $S_i = \Gamma_i(R)/\Gamma_s(R)$ se llama *razón de emisión de rayos-X relativa para la transición i en la subcapa s* . Los anchos se definen en unidades de electrón volts (eV) y las razones de transición en unidades de eV/h , donde: $1 eV/h = 1.5193 \times 10^{15} s^{-1}$. Por otra parte, Scofield [7], calculó razones de transición radiativa teóricas para las capas L y K para elementos con Z_2 desde 5 hasta 102 utilizando el potencial relativista de Hartree-Slater para éstos átomos. Salem [7], comparó estos cálculos con datos experimentales para las subcapas K y L , los cuales se obtuvieron con fuentes radioactivas o muestras ionizadas por medio del bombardeo de fotones o electrones. Los datos obtenidos por bombardeo con iones positivos fueron excluidos, ya que tal tipo de bombardeo genera vacantes múltiples, especialmente para el caso de iones pesados. Las razones de emisión de líneas dentro de una subcapa son importantes en la identificación de elementos en el análisis cuantitativo de rayos-X. La familia de las subcapas K consiste de dos líneas identificables, a saber: la $K\alpha(1)$ y la $K\beta(0.1)$. Los valores dentro de los paréntesis son aproximadamente las intensidades relativas, ya que tales valores cambian de acuerdo al elemento y a la subcapa de ionización. Por otro lado, las series L , consisten en $L\alpha(1)$, $L\beta_1(0.7)$, $L\beta_2(0.2)$, $L\beta_3(0.08)$,

$L\beta_1(0.05)$, $L\gamma_1(0.08)$, $L\gamma_2(0.03)$, $L\beta_2(0.04)$ y $L\gamma_3(0.01)$. Las series M , consisten en $M\alpha(1)$, $M\beta(0.6)$, $M\gamma(0.05)$, $M\zeta(0.06)$ y $M_2N_4(0.01)$. Una tabulación bastante completa sobre las intensidades de las líneas de la capa L para las 16 líneas más comunes y para la mayoría de los elementos, ha sido publicada por Cohen y Harrigan [9] para bombardeo con protones y iones de He. Las razones correspondientes a líneas originadas por vacantes en diferentes subcapas están relacionadas por las secciones transversales de ionización de la subcapa.

3. PRODUCCIÓN DE FLUORESCENCIA DE LA CAPA L Y LAS PROBABILIDADES DE TRANSICIÓN COSTER-KRONIG PARA ELEMENTOS CON NÚMERO ATÓMICO ENTRE 25 Y 96

Las vacantes primarias en las subcapas L_i ($i = 1, 2, 3$) pueden producirse por ionización directa mediante fotones, electrones, iones pesados o por la transición de una vacante en la capa K hacia la capa L . Tales vacantes decaen por medio de transiciones radiativas *Auger* y no radiativas *Coster-Kronig* (CK), excepto para la subcapa L_3 , donde las transiciones CK no son posibles. El número de rayos-X producidos por la subcapa L_i a causa del descenso hacia una vacante (en un proceso de un sólo paso) define la producción de fluorescencia ω_i de la subcapa. Las transiciones CK alteran la distribución de vacantes primarias en las subcapas L_i , lo cual resulta en el cambio de la producción de fluorescencia de la subcapa. La producción de fluorescencia efectiva de la subcapa L_i , denotada por (ν_i) y la producción de fluorescencia promedio de la capa L denotada por $(\bar{\omega}_L)$, los cuales son conceptos de importancia práctica directa y pueden ser deducidos mediante los valores de la fluorescencia de la subcapa respectiva (ω_i) y de los resultados respectivos CK, (f_{ij}). Existen en la literatura dos conjuntos disponibles de valores para la producción de fluorescencia de la subcapa L_i , ω_i con ($i = 1, 2, 3$) y las probabilidades de transición CK, f_{ij} . El primero de tales conjuntos, consiste de los valores de ω_i y de f_{ij} ajustados semiempíricamente, para todos los elementos con número atómico entre $18 \leq Z \leq 110$; estos valores se utilizan ampliamente en varias aplicaciones en física molecular y atómica, en análisis de emisión de rayos-

X y en cálculos de dosimetría. El segundo conjunto de tales valores [10], se obtuvo a partir del modelo "Relativista de Dirac-Hartree-Slater (RDHS)", y se tabuló para 25 elementos con número atómico entre $18 \leq Z \leq 96$.

Un estudio experimental sistemático [10], demostró que los valores de ω_i y de f_{ij} correspondientes al segundo grupo de valores del modelo RDHS, es más realista que el primer conjunto de valores semiempíricos. Un intervalo seguro, en el que el modelo RDHS coincide bien con los resultados experimentales, es el de elementos con núm. atómico entre $25 \leq Z \leq 96$ (tales pruebas experimentales sobre la validez del segundo conjunto de valores para ω_i y f_{ij} , son bastante buenos y se utilizó un blanco de Yb). S. Puri [10], calculó los valores para ω_i y f_{ij} en tal intervalo (utilizando el modelo RDHS, en lo que se conoce como *razones de emisión radiativa de Scofield* y en las *razones de emisión no-radiativas de Chen*) utilizando las siguientes relaciones:

$$\omega_i = \frac{\Gamma_R(L_i X)}{\Gamma(L_i)}; \quad X = L_j, M, N, O, j > i; \quad (2.7)$$

$$f_{ij} = \frac{\Gamma_A(L_i L_j X)}{\Gamma(L_i)}; \quad X = M, N, O, j > i; \quad (2.8)$$

donde Γ_R y Γ_A son las sumas de las razones de transición correspondientes a las transiciones entre las capas dadas en paréntesis en las anteriores expresiones. Γ es la suma total de las razones de transición. Con los valores de ω_i ($i = 1, 2, 3$) y de f_{ij} , la producción de fluorescencia CK corregida para la subcapa L_i denotada como (v_i) se evaluaron utilizando las siguientes relaciones:

$$v_1 = \omega_1 + \omega_2 f_{12} + \omega_3 (f_{13} + f_{12} f_{23}), \quad (2.9)$$

$$v_2 = \omega_2 + \omega_3 f_{23}, \quad (2.10)$$

$$v_3 = \omega_3. \quad (2.11)$$

4. INTRODUCCIÓN A LAS TEORÍAS DE IONIZACIÓN DE LAS CAPAS INTERNAS DEL ÁTOMO

A continuación describiremos, en forma resumida y profundizando según nuestro interés particular, las principales teorías sobre la ionización de las capas atómicas mediante colisiones ion-átomo [11]. Se consideran colisiones en las que un ion (proyectil), choca con un átomo el cual se considera en reposo (blanco). Las propiedades características del proyectil se denotarán con el subíndice 1, y las del blanco con el subíndice 2. Las colisiones ion-átomo dependen de muchos factores, los cuales pueden clasificarse según el tipo de proyectil y la velocidad de colisión. Para proyectiles con masas mucho mayores que la del electrón y si $Z_1 \ll Z_2$, donde las Z_i ($i = 1, 2$) son los números atómicos, entonces, durante la colisión dominará la interacción coulombiana. Por otra parte, dependiendo de la velocidad del proyectil, la ionización del átomo podrá darse a través de la *ionización directa* o por *captura de un electrón a un estado no ocupado del ion*. Si la colisión se da con un ion que no tiene electrones en sus capas, es la interacción coulombiana la que domina, pero si tiene electrones orbitándolo, el potencial de interacción es más complejo. Para velocidades de colisión pequeñas y Z_1 grandes, es muy probable que el ion capture electrones, por ello el proyectil no se puede considerar como objeto puntual, sino que debe atribuírsele una estructura tridimensional. Las teorías que a continuación se mencionan, corresponden a procesos de ionización directa, los cuales son los que dominan en las colisiones con protones a las energías utilizadas en este trabajo.

4(a). Notación y variables fundamentales.

Las subcapas atómicas de nuestro interés las denotaremos como $s = K, L, \dots$, donde $i = 1, 2, 3, \dots$. Así los subíndices nos permiten diferenciar las diferentes subcapas de las capas K o L . A su vez, estas subcapas pueden describirse por medio del conjunto de números cuánticos (n, l, j) , como $(1, 0, 1/2)$, $(2, 0, 1/2)$, $(2, 1, 1/2)$ o $(2, 1, 3/2)$. La energía del proyectil la expresamos como:

$$E_1 = \frac{1}{2} m_1 v_1^2, \quad (2.13)$$

donde m_1 y v_1 son la masa y la velocidad inicial del proyectil respectivamente. La energía de ionización experimental de la subcapa s del átomo, se denota $\hbar\omega_{2s}$, donde ω_{2s} se considera una frecuencia equivalente del electrón en la capa s . Los efectos de apantallamiento del núcleo atómico debidos a los electrones, pueden determinarse a través de una carga nuclear efectiva y los efectos de apantallamiento de las capas K y L se pueden determinar restando al número atómico 0.3 y 4.15 para así obtener las capas nucleares efectivas de tales capas respectivamente. El número atómico efectivo Z_{2s} de la subcapa s , se define como $Z_{2K} = Z_2 - 0.3$ y $Z_{2L} = Z_2 - 4.15$. En general, en los modelos teóricos de ionización, se trabaja con variables adimensionales, las cuales se normalizan con base en el *átomo hidrogenoide*; se define el *radio hidrogenoide efectivo* como:

$$a_{2s} = n^2 a_0 / Z_{2s}, \quad (2.14)$$

donde a_0 es el radio de Bohr y n es el número cuántico principal de la subcapa s . La velocidad hidrogenoide del electrón en el átomo, es:

$$v_{2s} = Z_{2s} v_0 / n, \quad (2.15)$$

donde v_0 es la velocidad de Bohr. Se define a la energía reducida θ de la subcapa s como:

$$\theta_s = \frac{n^2 \hbar \omega_{2s}}{Z_{2s} R_\infty}, \quad (2.16)$$

donde $R_\infty = m_e e^4 / 2\hbar^2 = 1/2 u.a. = 13.6 eV = \text{cte. de Rydberg}$, dada en términos atómicos; m_e es la masa del electrón y e es la carga eléctrica elemental. Para la capa L , los valores

de θ_L varían de 0.4 a 0.8. Las secciones de ionización dependen del mínimo momento transferido por el proyectil durante la colisión, $\hbar q_{0s}$. Para el caso en el que $E_1 \gg \hbar \omega_{2s}$, se tiene que $\hbar q_{0s} \approx \hbar \omega_{2s} / v_1$. Se define también la velocidad reducida entre el proyectil y el electrón del átomo como:

$$\xi_s = \frac{v_1}{\frac{1}{2} \theta_s v_{2s}} = \frac{n}{q_0 a_{2s}} \quad (2.17)$$

La variable ξ_s es importante porque permite relacionar el tiempo atómico característico del átomo η / ω_{2s} y el tiempo característico de colisión a_{2s} / v_1 . De esta manera, puede distinguirse entre colisiones rápidas si $\xi_s > 1$ y lentas cuando $\xi_s < 1$. En muchas ocasiones, la ionización de capas internas se describe en términos de la variable reducida:

$$\eta_s = \frac{v_1^2}{Z_{2s}^2 v_0^2} = \left(\frac{\theta_s \xi_s}{2n} \right)^2 \quad (2.18)$$

la cual es proporcional a la energía del proyectil E_1 .

4(b). La Teoría SCA.

La aproximación semiclásica (SCA) fué desarrollada por Bang y Hansteen [11]. En esta teoría se toma en cuenta un sistema de referencia fijo en el átomo blanco y la interacción coulombiana entre el proyectil y el blanco se considera como dependiente del tiempo. Se pretende explicar la ionización de las capas atómicas, tomando en cuenta la desviación coulombiana del proyectil por el núcleo atómico, por lo cual se da solución al problema por medio de la explicación en términos del *parámetro de impacto* y de la interacción del proyectil con los electrones a través de *perturbaciones*.

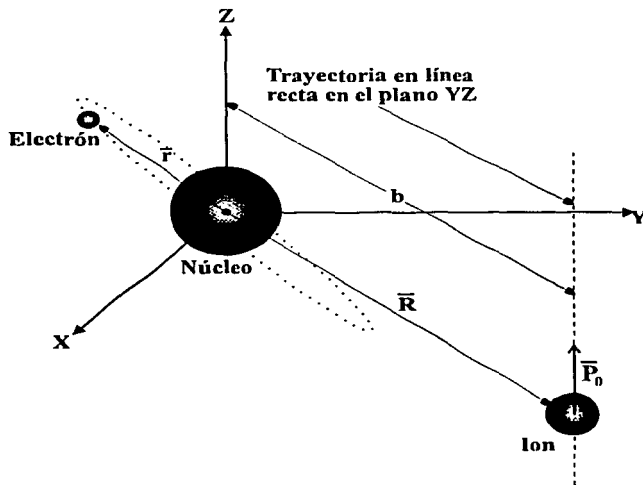


Figura 2.3 Representación de la colisión en el supuesto de que el ion se mueva en una trayectoria en línea recta.

Donde, \vec{R} = trayectoria rectilínea del proyectil, \vec{r} = vector de posición del electrón del átomo blanco, \vec{p} = momento inicial del proyectil y b = parámetro de impacto.

Esta teoría es la única que ofrece una dependencia de la sección eficaz de ionización con el parámetro de impacto. Es decir, la base de los cálculos para esta aproximación semiclásica consiste en la consideración de una trayectoria rectilínea del proyectil, para la cual se evalúan las

posibilidades de transición de los electrones del átomo blanco en un estado transitorio, hacia otro estado final, que no es sino *el continuo de energías para la ionización del átomo blanco*. Obsérvese que el uso de esta teoría no será válida en todos los intervalos de energía del proyectil, ya que las trayectorias del proyectil están limitadas a ser líneas rectas. Sin embargo, posteriormente y como producto de poner a prueba experimentalmente a esta teoría, se han realizado mejoras, las cuales consideran *trayectorias hiperbólicas* que se ajustan más a los resultados experimentales. Según la *teoría de perturbaciones dependiente del tiempo* [11], la probabilidad de que un ion se encuentre en la trayectoria $\mathbf{R}(t)$ e interactúe con un electrón de la subcapa s y de que este último sea expulsado del átomo, es:

$$P = \frac{1}{\hbar} \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle p_e | V(r, t) | s \rangle dt \right|^2, \quad (2.19)$$

donde:

$$V(r, t) = \frac{Z_1 e^2}{|\bar{r} - \bar{R}(t)|}, \quad (2.20)$$

$|s\rangle$ representa el estado inicial del electrón en el átomo y $\langle p_e |$ el estado final con momento p_e en el continuo, \bar{r} es el vector de posición del electrón en el átomo y $\omega = \Delta E/\hbar$, donde ΔE es el cambio en energía del electrón. Clásicamente, se tiene que la sección eficaz diferencial de dispersión provocada por un potencial central, está dada por $d\sigma_d = \pi b db$, en donde b es el parámetro de impacto. Por otro lado, haciendo uso de tal descripción clásica de la colisión, la probabilidad de expulsar a un electrón de la capa s de un átomo de energía E_f , es:

$$\frac{d\sigma_s}{dE_f} = \frac{2\pi}{\hbar} \int_0^{\infty} b db \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle p_e | V(r, t) | s \rangle dt \right|^2. \quad (2.21)$$

Es por lo anterior que esta teoría se conoce como "Aproximación semiclásica" (Semi-classical Approximation, SCA). La sección eficaz total de ionización de la capa s se obtiene integrando la anterior ec. (2.21) sobre todas las energías posibles de transferencia. La solución más simple para esta ecuación, se da cuando la trayectoria del proyectil es una línea recta; escojamos, por simplicidad una trayectoria en el plano YZ; así, $\bar{R}(t) = b\bar{y} + v_1 t \hat{z}$. Posteriormente, realizando

diversos cálculos y haciendo consideraciones de funciones de onda hidrogenoides para el electrón en el estado ligado y en el continuo, de la forma:

$$\Psi_{klm}(\vec{r}) = R_{kl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2.22)$$

donde $R_{kl}(r)$ es la función radial para el estado en el continuo y las $Y_{lm}(\theta, \phi)$ son las funciones armónicas esféricas. Se consideran energías finales de la forma:

$$E_f = \hbar^2 k^2 / 2m_e \quad (2.23)$$

donde, los números l y m corresponden al momento angular orbital del electrón y a sus proyecciones sobre el eje Z . Así, a partir de las ecuaciones anteriores y de una serie de consideraciones y del uso de diversas herramientas matemáticas, se puede llegar a la siguiente expresión para la sección de transferencia de energía E_f , en su forma general, como:

$$\left[\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right]^{sl} = 4\pi Z_1 \frac{m_1 e^4}{E_1 \hbar^2} \int_0^\infty b db \sum_{lm} |M_b|^2, \quad (2.24)$$

donde M_b es una matriz con elementos dados por:

$$M_b(k, l, m) = \int_0^\infty \omega d\omega A_m^l(q, \omega, b) F_{f_l}^l(s), \quad (2.25)$$

donde $q = \omega/v_1$, $s^2 = q^2 + \omega^2$,

$$A_m^l(q, \omega, b) = \frac{1}{s^2} \left[(2l+1) \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(q/s) J_m(b\omega), \quad (2.26)$$

$$F_{f_l}^l(s) = \int_0^\infty r^2 dr j_l(sr) R_f^*(r) R_l(r), \quad (2.27)$$

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. Para el caso en que la energía del proyectil es grande, y suponiendo una trayectoria recta para el mismo, las teorías *SCA* y la *PWBA* (la cual se presenta más adelante) son equivalentes. Para el caso en que la velocidad del proyectil es pequeña ($\xi_s \ll 1$), siendo E_f la sección de transferencia de energía, la aproximación a una trayectoria en línea recta es proporcional a las potencias de $q_s \approx (\hbar\omega_{2s} + E_f) / \hbar v_1$:

$$\left[\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right]^{sl} \propto \begin{cases} q_s^{-10} & \text{para } K, L_1 \\ q_s^{-20} & \text{para } L_2, L_3. \end{cases} \quad (2.28)$$

Por otra parte, el cálculo de las secciones de transferencia de energía E_f utilizando trayectorias hiperbólicas (más realistas que las trayectorias en línea recta) es más complejo, razón por la cual Bang y Hansteen se restringieron al caso en el que $a_{2s}^{-1} \ll q_s$, de manera que puede suponerse que el término monopolar del potencial, es dominante, es decir:

$$\frac{1}{|\bar{r} - \bar{R}(t)|} \approx \begin{cases} \frac{1}{R(t)} & \text{si } r < R \\ \frac{1}{r} & \text{si } r > R. \end{cases} \quad (2.29)$$

donde la trayectoria hiperbólica se describe en forma paramétrica, como:

$$\begin{aligned} x &= d(\cosh \omega + \varepsilon), \quad y = d(\varepsilon^2 - 1)^{1/2} \sinh \omega, \quad z = 0, \quad R = d(\varepsilon \cosh \omega + 1) \quad \text{y} \\ t &= \frac{d}{v_1} (\varepsilon \sinh \omega + \omega), \end{aligned} \quad (2.30)$$

donde ε es la excentricidad de la hipérbola y d es la mitad de la distancia de máximo acercamiento del proyectil. Así, en el caso de colisiones lentas, $\xi_s \ll 1$, las secciones utilizando trayectorias rectilíneas e hiperbólicas se relacionan mediante:

$$\left[\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right]^{hip} = e^{-\pi d q_s} \left[\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right]^{rect} \quad (2.31)$$

La teoría *SCA* presenta el inconveniente de que para su aplicación, se requiere de la utilización de programas de cómputo largos y complejos, y cuando la teoría *ECPSSR* (la cual se expone más adelante) se encuentra en la región donde se ajusta más a los resultados experimentales, se prefiere el uso de esta última teoría. Para las secciones de ionización de las capas L , la teoría *SCA* sin sus correcciones al *átomo unido* (United-atom, *SCA-UA* Trautmann y Rösel [12]) y los cálculos de la teoría *SCA-CC* (Smit y Orlic [13]), presenta grandes discrepancias con los resultados experimentales en el caso de bajas energías. Es por eso, que hay que tomar en

consideración las aproximaciones *SCA-CC* y *SCA-UA*. Por ejemplo en el caso del trabajo realizado por Bogdanovic *et al.* [4'] mencionado en el *Cap. 1*, se midieron individualmente las secciones de producción de rayos-X correspondientes a la capa L , con iones de ^{16}O , en el intervalo de energía de 0.19 a 0.75 MeV u^{-1} sobre blancos de Cd, Sb, Te, Ba, La, Eu, Tb e Yb. En tal trabajo, los análisis mostraron que la teoría *ECPSR* falló para explicar los datos experimentales para las tres subcapas L a lo largo del intervalo de energía utilizado. Un mejor acuerdo se observó entre los datos experimentales y la teoría *SCA-UA*, lo cual se debe a la inclusión de una corrección apropiada de ligadura para la región adiabática. La inclusión de los cálculos de canal-acoplado a nivel intercapas, mejoró más el acuerdo entre el experimento y la teoría para la subcapa L_2 en la región más adiabática, pero la teoría falló para predecir el experimento en la subcapa L_1 en la región $0.4 \leq \xi_{L_1} \leq 0.7$.

4(c). La Teoría *PWBA*.

La teoría de Born de onda plana, la *PWBA*, fué desarrollada por Merzbacher y Lewis [11]. En ella se considera que, desde el punto de vista de la física cuántica, tanto el ion incidente como el ion dispersado, son ondas planas, de manera que el átomo blanco junto con sus electrones, se considera como un *centro dispersor*, por lo que es posible aplicar *el modelo de dispersión debido al físico Born* (de ahí su nombre). Para que esta teoría sea válida, se requiere hacer las siguientes tres aproximaciones:

- 1). Que el proyectil actúe como una carga puntual;
- 2). Que la onda inicial y la onda final de la partícula (de incidencia y de dispersión), permanezcan en un mismo plano en todo el espacio;
- 3). Que los estados de los electrones del átomo blanco sean los del mismo sin perturbación alguna.

Para que sea posible hacer tales aproximaciones, es necesario que la carga de la partícula incidente sea pequeña y que su velocidad sea alta. Es por esto; que la aplicación de esta teoría está muy limitada. Por otro lado, se ha encontrado que para el cálculo de secciones eficaces de ionización totales, las teorías *SCA* y la *PWBA* son equivalentes. La descripción de esta

aproximación, se puede realizar por medio de la *teoría de perturbaciones*. Imaginemos que se tiene un sistema cuántico, el cual está sometido a la interacción de un potencial V , entonces el hamiltoniano asociado con tal sistema estará determinado por:

$$H = H_0 + V, \quad (2.32)$$

donde H_0 es el hamiltoniano asociado con el sistema no perturbado. A partir de la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo a primer orden, la probabilidad por unidad de tiempo de que el sistema sufra una transición del estado inicial v_0 a los estados en el continuo entre v y dv , está dada por:

$$dP_{v_0 v} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{v_0 v}|^2 \delta(E_v - E_{v_0}) dv, \quad (2.33)$$

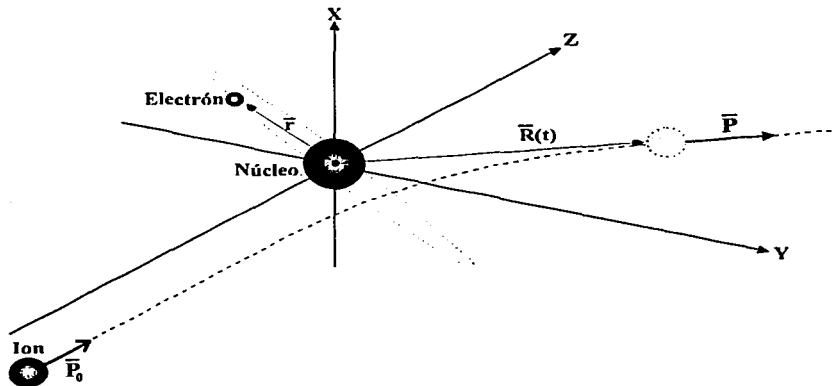


Figura 2.4 Esquema de la colisión, en la cual se supone que el ion incide con momento \vec{P}_0 en la dirección del eje Z. La posición del ion se denota con $\vec{R}(t)$, la del electrón con \vec{r} y el núcleo se encuentra localizado en el origen.

donde $V_{v v_0} = \langle v | V | v_0 \rangle$ y las E_i son las energías de cada uno de los estados del sistema. Esta teoría se puede aplicar al estudio de la colisión de una partícula que incide con momento inicial \vec{p}_0 contra un átomo y que es dispersada con un momento final \vec{p} . Tal situación se muestra en la figura 2.4 anterior. Por simplicidad, este estudio se efectúa con respecto a un sistema de referencia

situado en el centro de masa del sistema. Si la masa del ion es pequeña en comparación con la del átomo blanco, entonces el centro de masa puede considerarse localizado en el núcleo del átomo blanco. Cuando la colisión es inelástica, habrá un cambio en la energía del proyectil y del átomo, de modo que las energías inicial y final del sistema serán $E_0 = p_0^2/2m + E'_0$ y $E = p^2/2m + E_n$, donde E' y E_n son las energías electrónicas inicial y final del átomo, y $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ es la masa reducida del sistema. Considerando la ec. (2.33) para este caso, y expresando la diferencial de estados finales en términos de las diferenciales del momento final del ion y sustituyendo $E_v - E_{v_0}$ por la diferencia:

$$E - E_0 = (p^2 - p_0^2)/2m + E_n - E_0 \quad , \quad (2.34)$$

de las energías del sistema antes y después de la interacción, la probabilidad por unidad de tiempo de que tal interacción tenga lugar, será:

$$dP_{p E_n p_0 E_0} = \frac{4\pi m}{\hbar} \left| V_{p E_n p_0 E_0} \right|^2 \delta(p^2 - p_0^2 + 2m(E - E_0)) dp_x dp_y dp_z \quad , \quad (2.35)$$

en donde:

$$V_{p E_n p_0 E_0} = \iint \varphi_p^*(R) \Psi_n^*(r) V \varphi_{p_0}(R) \Psi_0(r) d^3r d^3R \quad , \quad (2.36)$$

las φ 's son las funciones de onda del proyectil y las ψ 's las de los electrones del átomo, de los resultados iniciales y finales, junto con sus respectivos elementos de volumen d^3R y d^3r en el espacio de configuración.

Posteriormente, para obtener la sección eficaz de dispersión, se consideran las funciones de onda del proyectil y las funciones de onda de los electrones del átomo blanco, en los estados iniciales y finales, junto con sus respectivos elementos de volumen en el espacio de configuración. La función de estado de la partícula incidente antes de la colisión puede suponerse como la de una onda plana, de modo que la sección eficaz de dispersión queda como:

$$d\sigma_n = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \cdot \frac{P}{P_0} \left| \iint e^{-iq \cdot R} V \Psi_n^* \Psi_0 d^3r d^3R \right|^2 d\Omega \quad , \quad (2.37)$$

La utilización de *ondas planas* para describir una colisión en la aproximación a primer orden, se debe a M. Born (1926). En una primera aproximación, puede considerarse el caso en el que el proyectil sea un ion con carga Z_1e y que la interacción eléctrica sea la dominante durante la colisión, de manera que puedan desprejiciarse otros tipos de interacción. De esta manera, la interacción entre el núcleo y el proyectil, será nula. Además, puede suponerse que durante la colisión sólo va a cambiar el estado Ψ_s de uno de los electrones de la subcapa s , en tanto que los demás permanecen invariantes (sin embargo, debe considerarse un factor que tome en cuenta la degeneración debida a todos los electrones que se encuentran en la subcapa s). La *PWBA*, resulta adecuada para describir la ionización a grandes energías (mayores que 1.3 MeV). Una de las causas por la cual existe una desviación a los resultados experimentales, es que en este modelo no se toma en cuenta la desviación del proyectil debida a la interacción con el núcleo del átomo blanco. Por otro lado, a grandes velocidades del ion, su trayectoria al chocar con un átomo, es prácticamente una línea recta y entonces la *PWBA* describe bien el proceso, por el contrario, a bajas velocidades existe una desviación coulombiana en la trayectoria del proyectil, que a su vez produce una disminución en su velocidad al pasar cerca del núcleo. Otra causa es el hecho de que el ion se considera como una partícula puntual, lo cual no es válido, especialmente a bajas energías. De tal manera que la *PWBA*, es válida cuando $Z_1 \ll Z_2$ y $v_1/v_0 \gg 1$, es decir, a altas energías. Existen correcciones directas sobre la *PWBA* que tienen la finalidad de tomar en cuenta efectos no considerados inicialmente.

4(d). La Teoría *ECPSSR*

La teoría *ECPSSR*, desarrollada por Brandt y Lapicki [14], es una aproximación con un estado *estacionario perturbado*, el cual incorpora varios ajustes a las teorías *PWBA* y *SCA*, pero sigue funcionando dentro del mismo marco de aplicación. Es decir, esta teoría es una mejora en algunos casos particulares de las teorías *PWBA* y *SCA*. La *ECPSSR* ha dado mejores resultados en la predicción de las secciones eficaces de ionización de capas internas, sin tener que recurrir a los cálculos complicados y largos de la *SCA*. Debido al desacuerdo observado entre los resultados experimentales y las predicciones teóricas, a la teoría original *PWBA* se le incorporaron las siguientes correcciones:

- La teoría de *estado estacionario perturbado (E)* con pérdida de energía del proyectil durante la colisión debido a la interacción con el número atómico;
- Deflexión coulombiana del proyectil (*C*) y la pérdida de la energía del mismo durante la colisión debida a la interacción con el núcleo;
- Aumento en la energía de ligadura y polarización de los electrones expulsados en el átomo por la presencia del proyectil, basada en la teoría de estados estacionarios perturbados (*PSS*). Un estado estacionario (perturbado *perturbed stationary state, PSS*) del electrón atómico, ocurre como resultado del incremento temporal en su carga nuclear efectiva, cuando el proyectil está dentro de la capa de tal electrón-blanco (efecto de ligadura de la energía o *binding energy effect*). Por otro lado, cuando el proyectil pasa por fuera de la capa (efecto de polarización o *polarization effect*), ocasiona un cambio en la energía del electrón-blanco. La *teoría de perturbación a primer orden* es utilizada para resolver el cambio efectivo en las energías de ligadura del electrón (*PSS*).
- Correcciones relativistas (*R*) para describir a los electrones involucrados de las capas internas.

Es decir, se tiene la teoría *E-C-P-S-S-R*. A continuación se describe brevemente la manera como se van incorporando tales correcciones a la *PWBA*, para así obtener la *ECPSSR*.

4(d-1). Efectos de ligadura y de polarización.

Durante la colisión ion-átomo, si la velocidad del ion es pequeña, lo efectos de este último son más notorios sobre los electrones del átomo blanco, ya que el tiempo de interacción es mayor y en consecuencia se modifican los estados iniciales electrónicos. Para este caso de velocidad pequeña del ion, para expulsar a un electrón de una capa interna del átomo blanco, se requiere de una penetración grande dentro de la capa atómica, de manera que al encontrarse el ion cerca del núcleo atómico, la energía de ligadura de los electrones es mayor y en consecuencia hay una disminución en la sección de ionización. Tal efecto de ligadura se consideró para las capas K y L , utilizando la aproximación de estados estacionarios perturbados (PSS). El factor de corrección por ligadura ligadura es:

$$\varepsilon_s^B = 1 + \frac{\langle \Delta E_s \rangle}{\hbar \omega_{2s}}, \quad (2.38)$$

donde $\langle \Delta E_s \rangle$ es el cambio promedio en la energía de enlace de la subcapa s durante la colisión. Para la obtención de este factor de corrección, primero se debe considerar la energía de ligadura del electrón ΔE_s debido a un ion el cual incide con parámetro de impacto b . Tal cambio se puede determinar utilizando perturbaciones a primer orden, para lo cual se tiene:

$$\Delta E_s(R) = \int \psi_s^*(\vec{r}) \frac{Z_1 e^2}{|\vec{R}(t) - \vec{r}|} \psi_s(\vec{r}) d^3 r, \quad (2.39)$$

donde $\vec{R}(t)$ es el vector de posición del ion y $\psi_s(\vec{r})$ es la función de onda no perturbada del electrón de la subcapa s . El procedimiento para determinar el valor de $\langle \Delta E_s \rangle$ es esbozado por Rodríguez [11]. Posteriormente mediante un proceso algo complejo, Rodríguez expresa al factor de corrección por ligadura como:

$$\varepsilon_s^B = 1 + \frac{2Z_1}{\theta_s Z_{2s}} g_s(\xi_s), \quad (2.40)$$

donde las funciones $g_s(\xi_s)$ son ciertas funciones $g_K, g_{L_1}, g_{L_{2,3}}$ que dependen de ξ [11]. Otro cambio que ocurre en los estados iniciales atómicos durante la colisión con un ion, es el

debido a la nube electrónica y el cual interactúa con el ion cuando pasa por fuera de las capas internas. El ion polariza los estados iniciales de los electrones del átomo blanco, lo que ocasiona que aumente la sección eficaz de ionización. Este efecto es relevante para velocidades medias y grandes del proyectil y para expulsar electrones de las capas internas el ion no necesita penetrar mucho en las capas atómicas. Es posible considerar este efecto de polarización utilizando la aproximación *PSS*, para lo cual se define un *factor de corrección por polarización*, de manera análoga a como se procedió con el factor de corrección por ligadura. Tal factor de polarización se expresa como:

$$\varepsilon_s''(\xi_s, \theta_s; c_s) = 1 - \frac{2Z_1}{Z_2\theta_s} \cdot h_s(\xi_s, c_s), \quad (2.41)$$

donde:

$$h_s(\xi_s, c_s) = \frac{2n}{\theta_s \xi_s^3} \cdot I(c_s n / \xi_s), \quad (2.42)$$

c_s es una constante dependiente de la subcapa que se esté considerando en la ionización y la función $I(x)$ está dada por:

$$I(x) = \frac{3\pi}{4} \cdot \left(\frac{\ln}{x^2} - 1 \right), \quad (2.43)$$

El *factor de corrección por efectos de ligadura y de polarización* ζ_s , se obtiene combinando el efecto de ligadura y el de polarización de la siguiente manera:

$$\zeta_s(\xi_s) = 1 + \frac{2Z_1}{Z_2\theta_s} \cdot [g_s(\xi_s) - h_s(\xi_s; c_s)], \quad (2.44)$$

4(d-2). Efecto de desviación coulombiana.

Cuando la ionización de un átomo se da por la incidencia de un proyectil con gran velocidad, la interacción con el núcleo del átomo blanco no altera significativamente la trayectoria del proyectil. Pero cuando su velocidad es pequeña, tal interacción es significativa, lo cual produce una desviación en la trayectoria del mismo, además de una disminución en la velocidad al aproximarse al núcleo. Para considerar estos efectos a bajas energías, el proyectil no debe considerarse como una onda plana, sino mediante una *función de onda coulombiana*, o debe considerarse una trayectoria hiperbólica. Brandt y Lapicki [14] derivaron un *factor de corrección multiplicativo para considerar el efecto de deflexión coulombiana*. Estos autores obtienen tal factor a partir de la ecuación (2.31), obteniendo la siguiente expresión:

$$C_s(\pi dq_0) = (9 + 2l_2)E_{10+2l_2}(\pi dq_0), \quad (2.45)$$

donde l_2 es el momento angular orbital del electrón en la subcapa s y $E_l(x)$ representa una integral exponencial de orden l .

4(d-3). Efectos electrónicos relativistas.

Los efectos relativistas en los electrones del átomo blanco, comienzan a ser significativos para átomos de elementos pesados y cuando la velocidad del proyectil es lenta. Para el caso en que se tienen elementos con $Z_2 > 50$ se necesita utilizar funciones de onda relativistas para describir a los electrones atómicos. La densidad de electrones utilizando funciones de onda relativistas, es mayor cerca del núcleo en comparación a cuando se utilizan funciones no-relativistas, lo cual origina que las velocidades de los electrones en las capas internas sean mayores. Cuando la energía del proyectil es baja, entonces la colisión deberá tener lugar cerca del núcleo para poder expulsar algún electrón y como éstos tienen velocidades mayores a las estimadas, se tiene que el mínimo momento posible de transferir, deberá ser mayor. El resultado de estos efectos electrónicos relativistas, ocasiona un aumento en las secciones de ionización de capas internas. Brandt y Lapicki [14] obtuvieron un factor de corrección relativista. Básicamente lo que hicieron fué el establecimiento de la masa relativista del electrón $m^R(r)$ como una función que depende de la

distancia r al núcleo. Determinaron la masa relativista del electrón en un potencial central (en términos de potencias de Z/r), como:

$$m^R(r) = \left[1 + \left(\frac{Z_{2s}}{2rc^2} \right)^2 \right]^{1/2} + \frac{Z_{2s}}{2rc^2}, \quad (2.46)$$

en donde se evaluó en el valor promedio $\langle R(t) \rangle = \alpha b$ para una trayectoria recta con parámetro de impacto b y donde $\alpha = \sinh \theta$. Luego se promedió sobre todos los parámetros de impacto, con lo cual se obtuvo el factor de corrección relativista:

$$m_s^R(\xi_s) = (1 + 1.1y_s^2)^{1/2} + y_s, \quad (2.47)$$

donde y_s es un factor que depende de la capa s en cuestión. Los autores a los cuales se hace referencia, tomaron como valor de y_s para las capas K y L_1 el siguiente:

$$y_s = \frac{0.40(Z_{2s}/137)^2}{n\xi_s}, \quad (2.48)$$

para las capas L_2 y L_3 , tomaron el valor de:

$$y_s = \frac{0.15(Z_{2s}/137)^2}{\xi_s}, \quad (2.49)$$

También obtuvieron la velocidad reducida relativista siguiente:

$$\xi_s^R = [m_s^R(\xi)]^{1/2} \xi_s, \quad (2.50)$$

4(d-4). Cálculos a partir de la teoría ECPSSR.

Existen tablas de las secciones de ionización calculadas directamente a partir de esta teoría; Cohen y Harrigan presentan tablas para las capas K y L utilizando protones y helio [16] y utilizando deuterio [17], los blancos utilizados van desde C hasta Am en el intervalo de energías de 100 keV hasta 10 MeV. Tales secciones están calculadas a partir de funciones de onda hidrogenoides no-relativistas. También se han diseñado algoritmos, los cuales son utilizados en programas de cómputo para determinar las secciones de ionización mediante la teoría ECPSSR [5]. Los cálculos de la ECPSSR utilizando protones y helio como proyectiles, muestran que para la capa K en la región de $\xi_K^R > 0.25$ las secciones presentan un ajuste dentro del 10 - 20 % con respecto a los datos experimentales, pero para $\xi_K^R < 0.25$ las predicciones sobreestiman los resultados experimentales. Discrepancias mayores se observan cuando se utilizan iones más pesados. Para el caso de las subcapas L , el ajuste es peor que con respecto al caso de las capas K , pues los valores experimentales difieren por lo general desde un 5 % hasta un 60 % para $\xi_K^R < 1$. Tales discrepancias aumentan a medida que Z_1 aumenta.

4(d-5). Correcciones a la teoría ECPSSR.

La teoría ECPSSR reduce el desacuerdo con los experimentos, pero solamente en el caso de proyectiles ligeros y para la capa K . En el caso de la ionización de la capa L , desviaciones a la teoría se observan en el intervalo de velocidades bajas de los iones incidentes. Algunos autores señalan que la corrección de ligadura, tal como se introdujo en la teoría ECPSSR, sobreestima la energía efectiva de ligadura en el límite de energías bajas para el proyectil. Se han propuesto diversas modificaciones a la teoría ECPSSR, las cuales mejoran la concordancia con los resultados experimentales, pero muchas de tales correcciones no son lo suficientemente significativas para explicar todos los desacuerdos, especialmente para la subcapa L_2 . Sarkadi y Mukoyama [18] han estudiado secciones eficaces de ionización de las subcapas L , para blancos de Au, en el intervalo de energía de 0.03 a 0.28 MeV·u⁻¹. Ellos sugieren que el mecanismo de vacante compartida entre las subcapas, podría ser la causa de tales diferencias y que el efecto neto tendrá una contribución dominante para el caso de iones pesados y para iones con velocidades bajas. La idea principal del

modelo propuesto por estos autores, es que una vacante producida por ionización directa en una de las subcapas L pudiera transferirse a otra subcapa, produciéndose como resultado la redistribución de vacantes entre las subcapas. La introducción de este modelo en las estructuras de las teorías *SCA* y *ECPSSR*, realizada por otros autores, reduce el desacuerdo con los resultados experimentales en lo que respecta a iones con velocidades bajas para las subcapas L_2 sin influencia significativa sobre las subcapas L_1 y L_3 . Así la teoría *ECPSSR* describe la ionización de las capas internas del átomo, producida por impacto con iones positivos. Las predicciones de esta teoría, han probado ser bastante buenas para la experimentación con secciones transversales de las capas K y L , utilizando elementos que emiten rayos-X con energías arriba de aproximadamente 1 keV. La utilización creciente de detectores de rayos-X con ventanas reducidas y ventanas ultradelgadas de Si(Li), los cuales poseen una resolución mejorada, permite que hasta los más débiles rayos-X provenientes de los átomos emisores (de un gran número de elementos) puedan ser analizados.

Por otra parte, en el trabajo puro y aplicado, es importante para los investigadores, tener fácil acceso a los cálculos teóricos hechos mediante la teoría *ECPSSR* para las secciones transversales, para posteriormente comparar sus resultados experimentales con los de aquella teoría y así investigar y promover modificaciones a los componentes de la teoría.

Hemos visto que, con el propósito de mejorar las predicciones de la teoría *ECPSSR*, se han realizado algunas correcciones, las cuales no se encuentran todavía en un estado final que les permita ser aplicadas directamente en el cálculo de las secciones de ionización (de manera similar a como se hace al aplicar las teorías *PWBA* y la *ECPSSR*). Estas correcciones están enfocadas principalmente al cambio en la energía de ligadura del electrón debido a la influencia del proyectil. Estudios realizados sobre las subcapas L , demuestran que en los cálculos de los cocientes $\sigma_{L_1}/\sigma_{L_2}$ y $\sigma_{L_1}/\sigma_{L_3}$ existen discrepancias significativas dependiendo del tipo de corrección por efecto de ligadura que se utilice. Esta fuerte dependencia con el tipo de corrección por ligadura, depende por una parte de la dificultad de reproducir el efecto del nodo en la función de onda del nivel $2S_{1/2}$ y por otra parte, de la forma como se considera la interacción entre el proyectil y el electrón de la subcapa en cuestión. A continuación, se mencionarán de manera cualitativa, solamente las correcciones a la teoría *ECPSSR* las cuales presentan mayor consistencia y que se encuentran más frecuentemente en la literatura.

**4(d-Si). Corrección "Separated atom approximation, SA"
(aproximación de átomo separado).**

Es considerada la determinación por efecto de ligadura efectuada por medio de la PSS, considerándose la perturbación del proyectil sobre un electrón ligado únicamente al átomo. Tal electrón es considerado independiente del proyectil durante la interacción. Es decir, el electrón no se considera formando parte de ningún tipo de estado ligado al proyectil [11].

**4(d-Sii). Corrección "United Atom, UA"
(aproximación de átomo unido).**

Cuando $\xi_x \leq 1$, es decir, cuando la velocidad de la interacción sea menor que la velocidad del electrón en el átomo, es posible la modificación de la función de onda del electrón, cambiando la energía de ligadura y la velocidad [11]. Cuando la colisión es lenta, la función de onda del electrón podrá relajarse y cambiar de manera tal, que corresponda a un estado en el cual 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, pero con un radio orbital r'_K diferente. El electrón se supone moviéndose dentro del potencial del átomo de núm. atómico $Z_2 + Z_1$, de aquí le viene el nombre de *aproximación de átomo unido (United Atom UA)*. Estudios sobre la capa K considerando esta corrección, en elementos con $22 \leq Z_2 \leq 30$, muestran mejores ajustes a los resultados experimentales que los de la ECPSR. En general se ha observado que lo anterior es útil aún para $\xi_K \leq 0.25$ en la capa K y para $\xi_x \leq 0.5$ en las subcapas L .

4(d-5iii). Corrección de aproximación considerando orbitales moleculares "MO" y la aproximación "MECPSSR".

Para esta corrección se supone que las desviaciones a los resultados experimentales se deben, a la formación de *orbitales moleculares*, denominados *MO*, en colisiones a bajas energías [11]. Se considera que si $\xi < 1$, domina la *aproximación de átomo unido UA*, por el contrario si $\xi > 1$ domina la *aproximación de átomos separados* (Separated Atoms *SA*). El efecto *MO*, se introducen funciones de manera que se de un cambio gradual y continuo entre las aproximaciones extremas, *SA* y *UA*. Todo este conjunto de consideraciones, se denota *MECPSSR*. El *MO* se traduce en este caso, como un aumento en la energía de ligadura del electrón, pero también aumenta su velocidad orbital, lo cual resulta en un aumento en la sección de ionización, pero solamente cuando Z_1 es grande y con valores pequeños de ξ se espera que el *MO* sea importante e incremente la sección de ionización. Comparaciones de la *MECPSSR* con los resultados experimentales muestran un acuerdo regular. El inconveniente, es que hay que recurrir al ajuste de parámetros con los datos experimentales, lo cual es bastante complicado y hace que no sea un modelo totalmente teórico. La *MECPSSR* sólo existe para líneas *K*.

4(d-5iv). Corrección de aproximación *UA-ECPSR*.

Esta corrección, es una simplificación en la aplicación de la *UA*, la cual consiste en determinar los valores de $\xi_s = \xi_s(UA)$ a partir de los cuales la formación del *MO* comienza a ser importante y puede tratarse por medio de la *UA* [11]. Una vez determinado tal valor, el estudio de la ionización se efectúa utilizando directamente la *ECPSR* sin ninguna otra corrección si $\xi_s > \xi_s(UA)$. Por el contrario, si $\xi_s < \xi_s(UA)$, se utiliza la *UA* en la corrección por ligadura de la *ECPSR*. Con el modelo *UA-ECPSR* se observan muy buenos resultados para las secciones de ionización de las subcapas *L* utilizando protones y helio como proyectiles. El inconveniente es que se requiere de la comparación con datos experimentales para la determinación de las $\xi_s(UA)$ de cada elemento, por lo que tampoco es un modelo totalmente teórico como el *ECPSR*.

5. RETRODISPERSIÓN DE RUTHERFORD (RBS)

Esta técnica de análisis de materiales lleva el nombre de su creador, el físico Ernest Rutherford y surgió cuando Rutherford realizaba las investigaciones que lo conducirían a establecer su modelo atómico. A *grosso modo*, esta técnica consiste en colocar el blanco elegido frente a un haz monoenergético de iones de hidrógeno, helio o cualquier otro elemento ligero, de manera que los *iones retrodispersados* provenientes del blanco como resultado de la *interacción del ion con el átomo blanco*, son detectados y analizados. Para la energía de los iones dispersados por la superficie de la muestra, se tiene la siguiente expresión:

$$E_f = KE_0, \quad (2.51)$$

donde E_0 es la energía de incidencia del ion con el que se bombardea el blanco, K es el llamado *factor cinemático de dispersión*. Este factor proporciona información sobre la masa del átomo blanco.

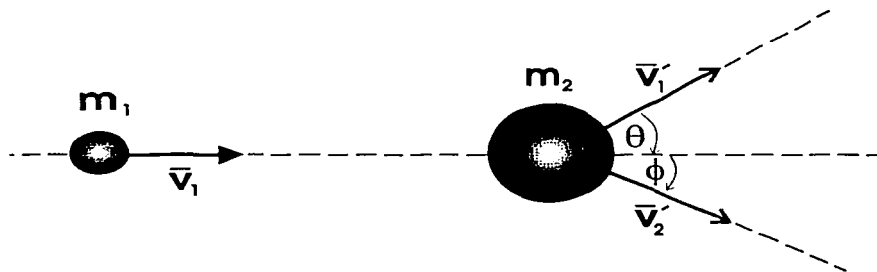


Figura 2.5 Factor cinemático de dispersión.

Si la colisión es elástica, K puede calcularse sin grandes dificultades; para ello observemos la figura 2.5. Una partícula de masa m_1 y velocidad v_1 , choca elásticamente con otra de masa m_2 la cual se halla en reposo; θ es el *ángulo de dispersión*, el cual generalmente tiene valores de 150° o mayores. Por conservación de la energía y del momento, se tienen las siguientes ecuaciones:

$$m_1 v_1 = m_1 v_1' \cos \theta + m_2 v_2' \cos \phi \quad (2.52)$$

$$0 = m_1 v_1' \sin \theta + m_2 v_2' \sin \phi \quad (2.53)$$

$$\frac{m_1 v_1'^2}{2} = \frac{m_1 v_1'^2}{2} + \frac{m_2 v_2'^2}{2} \quad (2.54)$$

elevando al cuadrado (2.52) y (2.53), y después sumándolas con las energías $E_0 = m_1 v_1^2 / 2$, $E = m_1 v_1'^2 / 2$, $E' = m_2 v_2'^2 / 2$ y eliminando el ϕ con las ecuaciones (2.51) y (2.54), tenemos:

$$E' = \frac{m_1}{m_2} E_0 + \frac{m_1}{m_2} E - 2 \frac{m_1}{m_2} \sqrt{EE_0} \cos \theta, \quad (2.55)$$

de la ec. (2.54), $E' = E_0 - E$, y al sustituir en (2.55), se tiene:

$$E \left[1 + \frac{m_1}{m_2} \right] - E_0 \left[1 - \frac{m_1}{m_2} \right] = 2 \frac{m_1}{m_2} \sqrt{EE_0} \cos \theta, \quad (2.56)$$

elevando al cuadrado. (2.56) y resolviendo la ec. de segundo grado en $K = E/E_0$, tenemos:

$$K = \left[\frac{m_1 \cos \theta + \sqrt{m_2^2 - m_1^2 \sin^2 \theta}}{m_1 + m_2} \right]^2, \quad (2.57)$$

de esta última ecuación se deduce que para átomos pesados los iones pierden poca energía, y que los átomos ligeros absorben mucho de la energía del ion incidente. Para el caso de iones pesados, la pérdida es mayor, lo mismo ocurre para ángulos mayores. Lo anterior permite distinguir elementos de masa atómica de alrededor de 40, si se fijan los parámetros bajo condiciones experimentales adecuadas. Para elementos mucho más pesados, dos de entre ellos sólo pueden distinguirse si es que su diferencia en masas es del orden de 10 uma.

Por otra parte, la *sección eficaz diferencial de dispersión* $d\sigma/d\Omega$, se define para el átomo blanco como:

$$\left[\frac{d\sigma}{d\Omega} \right] d\Omega = \frac{\text{núm. de partículas dispersadas en el ángulo sólido } d\Omega}{\text{núm. de partículas incidentes por unidad de área}}, \quad (2.58)$$

para el sistema de laboratorio, la sección eficaz diferencial se puede escribir como [15]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_0 \sin^2 \theta} \right]^2 \frac{\left[\cos \theta + \left\{ 1 - (m_1 \sin \theta / m_2)^2 \right\}^{1/2} \right]^2}{\left(1 - \left\{ m_1 \sin \theta / m_2 \right\}^2 \right)^{1/2}}, \quad (2.59)$$

donde Z_1 y Z_2 son los números atómicos del proyectil y del blanco respectivamente, e es la carga del electrón y E_0 es la energía inicial del proyectil antes de la dispersión. La ec.(2.59) toma en cuenta el retroceso del blanco; si $m_2 \gg m_1$, el retroceso es despreciable y entonces (2.59) se puede aproximar por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{E_0} \right]^2 \frac{1}{\sin \theta/2}, \quad (2.60)$$

la sección eficaz promedio σ se define como:

$$\sigma = \frac{1}{\sigma} \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega, \quad (2.61)$$

donde Ω es el ángulo sólido que subtiende el detector. Cuando un ion atraviesa una capa de material blanco, interactúa con los electrones de éste, cediéndoles parte de su energía de una manera aleatoria, con lo que, al viajar una distancia dx dentro del material, pierde una cantidad de energía dE . Si el espesor de la capa se hace cada vez más pequeño, es decir si imaginamos que $dx \rightarrow 0$, podemos definir el poder de frenamiento $S(E)$ como sigue:

$$S(E) = \frac{dE}{dx}, \quad (2.62)$$

así, consideremos la cantidad de energía perdida por las partículas del haz al entrar y salir del blanco ΔE . De la fig. 2.6 se puede deducir tal relación (en el caso de que todos los ángulos sean coplanares):

$$\theta = 180^\circ - \theta_1 - \theta_2, \quad (2.63)$$

$$E = KE_0, \quad (2.64)$$

$$E_1 = E_0 - \frac{t}{\cos \theta_1} \cdot \left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_0}, \quad (2.65)$$

$$E_2 = KE_1 - \frac{t}{\cos \theta_2} \cdot \left. \frac{dE}{dx} \right|_{KE_0}, \quad (2.66)$$

t es el espesor del blanco y el cual se expresa en unidades de longitud, dE/dx es el llamado poder de frenamiento. Considerando lo anterior, la diferencia en la energía es:

$$\Delta E = KE_0 - E, \quad (2.67)$$

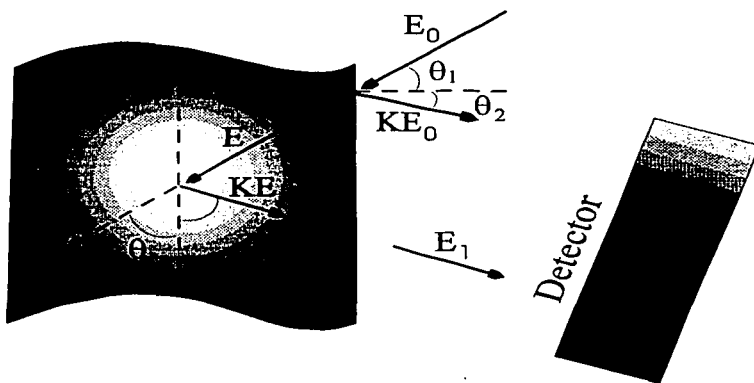


Figura 2.6 Projectiles dispersados por el blanco.

Definamos a $[S]$ como el factor de pérdida de energía de retrodispersión como:

$$[S] = \frac{K}{|\cos\theta_1|} \cdot \left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_0} + \frac{1}{|\cos\theta_2|} \cdot \left. \frac{dE}{dx} \right|_{KE} \quad (2.68)$$

de manera que podemos expresar la diferencia en la energía:

$$\Delta E = [S]t \quad (2.69)$$

Ésta es una aproximación para espesores muy pequeños. Obtenamos explícitamente la expresión para t . Sustituyendo la (2.65) en (2.66) y considerando los valores absolutos de los cosenos involucrados:

$$E_2 = K \left[E_0 - \frac{t}{|\cos\theta_1|} \cdot \left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_0} \right] - \frac{t}{|\cos\theta_2|} \cdot \left. \frac{dE}{dx} \right|_{KE} \quad (2.70)$$

quitando el paréntesis:

$$E_2 = KE_0 - K \frac{t}{|\cos\theta_1|} \cdot \left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_0} - \frac{t}{|\cos\theta_2|} \cdot \left. \frac{dE}{dx} \right|_{KE} \quad (2.71)$$

agrupando términos convenientemente:

$$KE_0 - E_2 = \frac{Kt}{|\cos\theta_1|} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_{E_0} + \frac{t}{|\cos\theta_2|} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_{KE} , \quad (2.72)$$

factorizando t :

$$KE_0 - E_2 = t \left[\frac{K}{|\cos\theta_1|} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_{E_0} + \frac{1}{|\cos\theta_2|} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_{KE} \right] , \quad (2.73)$$

despejando t :

$$t = \frac{KE_0 - E_2}{\frac{K}{|\cos\theta_1|} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_{E_0} + \frac{1}{|\cos\theta_2|} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_{KE}} , \quad (2.74)$$

Nótese de la fig. 2.6, que $KE_0 > E_2$, ya que KE_0 es la energía para un proyectil que simplemente es desviado por la superficie del blanco. Por lo cual se tiene que $t > 0$.

CAPÍTULO 3

1. DESCRIPCIÓN DE LA LÍNEA DEL HAZ DEL ACELERADOR PELETRON PARA EXPERIMENTOS CON RAYOS-X CARACTERÍSTICOS POR IMPACTO CON IONES

La línea del haz de partículas utilizada en los experimentos, es de reciente construcción [19] en el laboratorio del acelerador "Peleton" (del Instituto de Física de la Universidad Nal. Autónoma de Méx., *UNAM*). Tiene como propósito realizar experimentos de rayos-X característicos inducidos por impacto con iones, tales como mediciones de *secciones eficaces de producción de rayos-X*, así como la aplicación a otros procesos de capas internas atómicas y el análisis con haces iónicos. Las técnicas de análisis basadas en *la interacción de haces iónicos con diversos materiales* han probado tener alta sensibilidad, capacidades multielementales y muy frecuentemente, son métodos *no destructivos*. Adicionalmente, varias técnicas de análisis pueden aplicarse simultáneamente. Tal es el caso de los experimentos realizados en el presente trabajo de tesis, en los cuales se tomaron simultáneamente lecturas de *RBS* y de *PIXE*. Es posible obtener información de los contenidos de casi todos los elementos en una muestra dada.

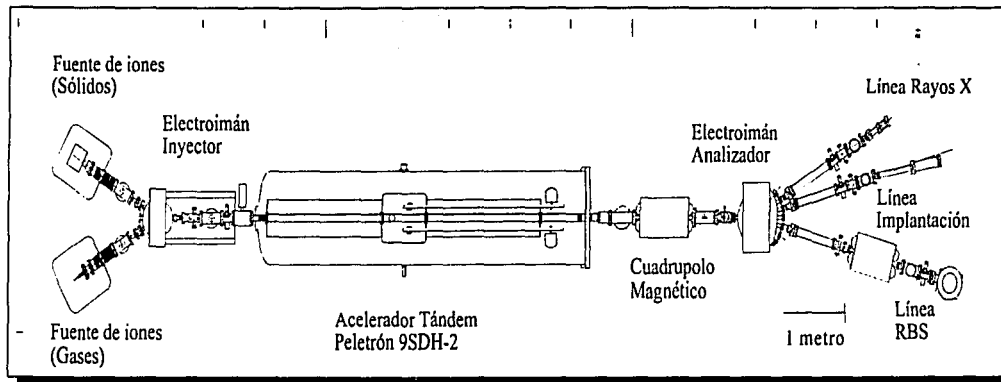


Fig. 3.1 El laboratorio del Peletrón

El acelerador "Peleton" tiene la posibilidad de dirigir el haz a través de cada una de seis líneas diferentes, $\pm 15^\circ$, $\pm 30^\circ$ y $\pm 45^\circ$, en donde 0° es la dirección original. La dirección del haz puede modificarse por medio de un conmutador el cual controla al imán de la línea. En la figura 3.1 aparece una vista superior del *Laboratorio del acelerador Peleton*. En este esquema, la línea del haz iónico utilizada para los experimentos correspondientes de rayos-X, se encuentra en el extremo superior derecho de tal figura, en la dirección de los $+ 30^\circ$ del conmutador. Como el acelerador de partículas debe trabajar en un vacío ultra-alto [20], el material seleccionado para construir la línea del haz, es principalmente acero inoxidable. Los selladores de vacío son Conflat® y Viton®. Un diagrama detallado de la línea del haz iónico se muestra en la fig. 3.2, los principales componentes de la línea son:

- a) Válvula de compuerta electro-neumática con sellos Conflat® de $4 \frac{1}{2}$ (MDC Vacuum, modelo LGV-2500-P), la cual puede aislar a la línea del resto del acelerador.
- b) Fuelle soldado, el cual conecta a la válvula con la línea misma.
- c) Segmento de tubería de acero inoxidable, con una conexión lateral utilizada para hacer el vacío o para desahogar la línea, en caso de que así lo requieran los procedimientos de mantenimiento, a través de una válvula de acceso directo.
- d) Recipiente conector, el cual contiene dispositivos para medir el vacío, también contiene un termopar (adecuado a presiones entre 10^{-1} torr y 10^{-3} torr) y un medidor iónico Bayard-Alpert (para presiones por debajo de 10^{-4} torr); el sistema de medición fué manufacturado por Granville-Phillips (Boulder, CO, USA);
- e) Un montaje de doble rendija (NEC modelo 2EA039041), con el cual se colima el haz iónico, mejorando la resolución en la energía y el estado de la carga del haz iónico.
- f) Monitor de perfil del haz, o BPM, (NEC modelo 2EA008242), para monitorear la simetría del haz y de la sección transversal;
- g) Caja de Faraday (NEC modelo 2EA059590), con el cual se mide la corriente del haz que está entrando a la línea; la caja de Faraday es capaz de medir haces con una potencia hasta de 50 W;
- h) Válvula de compuerta electro-neumática, con selladores Conflat® de $2 \frac{1}{4}$ (MDC Vacuum modelo LGV-1500-P), para separar el vacío en la línea del haz y en la cámara de dispersión;

- i) Conexión con medidor de vacío Bayard-Alpert en forma de codo, para medir la presión en la cámara.
- j) Fuelle soldado, para proveer de movimiento independiente a la cámara de dispersión, la cual está conectada a la línea, para poderla alinear adecuadamente.
- k) Cámara de dispersión, la cual se describe posteriormente con más detalle.

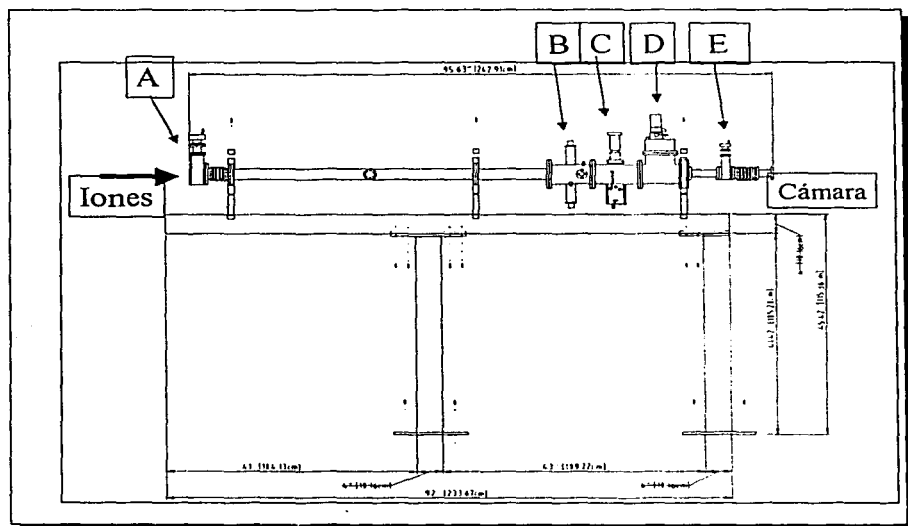


Figura 3.2 Línea del haz utilizada en los experimentos realizados en este trabajo (en la fig. 3.1 es la que se encuentra en la parte superior derecha).

Descripción de la fig. 3.2:

- **A: Válvula**
- **B: Rejillas colimadoras**
- **C: Monitor de perfil de haz**
- **D: Caja de Faraday**
- **E: Válvula**

Además, la línea está soportada en su totalidad por una base de acero, con un soporte independiente para la cámara de dispersión. La energía eléctrica está provista a través de una línea trifásica (el autor de este trabajo de tesis construyó tal línea [19]), la cual está integrada por tres componentes las cuales sirven para:

- i) Alimentar las bombas de vacío;
- ii) Alimentar las válvulas;
- iii) Alimentar la electrónica nuclear requerida.

1(b). Cámara de dispersión

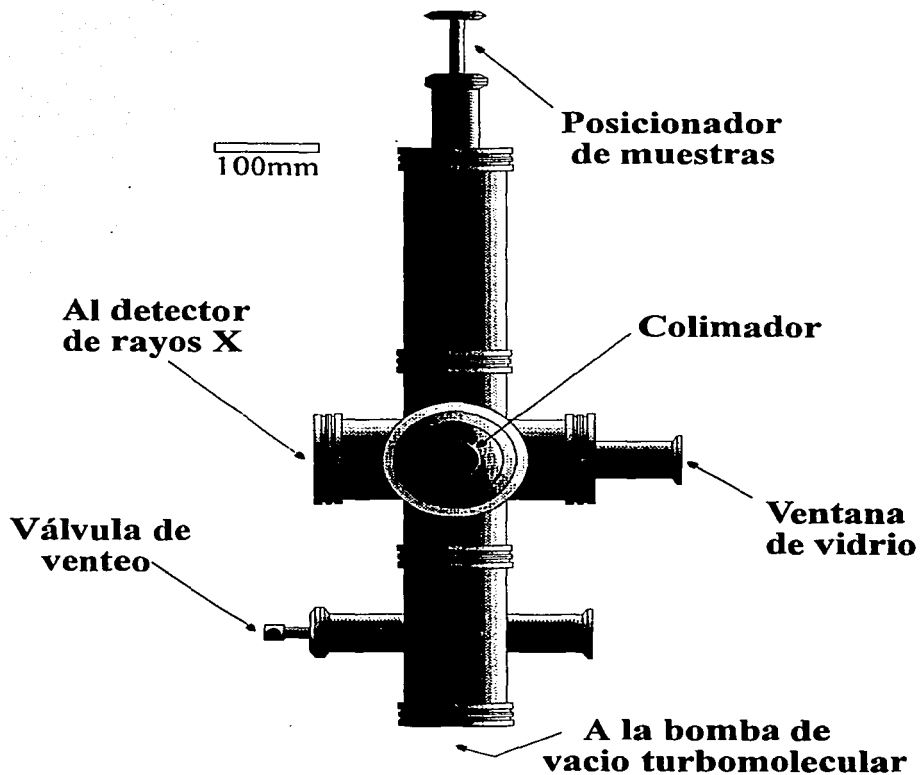


Fig. 3.3 Cámara de análisis utilizada en los experimentos.

La cámara de dispersión es del tipo de cruz de seis conectores; está hecha de acero inoxidable, con bridas para vacío ISO 100 en cada extremo (ver la fig. 3.3). Este tipo de conectores fué elegido, ya que frecuentemente se necesita intercambiar diferentes componentes de la cámara, o debido también a que se puede necesitar abrirla para cambiar la muestra. En tal figura, se muestra una vista frontal de la cámara de dispersión, tal como la "vería" el haz iónico entrante, el cual penetra a través del colimador hacia el centro de la cámara. Obsérvese el posicionador de muestras situado en lo alto de la cámara, mientras que la bomba turbomolecular se localiza en la parte inferior. Tal bomba turbomolecular es del modelo Alcatel 5101-TMP y está separada de la cámara por una válvula de compuerta modelo MDC Vacuum LGV-4500. La bomba tiene una velocidad de bombeo de 100 L/s para N₂. La bomba turbomolecular está soportada por una bomba mecánica Alcatel modelo CE-2005 (6.5 m³/h). Un ensamble de válvulas y de "tes" (conexiones en forma de letra t) es utilizada para eliminar el aire que pudiera entrar al cambiar las muestras. Cabe especificar, que las presiones típicas de operación en el interior de la cámara son de 10⁻⁵ a 10⁻⁶ torr [20]. En la figura 3.4 se muestra una vista superior de la cámara. El colimador del haz está localizado en la desembocadura de la cámara, muy cerca del resto de la línea, lugar donde precisamente se encuentra una conexión para instalar un detector de partículas; en el extremo opuesto, se encuentra una caja de Faraday con la cual se mide la corriente del haz, incluyendo conexiones eléctricas para conectar el supresor de electrones secundarios de la caja de Faraday y un segundo detector de partículas. Todas estas conexiones eléctricas utilizan conectores del tipo BNC en el lado exterior. La caja de Faraday utiliza una pila de 300 V para suprimir los electrones secundarios. La cámara, en sus conexiones laterales, posee una ventana destinada a un detector de rayos-X. Esta ventana está montada en un cilindro de aluminio insertado en la cámara y sirve para obtener el ángulo sólido del detector de rayos-X a través de la muestra. En este cilindro, la cámara está aislada de la atmósfera mediante una película de Mylar® de 12 µm de grosor. Este espesor es muy conveniente, pues con él, los rayos-X con energías bajas del orden de 1 keV, pueden detectarse sin mucha dificultad. Sin embargo, otro tipo de filtros puede ser fácilmente instalado para reducir la producción de rayos-X en el detector, siempre que sea necesario. Por otra parte, los detectores de partículas están localizados ambos en las direcciones delantera y trasera

(utilizando la dirección del haz incidente como referencia), y es precisamente con ellos que se lleva a cabo el análisis de “retrodispersión de iones” (RBS). Los detectores son colocados a ángulos de 155° para RBS.

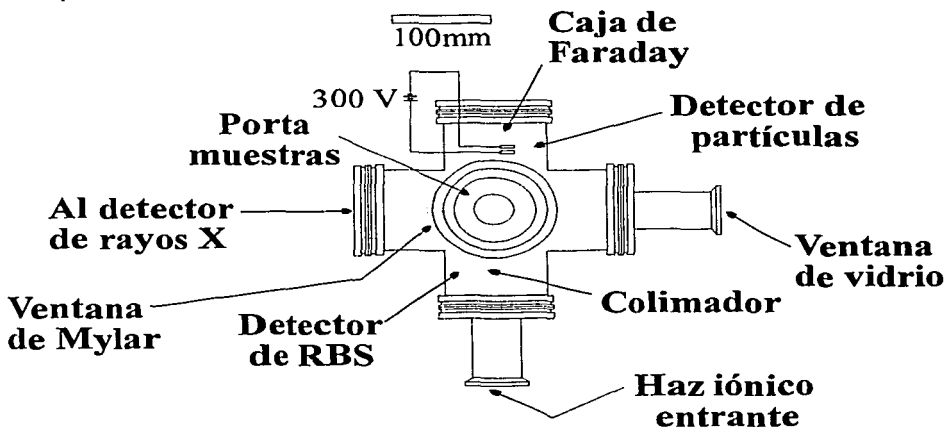


Fig. 3.4 Detalle de la cámara de análisis (vista superior).

En la figura 3.4, se muestra una vista superior de la cámara de dispersión, en la cual aparece la *dirección del haz iónico entrante*. Las líneas punteadas, indican los varios componentes situados en el interior de la cámara. El posicionador de muestras puede ser de varios tipos. Cuando un gran número de muestras tiene que analizarse, se utiliza un alimentador de movimiento lineal, el cual está soportado por una armazón de aluminio con las muestras. Tales muestras tienen un tamaño máximo de alrededor de $50 \text{ mm} \times 50 \text{ mm}$. Así, el desplazamiento vertical de la estructura de aluminio del posicionador, permite ubicar a la muestra para su irradiación con el haz. Para obtener el mayor ángulo sólido posible subtendido por el detector de rayos-X, el ángulo del haz incidente con respecto a la muestra es de 45° , mientras que el detector de rayos-X se coloca a 90° con respecto de la dirección del haz iónico.

1(c). Detectores y electrónica asociada

La radiación se mide utilizando diferentes tipos de detectores de rayos-X. Por ejemplo, pueden medirse de dos maneras diferentes, ya sea utilizando detectores de silicio contaminado con litio, los cuales son conocidos como detectores Si(Li); o pueden captarse con detectores de germanio de alta pureza (HPGe o LEGe, germanio de baja energía). La elección sobre que tipo de detector utilizar, depende de la eficiencia requerida para las diferentes energías de los rayos-X utilizados. En las mediciones sobre rayos-X provenientes de elementos tales como Mo, Ag o Sn, dan mejores resultados los detectores de LEGe, mientras que los detectores de Si(Li) son más sensibles para rayos-X provenientes de elementos tales como Al o Si. En los experimentos realizados en este trabajo de tesis, se utilizaron detectores LEGe. Por otro lado, la detección iónica se realiza con detectores de barrera superficial, o bien con detectores planos con silicio implantado (PIPS), este último tipo de detectores fué el que se utilizó en los experimentos del presente trabajo de tesis. El segundo tipo de detectores, desarrollados más recientemente, han demostrado ser mejores que los detectores precedentes, ya que tienen mejor resolución, su superficie puede limpiarse y su costo es menor. Sin embargo, debe tenerse cuidado al elegir *la profundidad de agotamiento*, considerándose diferentes intervalos de incidencia de los iones dentro de los detectores, dependiendo de sus masas y energías. Por otra parte, la electrónica asociada para la recolección de datos durante un experimento típico, está esquematizada en la figura 3.5, donde puede observarse que cada preamplificador está conectado con su correspondiente detector. Los preamplificadores utilizados en esta línea son Ortec®, modelo 142-A. Los amplificadores son Canberra®, modelo 2026 para el detector LEGe, mientras que para los detectores de partículas se instalaron amplificadores Canberra®, modelo 2022. Dependiendo del número de parámetros que deban medirse simultáneamente, podrá ser necesario utilizar un enrutador-multiplexor digital Oxford® DMR-II, el cual permite el procesamiento de ocho señales simultáneas. Para el caso de nuestra cámara, de dos a tres señales se utilizan normalmente y para el caso particular de nuestros experimentos, se realizaron medidas mediante PIXE y RBS.

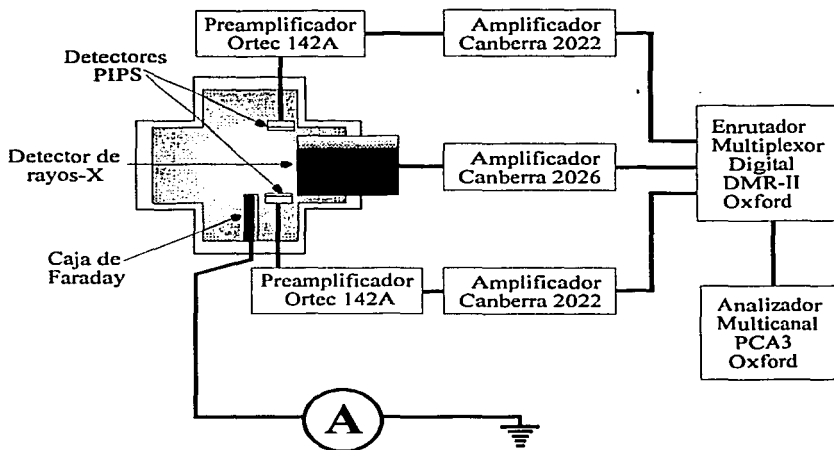


Figura 3.5 Sistema de detección y análisis de datos.

En la figura anterior, puede observarse que para coleccionar los datos provenientes del enrutador-multiplexor digital Oxford® DMR-II, es necesario utilizar el código de computadora PCA3, el cual es un emulador analizador multicanal (el cual es un programa de cómputo que viene anexo de fábrica con el hardware al que se hace mención). Tales datos se almacenan en diskettes para su posterior análisis, para lo cual se utilizan diversos programas especiales.

1(d). La eficiencia de los detectores utilizados en los experimentos

El primer paso en la caracterización de la cámara para poder realizar las operaciones normales de la experimentación, es realizar la medida de la eficiencia del detector de rayos-X. Este procedimiento, es por lo común realizado mediante el uso de películas patrón (Micromatter® Co. Deer Harbor, WA, USA), las cuales están hechas de metales puros o compuestos. Estas películas (con espesor de alrededor de $50 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ certificadas al 5%), están depositadas sobre sustratos de Mylar® de $3.5 \mu\text{m}$ de espesor. Los rayos-X y los iones retrodispersados se detectan simultáneamente, por medio de un haz incidente de protones (en un intervalo de energías típicas de 2.0 MeV a 2.5 MeV). Se utilizan las líneas de rayos-X K de elementos con núm. atómico entre 13 y 35 (Al a Br), ya que las secciones eficaces de producción de rayos-X para estas líneas y con tales energías de los iones, son bien conocidas, razón por la cual se realiza la calibración con ellas. El detector es *menos eficiente* para los rayos-X provenientes de elementos ligeros, debido a que son absorbidos en las diferentes ventanas a través de su recorrido hacia el detector. La detección de los iones retrodispersados es necesaria para tener una medición absoluta de la carga total incidente sobre la muestra en cuestión. Alternativamente, es posible detectar protones dispersados sobre el sustrato de Mylar® para integrar la corriente, o usar la caja de Faraday con tal propósito; sin embargo, se ha encontrado que las mediciones de la corriente absoluta en este último caso, son menos exactas que los otros tipos de mediciones anteriores.

2. LAS MUESTRAS UTILIZADAS EN EL EXPERIMENTO

De entre las características que las películas delgadas deben tener preferentemente, son que deben ser uniformes, isomorfas y estables a través del tiempo y durante la irradiación [7]. Los métodos generales de preparación de las muestras han sido revisados ya en otra parte por Amsel y Davies [25].

Para el depósito de películas delgadas, pueden utilizarse evaporadores comerciales, pero con frecuencia, para materiales con punto de fusión por debajo de los 1000 °C, resulta adecuada una simple cámara de vacío provista de un filamento incandescente sobre el cual se colocará el material a ser depositado. La distancia del depósito al filamento-muestra o recipiente de un material refractario (tales como Mo, W, Ta, o Pt) debe ser lo suficientemente grande como para asegurar que las variaciones en grosor a través de la superficie de la muestra sean suficientemente pequeñas. Por otro lado, la utilización de *evaporadores de haz de electrones* es necesaria para el depósito de materiales de punto de fusión elevado, con la ventaja de que los materiales depositados mediante esta técnica, están sujetos a menor contaminación (en comparación con la técnica de los evaporadores de filamento).

En particular, los blancos utilizados en estos experimentos se prepararon mediante la evaporación de polvo de YbF_3 en un bote de molibdeno a una temperatura cercana a los 1000 °C y una presión de 10^{-6} torr.

3. MEDICIÓN DE LAS SECCIONES DE PRODUCCIÓN DE RAYOS-X L

Para la determinación de las secciones de producción de rayos-X por incidencia con iones, se pueden utilizar blancos gruesos o delgados. Las mediciones de estas secciones utilizando blancos gruesos, presenta el inconveniente de que se necesita de un conocimiento muy exacto y preciso del frenamiento del ion en el blanco, los coeficientes másicos de atenuación, la densidad atómica del blanco y el valor de la carga acumulada en el blanco durante el experimento, la cual es difícil de medir en muchos casos cuando se tienen blancos gruesos. Además, para tener valores específicos mediante este método, es necesario bombardear a diferentes energías, con pequeños intervalos de separación. La utilización de blancos delgados para medir estas secciones, es más común, ya que es más preciso, pues si se consideran los iones retrodispersados, no es necesario conocer la densidad atómica del blanco, ni la carga acumulada en el mismo.

Por otra parte, cuando se bombardea un blanco delgado con iones de energía E_0 y se registran simultáneamente los rayos-X inducidos junto con los iones retrodispersados, la sección de producción de rayos-X, $\sigma_j^X(E_0)$ ($j = \alpha, \beta, etc.$) del blanco, queda determinada por:

$$\sigma_j^X(E_0) = \frac{N_X \sigma_R \Omega_R}{\varepsilon N_R} \quad (3.1)$$

donde ε y N_X son respectivamente la eficiencia del sistema de detección de rayos-X y el número de fotones de rayos-X detectados para la línea de emisión j en cuestión, N_R es el núm. de iones retrodispersados por los átomos blanco, σ_j^X es la sección eficaz de producción de rayos-X, σ_R la sección eficaz de retrodispersión, Ω_R el ángulo sólido subtendido por el detector de partículas. La determinación de los valores experimentales para la eficiencia ε se describe al principio del siguiente capítulo.

4. DESARROLLO EXPERIMENTAL

Los experimentos se realizaron en el *Instituto de Física de la Universidad Nal. Autónoma de México (IFUNAM)*, en el laboratorio donde se encuentra el acelerador *Peleton NEC 9SDH-2* de 3 MV, [21]. El blanco utilizado en el bombardeo con iones pesados, fue de YbF_3 . La película delgada está evaporada sobre un sustrato grueso de carbón pirolítico. Esto es con el fin de evitar la retrodispersión de iones por parte del sustrato o la producción de rayos-X detectables causados por contaminantes en éste. Además, mediante la utilización del *portamuestras móvil* (ver fig. 3.3), fué posible impactar en dos ocasiones a algunas de las muestras de V, Co, Ni, Zn, Ge y CuSx (para realizar la calibración del sistema de detección) y para la muestra de YbF_3 (para la obtención de las secciones eficaces de producción de rayos-X). En el sistema experimental utilizado, es posible tener una detección simultánea de los rayos-X emitidos (mediante *PIXE*) y de los iones retrodispersados (mediante *RBS*), de manera que es posible realizar mediciones exactas de la carga total incidente sobre el blanco. Para detectar los rayos-X, se utilizó un detector *LEGe* Canberra GL0055P con resolución de 155 eV a 5.9 keV, y un amplificador Canberra 2026. Para detectar los iones retrodispersados se usó un detector *PIPS* Canberra, con área activa de 25 mm², conectado a un preamplificador Ortec 142B y un amplificador Canberra 2022. Para la obtención de los espectros se utilizó un multicanal *Oxford PCA*, y empleándose un multiplexor-enrutador digital *Oxford Telenec DMR-108* para con ello poder tener un registro simultáneo de los dos tipos de espectros obtenidos (de *PIXE* y de *RBS*). El análisis de los espectros de rayos-X se realizó mediante el programa de cómputo *AXIL / QXAS* (Van Espen *et al.* [22]). Los espectros de retrodispersión se analizaron mediante el programa de cómputo *PCA3* para medir el área de las distribuciones. La eficiencia del detector se determinó mediante el bombardeo de blancos de película delgada ya calibrados, depositados en Mylar® de 3.5 µm de espesor (Micromatter®, Deer-Harbor, WA, USA), los cuales fueron irradiados con protones en el intervalo de energía de 2 a 2.5 MeV, para lo cual se utilizó el procedimiento sugerido por Pajek *et al.* [23], ya que con este método, las secciones eficaces de ionización para protones de estas energías se han medido con exactitud, habiéndose publicado secciones eficaces de referencia (Paul y Sarcher [24]). En los experimentos, se utilizó la retrodispersión de iones para la medición de la carga total incidente. En

la figura 3.6 se muestra el esquema del dispositivo experimental utilizado. Las secciones eficaces de producción de rayos-X se evalúan a partir del número de fotones de rayos-X emitidos y del número de iones retrodispersados a través de la ecuación (3.1). Los iones incidentes para la medición de las secciones eficaces de producción de rayos-X fueron $^{12}\text{C}^{4+}$, $^{16}\text{O}^{4+}$ y $^{19}\text{F}^{3+}$ con energías entre $0.5\text{ MeV}\cdot\text{u}^{-1}$ y $0.75\text{ MeV}\cdot\text{u}^{-1}$.

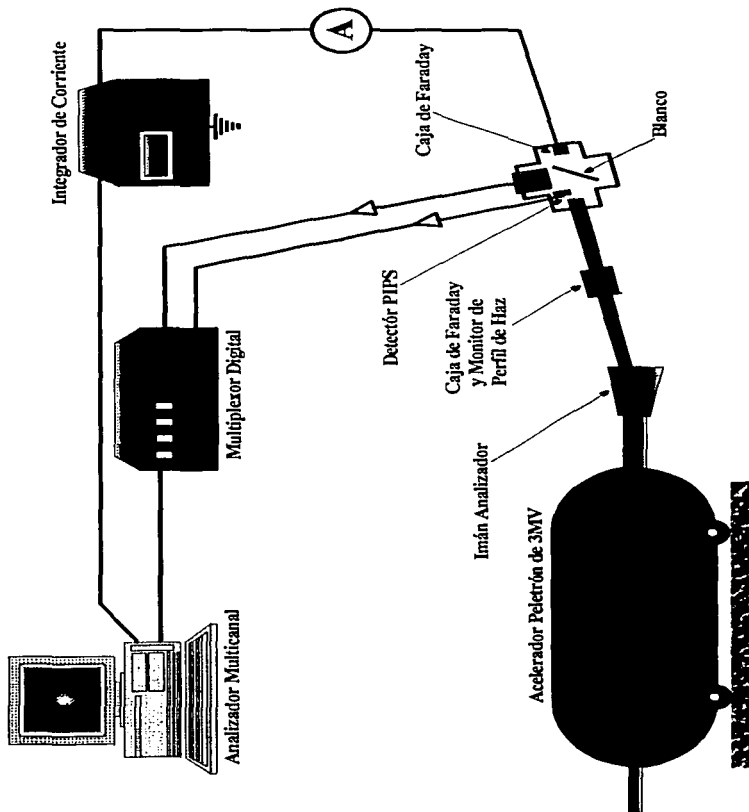


Figura 3.6 Esquema del dispositivo experimental.

CAPÍTULO 4

1. RESULTADOS

1(a). Calibración del sistema de detección, "la eficiencia"

Para determinar la eficiencia ε de nuestro sistema de detección de rayos-X, se utilizó la ecuación (3.1). Mediante la utilización simultánea de la técnica *PIXE* y de *RBS*, se colectaron los datos necesarios.

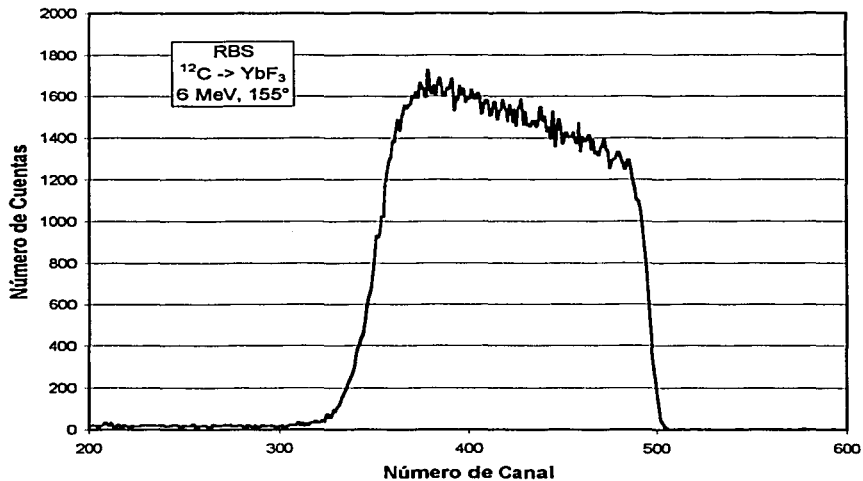


Figura 4.1 Ejemplo de espectro obtenido mediante la técnica de *RBS*.

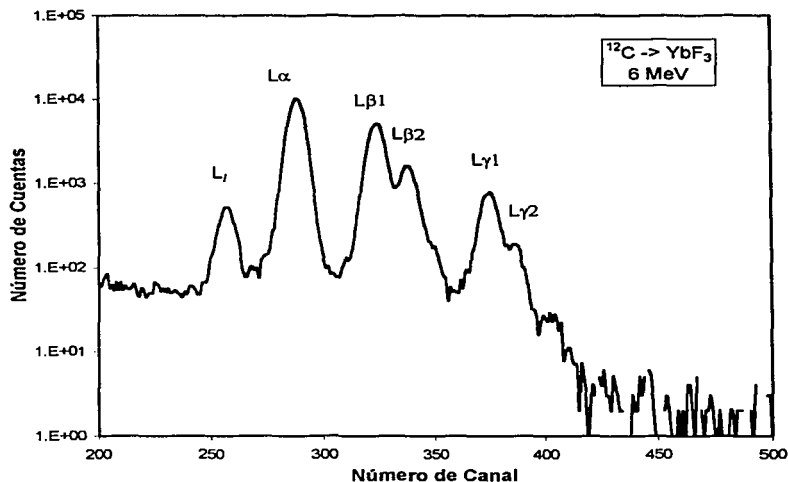


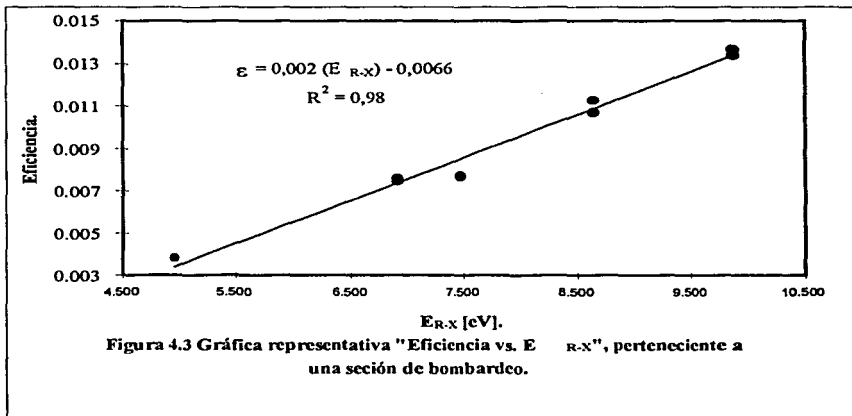
Figura 4.2 Ejemplo de espectro obtenido mediante la técnica de *PIXE*.

En la figura 4.1 se muestra un ejemplo de espectro obtenido mediante la técnica de *RBS*, mientras que en la figura 4.2 se muestra un ejemplo de espectro obtenido mediante la técnica de *PIXE*. El valor de $\sigma_j^x(E_0)$ se obtuvo por medio de la ecuación (2.1). A su vez, los valores de $P_{K\alpha}$ y ω_K , se tomaron de la tabla de datos 14.20 (referencia [7]) para la capa *K*. El valor para σ_{IK} se obtuvo por medio del programa de cómputo *ISICS*. Los demás valores para obtener ε mediante la ec. (3.1), corresponden a datos experimentales obtenidos mediante la aplicación simultánea de las técnicas de *PIXE* y *RBS*. Posteriormente, se graficó la eficiencia como función de la energía E_{R-X} de los rayos-X correspondientes a la subcapa K_α (los valores de tal energía fueron tomados también de las Tabla de datos 14.20). A través del procedimiento descrito

anteriormente, se obtuvieron ecuaciones para la recta mejor ajustada a los puntos experimentales obtenidos, de la siguiente forma:

$$\varepsilon = mE_{R-X} + b; \quad (4.1)$$

Para cada sesión experimental de bombardeo se obtuvieron datos para la calibración. El ion utilizado en cada una de dichas secciones fué H^+ , con intervalo de energías típicas de 2.0 MeV a 2.5 MeV. Los blancos utilizados fueron películas delgadas patrón Micromatter® de V, Co, Ni, Zn, Ge y CuSx. A cada blanco bombardeado le corresponde su valor específico E_{R-X} . A continuación, se muestra una gráfica representativa de ε en función de E_{R-X} .



En donde la diferencia entre la calibración realizada para las diferentes secciones experimentales es del 10%.

1(b). Obtención del espesor de blancos utilizados en los experimentos

El espesor t de las muestras utilizadas, se obtuvo sustituyendo los valores experimentales y teóricos correspondientes en la ec. (2.74). Nótese que el denominador de la ec. (2.74), es el *factor de pérdida de energía de retrodispersión* [S], el cuál está definido por medio de la ec. (2.68). Los valores para [S], se obtuvieron mediante el programa de cómputo *TRIM / Versión - 95.9* [26] (los valores que se generaron mediante tal programa, se obtuvieron en unidades de keV/ μm). Para todas las sesiones de bombardeo se usó la misma muestra de YbF_3 (la cual se bombardeó en cuatro puntos diferentes mediante la manipulación del portamuestras móvil ya mencionado) y para cada sesión experimental se obtuvo el correspondiente espesor t . Finalmente se obtuvo el valor promedio total \bar{t}_{total} sobre todas las sesiones de bombardeo.

Por lo tanto, el espesor promedio de la muestra de YbF_3 utilizada durante las tres sesiones de bombardeo (una sesión se bombardeó con $^{12}\text{C}^{4+}$, otra con $^{16}\text{O}^{4+}$ y la última con $^{19}\text{F}^{5+}$), fué el siguiente:

$$\bar{t}_{total} = 0.63 \pm 0.16 \mu\text{m} \quad (4.2)$$

la incertidumbre es la desviación estándar de los datos [28].

La dispersión grande de los espesores medidos con cada ion se debe a variaciones importantes en los *poderes de frenado* dados por el programa de cómputo *SRIM* [26], los cuales aparentemente, no son muy exactos. Al respecto y hasta la fecha no existe otro programa mejor, razón por la cual, tales desviaciones grandes son frecuentes aún en los artículos publicados a nivel internacional sobre temas afines.

**1(c). Obtención experimental de las Secciones de ionización
y de producción de rayos-X"**

Para obtener los valores experimentales de las secciones de producción de rayos-X σ_X , para las capas L, se utilizó el impacto con iones de $^{12}\text{C}^{4+}$, $^{16}\text{O}^{4+}$ y $^{19}\text{F}^{5+}$, con energías entre 0.5 MeV/uma y 0.75 MeV/uma. Los blancos utilizados fueron de YbF_3 , cuyo espesor se indicó más arriba. Los valores experimentales de σ_X se obtuvieron por medio de la ec. (3.1), en donde los valores para las eficiencias, se obtuvieron a partir de las ecuaciones de la forma 4.1. Los demás datos experimentales para la ec. (3.1) se obtuvieron también por medio de la aplicación simultánea de las técnicas de *PIXE* y *RBS*. A continuación, se presentan *las secciones eficaces de producción de rayos-X* correspondientes a las líneas que se logró identificar sin dificultad (las más intensas).

Tabla 1. Secciones eficaces de producción de rayos-X, correspondientes a las subcapas $L\alpha$, $L\beta$ y $L\gamma$.

| Energía [MeV·u ⁻¹] | Ion: $^{12}\text{C}^{4+}$. | | Blanco: YbF_3 . | |
|-----------------------------------|-----------------------------|---------------------|--------------------------|----------------------|
| | $L\alpha$ [barns] | $L\beta$ [barns] | $L\beta$ [barns] | $L\gamma$ [barns] |
| 0.50 | 1.48 | 0.82 | | 0.10 |
| 0.54 | 2.02 | 1.09 | | 0.12 |
| 0.58 | 2.58 | 1.38 | | 0.16 |
| 0.62 | 3.23 | 1.71 | | 0.20 |
| 0.67 | 4.12 | 2.12 | | 0.24 |
| 0.71 | 5.58 | 2.81 | | 0.30 |
| 0.75 | 7.56 | 3.76 | | 0.40 |

Tabla 2. Secciones eficaces de producción de rayos-X, correspondientes a las subcapas $L\alpha$, $L\beta$ y $L\gamma$.

| Ion: $^{16}\text{O}^{4+}$. | | Blanco: YbF_3 . | |
|-----------------------------|----------------------|--------------------------|----------------------|
| Energía [MeV·u $^{-1}$] | $L\alpha$ [barns] | $L\beta$ [barns] | $L\gamma$ [barns] |
| 0.50 | 3.06 | 1.69 | 0.17 |
| 0.54 | 3.88 | 2.08 | 0.21 |
| 0.60 | 5.18 | 2.74 | 0.27 |
| 0.62 | 8.23 | 4.10 | 0.43 |
| 0.67 | 9.80 | 4.80 | 0.53 |
| 0.70 | 13.04 | 6.34 | 0.67 |
| 0.74 | 13.63 | 6.57 | 0.70 |

Tabla 3. Secciones eficaces de producción de rayos-X, correspondientes a las subcapas $L\alpha$, $L\beta$ y $L\gamma$.

| Ion: $^{19}\text{F}^{5+}$. | | Blanco: YbF_3 . | |
|-----------------------------|----------------------|--------------------------|----------------------|
| Energía [MeV·u $^{-1}$] | $L\alpha$ [barns] | $L\beta$ [barns] | $L\gamma$ [barns] |
| 0.50 | 0.81 | 0.32 | 0.03 |
| 0.58 | 1.43 | 0.57 | 0.04 |
| 0.62 | 1.85 | 0.73 | 0.04 |
| 0.67 | 1.69 | 0.66 | 0.04 |
| 0.70 | 2.08 | 0.81 | 0.05 |
| 0.75 | 2.91 | 1.13 | 0.07 |

A continuación se muestran las gráficas respectivas obtenidas a partir de las tablas 1, 2 y 3. En ellas se grafican las secciones eficaces de producción de rayos-X para la línea $L\alpha$ en función de las energías sobre unidad de masa atómica.

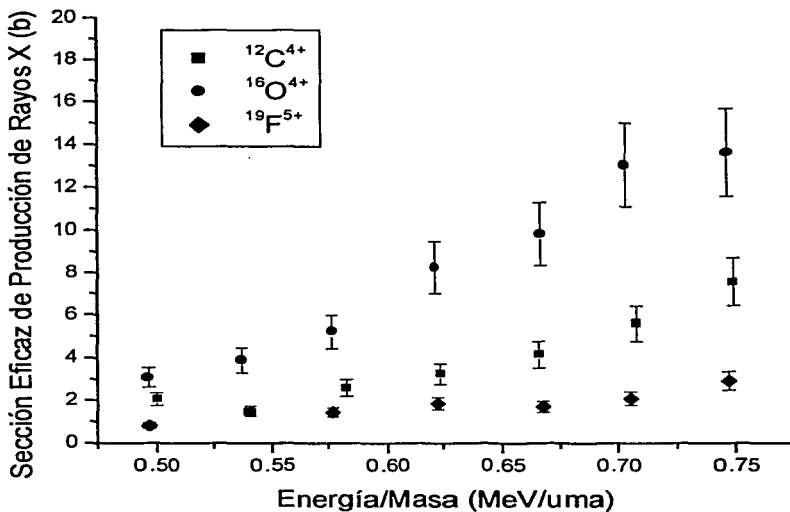


Figura 4.4 Comparación gráfica entre nuestros resultados experimentales sobre las secciones eficaces de producción de rayos-X para la línea $L\alpha$ obtenidas mediante iones de $^{16}\text{O}^{4+}$ (gráfica superior), mediante iones de $^{12}\text{C}^{4+}$ (gráfica intermedia) y mediante iones de $^{19}\text{F}^{5+}$ (gráfica inferior).

En las figuras 4.5 y 4.6, se muestra la comparación gráfica entre nuestros resultados, entre los resultados obtenidos por Bogdanovic (*et al.* [4] y [4']) y entre las predicciones de la teoría *ECPSSR*.

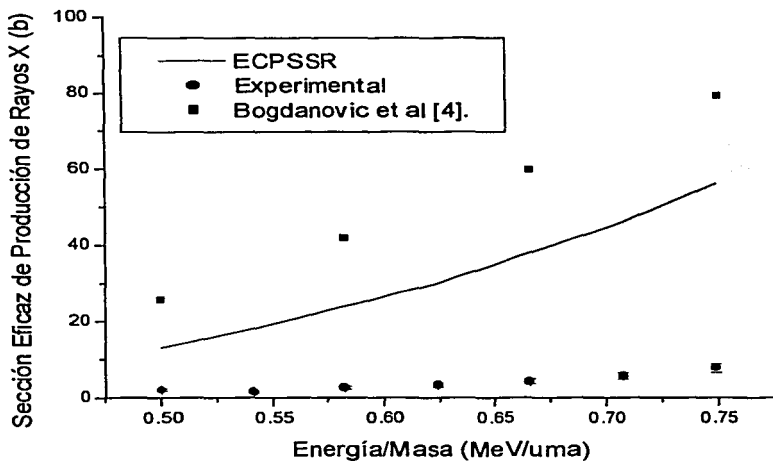


Figura 4.5 Comparación gráfica entre nuestros resultados experimentales para la línea $L\alpha$ (gráfica inferior), entre los datos teóricos [5] (gráfica intermedia) y entre los resultados obtenidos por Bogdanovic *et al.* [4] (gráfica superior). Para estas gráficas se consideraron iones de $^{12}\text{C}^{4+}$.

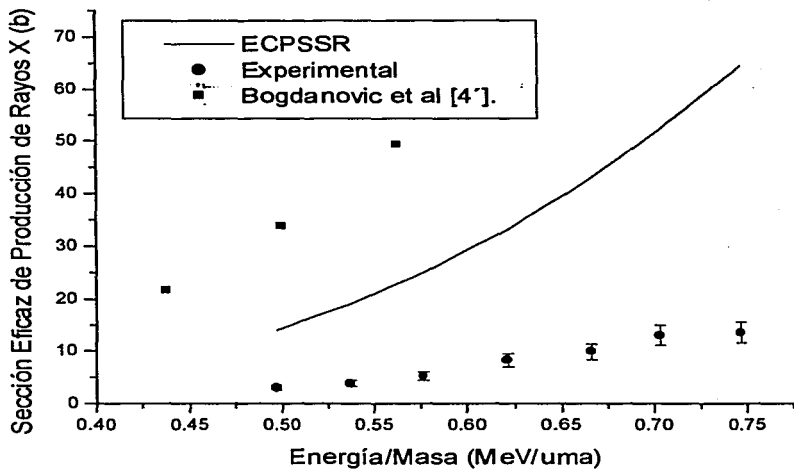


Figura 4.6 Comparación gráfica entre nuestros resultados experimentales para la línea $L\alpha$ (gráfica inferior), entre los datos teóricos [5] (gráfica intermedia) y entre los resultados obtenidos por Bogdanovic *et al.* [4] (gráfica superior). Para estas gráficas se consideraron iones de $^{16}\text{O}^{4+}$.

Por último, mostramos en la figura 4.7, la comparación entre nuestros resultados y entre la predicción de la teoría *ECPSSR*.

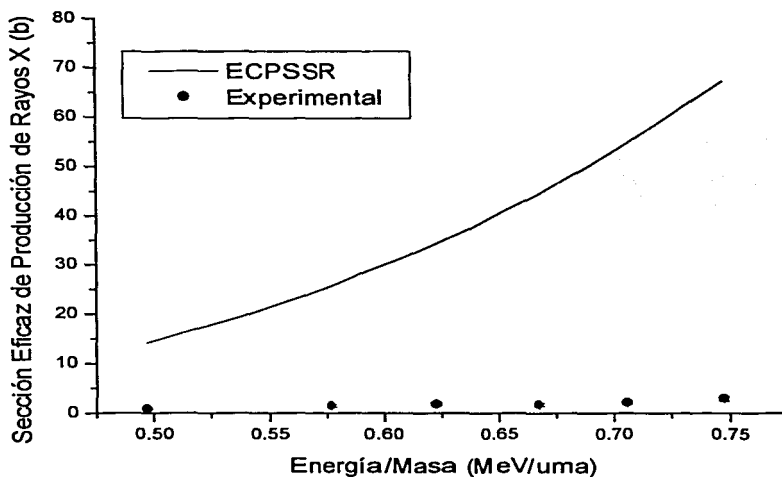


Figura 4.7 Comparación gráfica entre nuestros resultados experimentales para la línea $L\alpha$ (gráfica inferior) y entre los datos teóricos [5] (gráfica superior). Para estas gráficas se consideraron iones de $^{19}\text{F}^{5+}$.

2. DISCUSIÓN

En las gráficas correspondientes a las figuras 4.5 y 4.6 observamos que la teoría *ECPSSR* [5] no coincide con los resultados experimentales obtenidos por Bogdanovic *et al.* [4] y [4'], ni con los resultados experimentales obtenidos en nuestros experimentos. Las predicciones de la teoría *ECPSSR* quedan en medio de nuestros resultados y los obtenidos por Bogdanovic. Tales resultados eran de esperarse, pues de hecho ya en la subsección 4(d-4) de este trabajo, se menciona que los cálculos teóricos realizados a través de la teoría *ECPSSR* para las líneas *L* mediante la utilización de iones pesados, tiene un ajuste malo con respecto a los valores experimentales y que tales discrepancias son por lo general de un 5% a un 60%; tales discrepancias aumentan a medida que Z_1 (número atómico del ion utilizado) aumenta. Una de las razones por las que la teoría no predice bien los resultados experimentales, es que los parámetros atómicos (transiciones Coster-Kronig y las fluorescencias) no son lo suficientemente correctos y en la actualidad se realizan trabajos destinados a la obtención de una mejor medición de los mismos. La teoría *ECPSSR* es muy elemental aún y no incluye efectos como la formación de moléculas durante la colisión ion-átomo, o la ionización múltiple la cual altera la configuración de la nube electrónica del átomo blanco.

A partir de las mismas figuras 4.5 y 4.6, puede observarse que nuestros resultados experimentales están más alejados a los resultados obtenidos por Bogdanovic. Lo anterior se debe a que los trabajos realizados por Bogdanovic son más sistemáticos y con mayor antigüedad en el campo. Así, este nuestro primer experimento permitirá realizar correcciones a experimentos futuros ya que hasta la fecha en el *Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México*, el presente trabajo de tesis constituye una de las primeras investigaciones al respecto utilizando iones pesados para las capas *L*. Otro factor que influyó notablemente en el hecho de que nuestro resultados experimentales estén más alejados de las predicciones teóricas, es que nuestras películas son demasiado gruesas (*ver sección 1(b) anterior*) y con ello el frenamiento de los iones podría afectar al reducir la energía de los iones dentro de la película. Esto hace que se subestime la

sección eficaz de producción de rayos-X. Por el contrario, en los trabajos realizados por Bogdanovic *et al.* [4] y [4'] vemos que el espesor de las películas utilizadas es más delgado en comparación con el de nuestras películas, razón por la cual sus resultados experimentales están por encima de las predicciones hechas por la teoría *ECPSSR*.

Por otro lado, tomando en cuenta las figuras 4.5, 4.6 y 4.7, vemos que entre mayor es el valor para Z_1 , nuestros resultados experimentales se alejan más de las predicciones teóricas hechas por la *ECPSSR*, razón por la cual no fué posible observar la dependencia de las secciones de producción de rayos-X con el número atómico del proyectil. Lo único que puede afirmarse, es que efectivamente, la teoría *ECPSSR* parece ajustarse aún menos a los resultados experimentales a medida que aumenta el número atómico del proyectil utilizado.

Observando la figura 4.7, podemos decir que a partir de nuestros resultados experimentales, puede observarse la existencia de una tendencia al aumento de la sección eficaz de producción de rayos-X a medida que Z_1 decrece. También es posible observar que la sección eficaz de producción rayos-X aumenta a medida que la energía del ion utilizado aumenta.

3. CONCLUSIONES

De las figuras 4.5 y 4.6, vemos que pese a que utilizamos una aproximación a primer orden (Para una estimación de la diferencia que se tiene al tomar la aproximación a segundo orden, ver el siguiente apéndice) para la ecuación con la cual obtuvimos nuestras secciones eficaces de producción de rayos-X experimentales [11], tales resultados están casi tan distantes de las predicciones de la teoría *ECPSSR* [5], como lo están los resultados obtenidos por Bogdanovic *et al.* [4] y [4'], ya que los tres tipos de gráficas observadas en tales figuras tienen mucha discrepancia entre sí. Lo anterior es una evidencia experimental de que aún falta mucho trabajo experimental y teórico por realizar en este marco de investigación (sobre las capas *L* y mediante la utilización de iones pesados).

Un estudio más refinado y extenso en la misma dirección del el presente trabajo, podría realizarse para observar con mayor detalle la dependencia de las secciones eficaces de producción de rayos-X con el número atómico del proyectil utilizado. Tal trabajo tendría que tomar en cuenta un mayor número de elementos utilizados como proyectiles e intervalos mayores para las energías de estos últimos. También podría considerarse una ecuación con la aproximación a segundo orden para las secciones eficaces de producción de rayos-X.

Para mejorar nuestras mediciones tendríamos que enfocarnos en el estudio experimental para obtener el espesor ideal de las películas con las que trabajáramos (lo cual implicaría una serie de trabajos similares al realizado en esta tesis). Se podría también probar la utilización de otras tablas de parámetros atómicos (transiciones Coster-Kronig y las fluorescencias).

Mediante trabajos posteriores sería interesante analizar más a fondo las teorías sobre la ionización de las capas internas del átomo, para observar la manera como los resultados experimentales permiten hacer mejoras sobre tales teorías. Consideramos que tales mejoras a las teorías de ionización son importantes (para las capas *L* y mediante iones pesados), con las cuales

se pueden poner a prueba las teorías de ionización y así poder mejorarlas. El mejoramiento de dichas teorías repercute en el perfeccionamiento de las distintas técnicas de análisis de origen nuclear, y estas últimas repercuten a su vez en el avance tecnológico y científico en distintas áreas del conocimiento.

Por último, puede afirmarse que no se puede decir cuáles de los tres tipos de datos presentados en este trabajo son los correctos (los que predice la teoría *ECPSSR*, los obtenidos por Bogdanovic y los que nosotros obtuvimos en este trabajo), pues hasta la fecha hay muy pocos artículos publicados al respecto.

4. APÉNDICE

La ecuación a segundo orden es la siguiente [29]:

$$\sigma_X = \frac{Y_X \Omega_R \sigma_R}{Y_R \varepsilon} \left(1 - \frac{\mu t}{e^{-\mu t}} \right)^{-1} \quad (4.3)$$

Para realizar la aproximación a segundo orden para nuestros valores experimentales de σ_X mediante tal ecuación, sustituímos t por nuestro valor experimental para el espesor de la muestra de YbF_3 utilizada en los experimentos, el cual es $\bar{t}_{total} = 0.63 \pm 0.16 \mu\text{m}$ (resultado 4.2). La densidad del elemento sobre la muestra es de $\rho = 8.2 \text{ g/cm}^3$. Por otra parte, para calcular los valores de μ/ρ , se utilizó el programa de cómputo *XCOM* [30], el cual da los resultados en unidades de cm^2/g . Así por ejemplo, para la línea $L\alpha$, con energía 7.367 keV, el valor correspondiente para μ/ρ es de $138.75 \text{ cm}^2/\text{g}$. Llamemos a f_c el factor de corrección a segundo orden estimado con respecto a nuestros datos y expresémoslo como:

$$f_c = \left(1 - \frac{\mu t}{e^{-\mu t}} \right) \quad (4.4)$$

Por lo tanto, la estimación del factor de corrección f_c a segundo orden es del 7% por encima del valor de nuestros datos experimentales (tomados a primer orden mediante la ecuación 3.1). Es decir, el efecto que hubiéramos obtenido en nuestros resultados experimentales al tomar en cuenta el factor de corrección a segundo orden, hubiera sido el de desplazar nuestras gráficas experimentales hacia arriba en una proporción típica del 7% (gráficas 4.4 - 4.7).

5. REFERENCIAS

- [1] De Lucio O. G., Tesis de Maestría, Posgrado en Ciencias Físicas, UNAM (México, 2000).
- [2] Fazinic S., Tadic T., Bogdanovic I., Jaksic M., Orlic I., and Valkovic V., Nucl. Instr. and Meth., **B 114** (1996) 232.
- [3] Orlic I., Sow C. H., Tang S. M.: At. Data Nucl. Data Tables., **56** (1994) 159.
- [4] Bogdanovic I., S. Fazinic and M. Jaksic. Physical Review. **A 56** (1997) 2860.
- [4'] Bogdanovic I., T. Tadic, M. Jaksic, Z. Halabuka, D. Trautmann. Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research. **B 150** (1999) 18-26.
- [5] Liu Z. and Cipolla S., Comput. Phys. Comm., **97** (1996) 315.
- [6] Mahli N. M. and Gray T. J., Phys. Rev., **A 44** (1991) 7199.
- [7] Bird J. R. and Williams, Ion Beams for Materials Analysis, Ed. Academic Press (Melbourne, Australia, 1989).
- [8] Van Grieken E. R., Handbook of X-Ray Spectrometry (Methods and Techniques), Ed. Marcel Dekker, Inc. (USA, 1992).
- [9] Cohen D. D. and Harrigan M., Atomic Data and Nuclear Data Tables, **34** (1986) 393-414.
- [10] Puri S., Metha D., Chand B., Singh Nirmal and Trehan P. N., X-Ray Spectrometry, **22** (1993) 358-361.
- [11] Rodríguez L., Tesis Doctoral en Ciencias Físicas, Facultad de Ciencias., UNAM (México, 1994).
- [12] Traumann D., Rösel F., Nucl. Instr. and Meth. **214** (1983) 21.
- [13] Smit Z., Orlic I., Phys. Rev. **A 50** (1994) 1301.
- [14] Brandt W. and Lapicki G., Phys. Rev., **A 23** (1981) 1717.
- [15] Miranda M. del C. J., Tesis Profesional, Universidad Nacional Autónoma de México (México, 1984).
- [16] Cohen D. D. and Harrigan M., Atomic Data Tables, **33** (1985) 255.
- [17] Cohen D. D. Atomic Data Nuclear Data Tables, **41** (1989) 287.
- [18] Sarkadi L. and Mukoyama T. J., Phys. Rev., **B 14** (1981) L225.

- [19] Miranda J., Rodríguez L., De Lucio O., López K. and Harada J. A., *Rev. Méx. Fis.*, **46** 4 (2000) 367-372.
- [20] O'Hanlon J. F., *A User's Guide to Vacuum technology*, Ed. Willey Intercience (USA, 1989).
- [21] Miranda J., Harada J. A., De Lucio O. y Rodríguez L., trabajo que se presentó en el "Congreso de SARX 2000" en San Pedro, Brasil (mes de noviembre).
- [22] Van Espen P., Janssens K., and Nobles J., *QXAS/AXIL, IAEA: Wagramstrasse 5, P. O. BOX 100, A-1400 Viena, Austria. Chemom. Intell. Lab. Syst.*, **1** (1985) 109.
- [23] Pajek M., Kobzev A. P., Sandrik R., Ilkhamov R. A. and Khosomurudov S. H., *Nucl. Instr. and Meth.*, **B42** (1989) 346.
- [24] Paul H., and Sacher J. S., *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **42** (1989) 105.
- [25] Amsel G. and Davies J. A. *Nucl. Instr. Methods*. **218** (1983) 177.
- [26] Biersack J. P. and Ziegler J. F., *SRIM /2000*.
- [27] Kreyszig E., *Introducción a la Estadística Matemática*, Ed. LIMUSA (México, 1985).
- [28] Baird D. C., *Experimentación*, Ed. Prentice-Hall Hispanoamericana, (México, 1991).
- [29] Miranda J., Ledesma R., De Lucio O. G. *Applied Radiation and Isotopes*. **54** (2001) 455-459.
- [30] Hubbel J. H., *program XCOM. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, 1990.*

ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA