

34



# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

MEDICION DE SECCIONES EFICACES DE PRODUCCION DE RAYOS X M INDUCIDOS POR PROTONES DE 0.3 A 0.7 MEV EN W, Au, Pb, Bi, Th Y U.

## 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 :  
ELIZABETH SEGUNDO GARCIA



DIRECTOR DE TESIS: DR. LUIS RODRIGUEZ FERNANDEZ



**TESIS CON FALLA DE ORIGEN**

FACULTAD DE CIENCIAS  
SECCION ESCOLAR



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.

PAGINACIÓN

DISCONTINUA



**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: "Medición de secciones eficaces de producción de rayos X M inducidos por protones de 0.3 a 0.7 MeV en W, Au, Pb, Bi, Th y U"

realizado por Segundo García Elizabeth

con número de cuenta 8809895-5, quien cubrió los créditos de la carrera de Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis

Propietario

DR. LUIS RODRIGUEZ FERNANDEZ

Propietario

DRA. ALICIA MARIA OLIVER GUTIERREZ

Propietario

DRA. MARIA DEL PILAR CONSTANZA ORTEGA BERNAL Ma. en Fís. C. de I., 14

Suplente

M. EN C. AUGUSTO CABRERA MANUEL

Suplente

FIS. RENE ORTEGA ALVARADO

Consejo Departamental de Física

DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE  
Coordinadora de Licenciatura

**A mi esposo por su comprensión y apoyo en la  
conclusión de mi carrera:  
Juan Antonio Harada Olivares**

**A mi hijo con todo mi amor:  
Kenji Antonio Harada Segundo**

**A mamá con cariño:  
Crescencia Gacía Flores**

**A mi cuñado y a mi suegra por el apoyo y aprecio  
incondicional que me han brindado:  
Aurea Olivares Morales  
Eduardo Harada Olivares**

**A mis cuñados:  
María del Carmen Harada Olivares  
Jesús Salvador Harada Olivares**

## AGRADECIMIENTOS

A mi asesor el Dr. Luis Rodríguez Fernández por su gran ayuda y por la dirección de este trabajo de tesis.

A mis sinodales:

Dra. Alicia Oliver Gutiérrez,

Dra. María del Pilar Ortega Bernal

M. en C. Augusto Cabrera Manuel

Fis. René Ortega Alvarado

Al Sr. Ernesto Santillana por su ayuda en el manejo del Acelerador Van de Graaff de 0.7 MV del Instituto de Física de la UNAM.

# ÍNDICE

CAPÍTULO 1,	Introducción.	1-1
	Referencias.	1-5
CAPÍTULO 2,	Teoría.	2-1
	2.1 Estructura atómica.	2-1
	2.2 Producción de rayos X.	2-3
	2.3 Aproximación PWBA.	2-9
	2.4 Aproximación ECPSSR.	2-13
	Referencias.	2-16
CAPÍTULO 3,	Desarrollo experimental.	3-1
	3.1 Dispositivo experimental.	3-1
	3.2 Calibración del sistema de detección de rayos X.	3-5
	3.3 Medición de secciones de producción de rayos X M.	3-10
	3.4 Referencias.	3-12
CAPÍTULO 4,	Resultados y conclusiones.	4-1
	4.1 Resultados de la calibración del detector de Si(Li)	4-1
	4.2 Resultados de las secciones de producción de rayos X M	4-2
	4.3 Discusión de resultados y conclusiones.	4-24
	Referencias.	4-26

# CAPÍTULO I

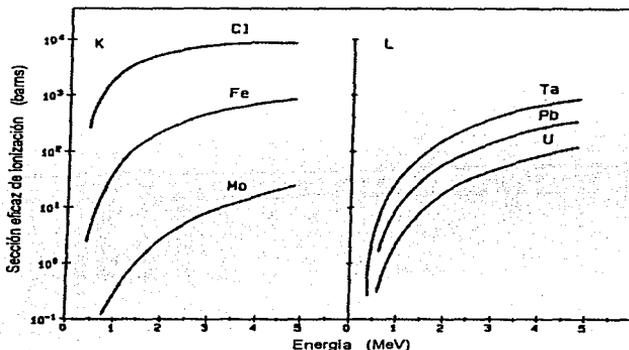
## INTRODUCCIÓN

Para la caracterización de materiales existen diversas técnicas y procedimientos con los cuales es posible analizarlos. Dentro de estas técnicas se encuentran las que emplean haces de iones producidos en aceleradores de partículas, como por ejemplo: la espectroscopia de retrodispersión de iones, RBS (Rutherford Backscattering Spectrometry) [1], el análisis por reacciones nucleares, NRA (Nuclear Reaction Analysis) [2] y la emisión de rayos X inducidos por partículas, PIXE (Particle Induced X-ray Emission) [3]. Una de las ventajas de estas técnicas es que en muchos casos son catalogadas como "no destructivas", es decir, que el daño que producen en la muestra no altera sus propiedades. Con estas técnicas es posible desarrollar el análisis de diversos tipos de muestras: de materiales con propiedades electrónicas, metalúrgicas, geológicas, ambientales, biológicas y arqueológicas. Cada una de estas técnicas, como cualquier otra, tiene sus ventajas y sus inconvenientes. De hecho ninguna técnica es en sí absolutamente superior a las otras, sino que todas ellas se complementan dependiendo del tipo de muestra a estudiar y de las propiedades que se quieran determinar. Así cada una de las técnicas proporcionará la información de diferentes aspectos y alguna técnica resultará superior a otras con respecto a alguno de estos aspectos.

La técnica PIXE se fundamenta en la espectroscopia de rayos X la cual consiste en excitar a los átomos de una muestra para que emitan rayos X. En el caso de PIXE la excitación se logra haciendo incidir iones sobre una muestra, los cuales al interactuar con los átomos van a producir la generación de rayos X. Estos iones se producen y se les proporciona la energía suficiente para que puedan excitar por medio de un acelerador de partículas. Por lo regular se utilizan iones ligeros como los protones,  $^1\text{H}^+$ , o iones de helio, He, con energías del orden de unos cuantos megaelectronvolts, MeV. La emisión de los rayos X se produce porque los iones incidentes en la muestra interactúan con los electrones de los átomos produciendo vacantes en las capas internas del átomo. Luego estas vacantes se vuelven a ocupar con algún electrón de una capa superior produciendo la emisión de un fotón o un electrón Auger. La energía de los rayos X emitidos es característica de cada elemento atómico presente en la muestra. Dependiendo de la capa atómica: K, L, M, N, O... en la que se produzca la vacante será el nombre que se le dará inicialmente a la correspondiente línea de emisión de rayos X. De esta manera a los rayos X provenientes de vacantes en la capa K se les conoce como línea K, los de la capa L como líneas L, etc. Luego estas líneas a su vez se subdividen en otras a partir de la capa atómica de donde viene el electrón a ocupar la vacante y se suelen denotar algunas de ellas con las letras minúsculas griegas  $\alpha$ ,  $\beta$ , y de acuerdo con su intensidad respectiva, conocida como notación espectroscópica. Así los rayos X de la línea K se dividen en  $K\alpha$  y  $K\beta$ , donde los indicados con  $\alpha$  son los más intensos seguidos de los  $\beta$ . Por lo general los rayos X inducidos en la muestra son detectados por medio de un detector de estado sólido para rayos X. Luego la señal del detector es procesada por medio de un amplificador y enviada a un analizador multicanal, MCA (Multichannel Analyzer). En el MCA lo que se hace es graficar la en el eje X la energía de los fotones entre E y  $E+\Delta E$  y en el Y al número de estos

que son registrados. A los  $\Delta E$  se les conoce como canales y se encuentran numerados para distinguirlos uno de otro. A la gráfica obtenida en el MCA se le conoce como espectro PIXE de rayos X. Este espectro consiste en una serie de picos superpuestos con un fondo continuo de radiación. De esta forma, la energía de los picos de rayos X nos indica los elementos presentes en la muestra y su intensidad se relaciona directamente con la cantidad de estos en la muestra. Así pues, la técnica PIXE se utiliza para identificar y cuantificar la concentración de elementos presentes en una muestra. Esta técnica tiene entre otras virtudes la capacidad de poder detectar concentraciones de elementos de hasta partes por millón.

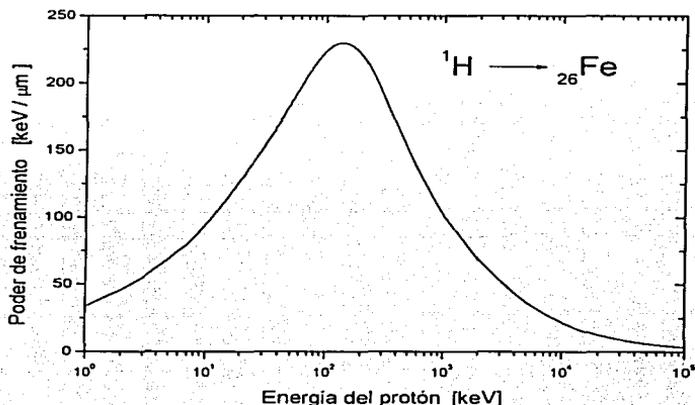
Una de las magnitudes fundamentales para la espectroscopia PIXE es la sección eficaz de producción de rayos X, la cual se entiende como la probabilidad de que un átomo emita un fotón de rayos X después de sufrir una colisión con un ion. Esta magnitud es fundamental debido a que es a partir de la cual se puede cuantificar la cantidad de átomos de un cierto elemento existentes en una muestra por medio de un análisis por PIXE. Esta sección eficaz de producción de rayos X está directamente asociada con la de ionización y depende del tipo de ion incidente, de su energía y del átomo blanco. En la figura 1.1 se muestran las secciones eficaces de ionización por impacto de protones para la capa atómica K en átomos de Cl, Fe y Mo, así como también para las capas L en los elementos Ta, Pb y U. Puede observarse a partir de esta figura que la sección de ionización disminuye a bajas energías de los protones y que resulta ser mayor para elementos más ligeros que pesados.



*Figura 1.1 Gráficas de las secciones eficaces de ionización generadas por impacto de protones correspondientes a la capa K para los elementos Cl, Fe y Mo, así como también para la capa L en los elementos Ta, Pb y U.*

La sección eficaz de producción de rayos X por impacto de protones decrece bruscamente para energías menores de 1 MeV (ver figura 1.1). A su vez, para estas energías el frenamiento, que nos indica la pérdida de energía del protón en el interior de la

muestra, alcanza sus valores más grandes. En la figura 1.2 se muestra el poder de frenamiento para protones en hierro. Es decir, para estas energías los protones se van frenando más rápidamente dentro de la muestra en la que inciden. Estas propiedades de la sección de producción de rayos X y de los frenamientos para energías menores de 1 MeV tienen la ventaja de proporcionar una gran sensibilidad para cambios en la intensidad de los rayos X producidos hasta una profundidad determinada en función de la energía del protón incidente. Esto anterior puede verse de la siguiente manera: Cuando un protón de energía  $E_1 < 1$  MeV choca con un blanco este rápidamente comienza a perder energía con la profundidad. Luego como la sección de rayos X decrece mucho junto con la energía del proyectil, vamos a tener que prácticamente solamente los rayos X producidos hasta una determinada profundidad  $d_1$  van a contribuir de manera significativa en el espectro de rayos X. Ahora, si se bombardea el mismo blanco con protones de energía  $E_2$  tal que  $E_1 < E_2 < 1$  MeV los rayos X producidos hasta un espesor  $d_2 > d_1$  son los que prácticamente van a contribuir en el espectro. De esta manera al ir variando la energía de los iones sobre un blanco podemos obtener información de la concentración de elementos a diferentes profundidades de la muestra. Además, la sensibilidad con la profundidad se puede aumentar considerando diversas geometrías para la incidencia de los protones y aprovechar también la atenuación de los rayos X dentro de la misma muestra.



*Figura 1.2 Gráfica del poder de frenamiento para protones en  $^{26}\text{Fe}$  como función de su energía. Se observa que a energías menores de 1 MeV el poder de frenamiento alcanza sus valores máximos.*

Las propiedades indicadas en el párrafo anterior resultan ser la base de varias de las aplicaciones de PIXE a bajas energías, como serían: la medición de espesores de películas delgadas y la determinación de perfiles de concentración de elementos en función de la profundidad con respecto a la superficie de la muestra [4, 5]. De esta manera, para que los análisis realizados utilizando PIXE a bajas energías sean adecuados es necesario contar con secciones de producción de rayos X exactas y precisas. Esto se ha logrado en el caso de las líneas K para las cuales existen valores de referencia de las secciones de rayos X [6], con una incerteza de 3% a 5%. Se les dice que son valores de referencia porque se pueden considerar como datos exactos, es decir, son prácticamente las secciones reales. En el caso de las L existen ajustes semiempíricos bastante aceptables para estas secciones [7]. En el caso de las líneas M también se ha presentado un ajuste semiempírico a valores experimentales de las correspondientes secciones de rayos X [8], pero tiene el inconveniente de que como no hay muchas medidas de estas secciones el ajuste no resulta ser muy preciso, especialmente a bajas energías donde el cambio en la sección es grande.

Por el motivo expuesto y con la finalidad de aumentar el número de valores medidos experimentalmente para las secciones de producción de rayos X M en esta tesis se presentan los resultados de las mediciones efectuadas en los elementos  $^{79}\text{W}$ ,  $^{79}\text{Au}$ ,  $^{82}\text{Pb}$ ,  $^{83}\text{Bi}$ ,  $^{90}\text{Th}$  y  $^{92}\text{U}$  por medio de incidencia de protones con energías entre 0.3 MeV y 0.7 MeV.

Los resultados experimentales obtenidos se comparan con los resultados de los modelos teóricos de aproximación de onda plana de Born, PWBA (Plane Wave Born Aproximation) y ECPSSR. Este último ha sido el modelo más exitoso y utilizado para las aplicaciones de las técnicas con haces de iones.

En el siguiente capítulo de la tesis se describe la estructura atómica y la de los rayos X. También se muestran los conceptos fundamentales de las teorías PWBA y ECPSSR. En el capítulo 3 se describe el procedimiento experimental empleado para la medición de estas secciones de rayos X M y en el capítulo 4 se muestran los resultados y conclusiones obtenidos.

## Referencias.

- [1] W.K. Chu, J.M. Mayer and M.A. Nicolet, Backscattering Spectrometry, Academic Press, New York, 1978.
- [2] J.R. Tesmer and M. Nastasi, Handbook of Modern Ion Beam Materials Analysis, Material Research Society, Pittsburgh, 1995.
- [3] S.A.E. Johansson and J.L. Campbell, PIXE a novel technique for elemental analysis, John Wiley & Sons, Chichester 1988.
- [4] J. Miranda, Tesis doctoral, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, México, 1988.
- [5] J. Miranda, Nuclear Instruments and Methods In Physics Research B **118** (1996) 346.
- [6] H. Paul and J. Sacher, Atomic Data and Nuclear Data Tables **42** (1989) 105.
- [7] I. Orlic, C.H. Sow and S.M. Tang, Atomic Data and Nuclear Data Tables **56** (1994) 59.
- [8] M. Pajek, M. Jaskola, T. Czyzewski, L. Glowacka, D. Banas, J. Braziewicz, W. Krestschmer, G. Lapicki and D. Trautmann, Nuclear Instruments and Methods In Physics Research B **150** (1999) 33.

## CAPÍTULO 2

### TEORÍA

#### 2.1 Estructura atómica.

En la descripción de un átomo en la aproximación de partícula independiente se considera que cada electrón se mueve en el potencial coulombiano del núcleo y en el campo electrostático promedio generado por los demás electrones, el cual se supone también es esféricamente simétrico. En esta aproximación es entonces posible asignar a cada electrón un orbital o nivel, caracterizado por un número cuántico principal  $n$  y números cuánticos  $j$ ,  $l$ ,  $s$ ,  $m_l$  y  $m_j$  en analogía con los estados de átomos hidrogenoides.

Los niveles con números cuánticos principales  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$  suelen expresarse respectivamente con las letras K, L, M, N, ... Los valores posibles para el número  $l$  son  $l = 0, 1, \dots, n-1$ . A cada valor numérico de  $l$  se le suele representar respectivamente por las letras s, p, d, f, g, h, ... Para  $m_l$  tenemos que sus valores posibles son  $m_l = -l, -(l-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, (l-1), l$ . Esto anterior se escribe en forma equivalente como  $m_l \leq |l|$ . Luego el número  $s$  nos indica el espín del electrón que puede ser  $s = \pm 1/2$ . El número  $j$  nos indica los valores del momento angular total del electrón en un orbital dado, siendo  $j = |l - s|, \dots, |l + s|$ . Finalmente podemos definir  $m_j$  como las proyecciones del momento angular total donde se tiene que  $m_j \leq |j|$ .

De acuerdo con el principio de exclusión de Pauli, a cada electrón en un orbital dado solamente le corresponde un conjunto único de números cuánticos. Esto es, dos o más electrones nunca va a poder tener los mismos números cuánticos. Con esto, el número máximo de electrones que podemos tener en cada capa atómica lo podemos determinar del conjunto de números cuánticos posibles de cada orbital.

Los niveles atómicos se suelen clasificar de acuerdo con sus números  $n$ ,  $l$  y  $j$  utilizando la notación  $n_l j$ , donde  $n$  se indica con su propio número, la  $l$  con su correspondiente letra asignada en mayúscula y  $j$  con su valor.

Para la capa K tenemos que  $n = 1$ ,  $l = 0$ , y  $s = \pm 1/2$ , con lo cual  $j = 1/2$ , y  $m_j = \pm 1/2$ . La correspondiente notación para describir a este nivel atómico es  $1S_{1/2}$ . El número de electrones en este nivel lo podemos obtener del total de número cuánticos  $n$ ,  $j$  y  $m_j$  posibles. Así pues tenemos que:

$$\begin{array}{l} (n, j, m_j) \\ \text{Nivel } 1S_{1/2} \quad \left. \begin{array}{l} (1, 1/2, -1/2) \\ (1, 1/2, 1/2) \end{array} \right\} 2 \text{ electrones} \end{array}$$

En el caso de la capa L tenemos que  $n = 2$ ,  $l = 0, 1$  y  $s = \pm 1/2$ , con lo cual para  $l = 0$  se tiene que  $j = 1/2$  y  $m_{1/2} \leq |1/2|$ , en tanto que para  $l = 1$  se tiene que  $j = 1/2$  y  $3/2$  con lo que

$m_{1/2} \leq |1/2|$  y  $m_{3/2} \leq |3/2|$ . De esta manera se tienen tres niveles:  $2S_{1/2}$ ,  $2P_{1/2}$  y  $2P_{3/2}$ , a los cuales también se les denota como niveles atómicos  $L_1$ ,  $L_2$  y  $L_3$  respectivamente. En total hay 8 electrones para la capa L que se reparten de la siguiente forma:

$$\begin{array}{l}
 \text{nivel } L_1 \text{ o } 2S_{1/2} \quad \left. \begin{array}{l} (n, j, m_j) \\ (2, 1/2, -1/2) \\ (2, 1/2, 1/2) \end{array} \right\} 2 \text{ electrones} \\
 \\
 \text{nivel } L_2 \text{ o } 2P_{1/2} \quad \left. \begin{array}{l} (n, j, m_j) \\ (2, 1/2, -1/2) \\ (2, 1/2, 1/2) \end{array} \right\} 2 \text{ electrones} \\
 \\
 \text{nivel } L_3 \text{ o } 2P_{3/2} \quad \left. \begin{array}{l} (n, j, m_j) \\ (2, 3/2, -3/2) \\ (2, 3/2, -1/2) \\ (2, 3/2, 1/2) \\ (2, 3/2, 3/2) \end{array} \right\} 4 \text{ electrones}
 \end{array}$$

Procediendo de la misma forma anterior tenemos que para la capa M se tienen los niveles atómicos:  $3S_{1/2}$ ,  $3P_{1/2}$ ,  $3P_{3/2}$ ,  $3D_{3/2}$  y  $3D_{5/2}$ , los cuales también suelen denotarse como  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$ ,  $M_4$  y  $M_5$  respectivamente. El total de electrones para la capa M es 18 repartidos de la siguiente manera:

$$\begin{array}{l}
 \text{Nivel } M_1 \text{ o } 3S_{1/2} \quad \left. \begin{array}{l} (n, j, m_j) \\ (1, 1/2, -1/2) \\ (1, 1/2, 1/2) \end{array} \right\} 2 \text{ electrones} \\
 \\
 \text{nivel } M_2 \text{ o } 3P_{1/2} \quad \left. \begin{array}{l} (n, j, m_j) \\ (1, 1/2, -1/2) \\ (1, 1/2, 1/2) \end{array} \right\} 2 \text{ electrones} \\
 \\
 \text{nivel } M_3 \text{ o } 3P_{3/2} \quad \left. \begin{array}{l} (n, j, m_j) \\ (2, 3/2, -3/2) \\ (2, 3/2, -1/2) \\ (2, 3/2, 1/2) \\ (2, 3/2, 3/2) \end{array} \right\} 4 \text{ electrones}
 \end{array}$$

nivel M <sub>4</sub> o 3D <sub>3/2</sub>	( n, j, m <sub>j</sub> )	} 4 electrones
	( 2, 3/2, -3/2 )	
	( 2, 3/2, -1/2 )	
	( 2, 3/2, 1/2 )	
	( 2, 3/2, 3/2 )	
nivel M <sub>5</sub> o 3D <sub>5/2</sub>	( n, j, m <sub>j</sub> )	} 6 electrones
	( 2, 3/2, -5/2 )	
	( 2, 3/2, -3/2 )	
	( 2, 3/2, -1/2 )	
	( 2, 3/2, 1/2 )	
	( 2, 3/2, 3/2 )	
	( 2, 3/2, 5/2 )	

Este procedimiento anterior se sigue aplicando para los niveles atómicos subsecuentes N, O, P,...

## 2.2 Producción de rayos X

Consideremos un átomo neutro y en el estado base o de mínima energía. En la colisión de un ion con este átomo uno de los procesos posibles es el de la creación de una vacante en una de las capas internas del átomo por la expulsión de uno de sus electrones. Esta vacante, en el átomo ionizado, ocasiona que éste se encuentre en un estado de equilibrio inestable. La forma en que el átomo ionizado alcanza un estado de mínima energía es por medio de la transición de un electrón de alguna capa superior a la capa en la que se encuentra la vacante. La probabilidad de que ocurra alguna de las diferentes transiciones posibles entre capas se encuentra determinada por la mecánica cuántica. Además, estas transiciones están acompañadas de la emisión de un fotón de rayos X o por la emisión de un electrón Auger, siendo la energía de éstos característica del elemento químico y de los niveles entre los cuales ocurra esta transición. De esta manera los rayos X o electrones Auger producidos se denotarán en términos de las capas K, L, M, ... dependiendo del nivel donde se haya originado la vacante.

Para detallar lo anterior, en la figura 2.1 se muestran los procesos anteriores para el caso de la capa K: En (a) un ion con carga Ze inicialmente produce una vacante en la capa K por la expulsión de uno de sus electrones. En (b) el átomo regresa a un equilibrio estable debido a la transición de un electrón de la capa L<sub>3</sub> a la capa K acompañado de la emisión de un fotón de rayos X, o bien en (c) puede ocurrir una transición de L<sub>1</sub> a K pero ahora en su lugar se emite un electrón de la capa L<sub>1</sub> denotado como electrón Auger KL<sub>1</sub>L<sub>1</sub>.

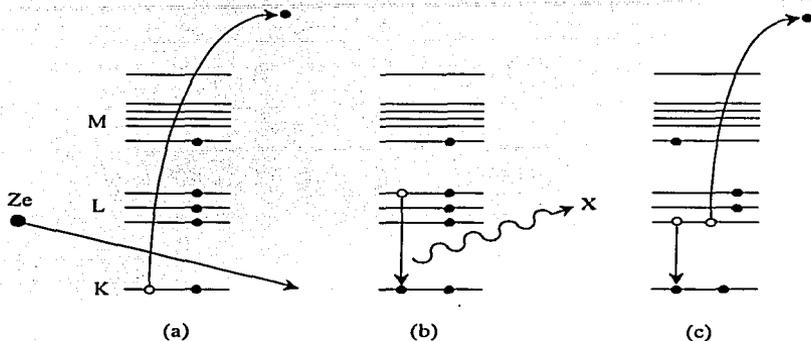


Figura 2.1 En (a) se muestra la producción de una vacante en la capa K debido a la expulsión del electrón por una colisión con el ion Ze. En (b) el átomo vuelve a un estado de equilibrio estable por medio de la transición de un electrón de la capa  $L_3$  a la capa K acompañado de la emisión de un fotón de rayos X, o bien en (c) por la transición de un electrón de la capa  $L_1$  a la capa K acompañado de la emisión de un electrón Auger de la capa  $L_1$ .

En el caso de las capas L y superiores la situación se vuelve más compleja para la descripción de la generación de rayos X o emisión de electrones Auger pues ocurren otros procesos asociados. Así, un caso puede ser la generación directa de un fotón de rayos X al presentarse una vacante en una capa L, tal como se indica en la figura 2.2a por medio de una transición de  $M_5$  a  $L_3$ . Pero también el proceso anterior puede tener lugar de una manera indirecta: Inicialmente se produce una vacante en la capa  $L_1$ , la cual puede ser ocupada por un electrón de la capa  $L_3$  por medio de una transición no radiativa que da como resultado una vacante efectiva en la capa  $L_3$ , como se muestra en la figura 2.2b, la cual luego conduce a la emisión de un fotón de rayos X debido a la transición de  $M_5$  a  $L_3$  (ver figura 2.2c). A este tipo de transiciones no radiativas entre niveles de una misma capa, como la anteriormente señalada, se les conoce con el nombre de transiciones Coster-Kronig. Las transiciones electrónicas más probables que ocurren en un átomo se muestran en la figura 2.3.

La sección de ionización de una capa atómica  $j$  se relaciona con la de producción de rayos X por medio de la fluorescencia,  $\omega_j$ , que es la probabilidad de emitir un fotón de rayos X cuando ocurre una transición atómica a una capa  $j$ . Además, si  $a_j$  es la probabilidad de emitir un electrón Auger debido a una vacante en la capa  $j$ , entonces se tiene que:

$$\omega_j + a_j = 1 \quad (2.1)$$

Se toma esta última condición porque la producción de rayos X y la emisión de electrones Auger corresponden a dos procesos que compiten simultáneamente para desexcitar a un átomo al presentarse una transición electrónica para ocupar alguna vacante producida en una capa interna. La emisión de un fotón corresponde a un proceso electromagnético en tanto que la producción del electrón Auger se debe al efecto de autoionización [1]. La autoionización tiene mayor posibilidad de presentarse cuando los estados atómicos del electrón que interviene en la transición se encuentran muy cercanos a la energía mínima de ionización del átomo. Por este motivo la generación de electrones Auger es más intensa, es decir  $a_i \gg w_j$ , en elementos con número atómico pequeño.

Para el caso de la capa K, que es la situación más sencilla, la relación entre la sección de ionización de la capa K,  $\sigma_K$ , y la de producción de rayos X,  $\sigma_K^X$ , esta dada por:

$$\sigma_K^X = \omega_K \sigma_K \quad (2.2)$$

donde  $\omega_K$  es la fluorescencia para la capa K.

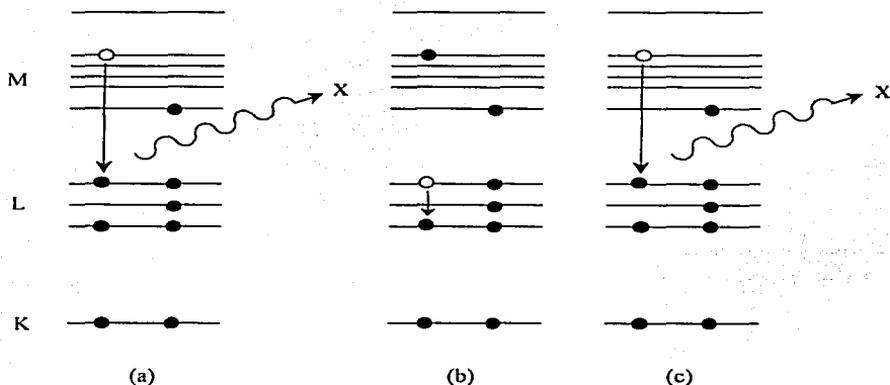


Figura 2.2 Se muestran dos ejemplos de los eventos posibles cuando la producción de rayos X involucra niveles atómicos L o superiores. En (a) se produce la emisión directa de un fotón de rayos X debido a una vacante inicial en la capa L<sub>3</sub>. En (b) se presenta la generación de una vacante en la capa L<sub>3</sub> debida inicialmente a una ionización en la capa L<sub>1</sub> la cual por medio de una transición Coster-Kronig es ocupada por un electrón de la capa L<sub>3</sub>. Posteriormente en (c) se produce la emisión de un fotón de rayos X.

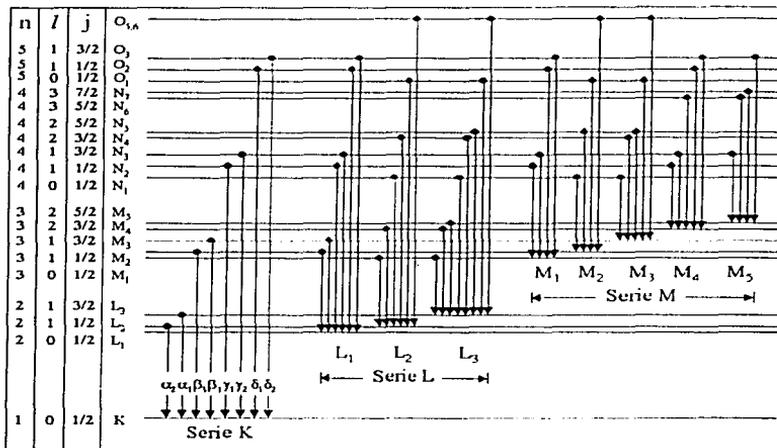


Figura 2.3 Transiciones electrónicas más probables que ocurren en un átomo.

En el caso de las capas L la situación se complica debido a la presencia de las transiciones no radiativas Coster-Kronig, pues se pueden definir dos secciones de ionización: Una sección directa  $\sigma_{L_j}$  correspondiente a la probabilidad de producir una primer vacante por la colisión con el ion incidente y otra sección efectiva  $\sigma_{L_j}^{eff}$  que indica la probabilidad de tener una vacante después de considerar todas las transiciones no radiativas asociadas. Para las capas L las relaciones entre las secciones de ionización directas y las efectivas es:

$$\begin{aligned} \sigma_{L_3}^{eff} &= \sigma_{L_3} + f_{13} \sigma_{L_2} + (f_{13} + f_{12} f_{23}) \sigma_{L_1} \\ \sigma_{L_2}^{eff} &= \sigma_{L_2} + f_{12} \sigma_{L_1} \\ \sigma_{L_1}^{eff} &= \sigma_{L_1} \end{aligned} \quad (2.3)$$

donde las  $f_{ij}$  corresponden a las probabilidades de que ocurra una transición no radiativa Coster-Kronig entre la capa  $L_i$  y la  $L_j$ . Luego las secciones de producción de rayos X para las capas L serían:

$$\sigma_{L_1}^X = \omega_{L_1} \sigma_{L_1}^{eff}$$

$$\sigma_{L_2}^X = \omega_{L_2} \sigma_{L_2}^{eff}$$

$$\sigma_{L_1}^X = \omega_{L_1} \sigma_{L_1}^{eff} \quad (2.4)$$

La sección total de producción de rayos X para la capa L es:

$$\sigma_L^X = \omega_{L_1} \sigma_{L_1}^{eff} + \omega_{L_2} \sigma_{L_2}^{eff} + \omega_{L_3} \sigma_{L_3}^{eff} = \sigma_{L_1}^X + \sigma_{L_2}^X + \sigma_{L_3}^X \quad (2.5)$$

Para el caso de la ionización de las capas M se presenta una situación semejante a la de las capas L debido a que tenemos la probabilidad de ionizar una capa  $M_i$  directamente con la colisión del ion pero debido a las transiciones no radiativas de los electrones entre las mismas capas M conducen a tener una sección eficaz efectiva de ionización. Las relaciones entre estas dos secciones para las capas M son más complicadas que en el caso de la capa L y estas están dadas por:

$$\begin{aligned} \sigma_{M5}^{eff} = & \sigma_{M5} + S_{45} \sigma_{M4} + (S_{35} + S_{34} S_{45}) \sigma_{M3} + (S_{25} + S_{23} S_{35} + S_{24} S_{45} + S_{23} S_{34} S_{45}) \sigma_{M2} \\ & + (S_{15} + S_{14} S_{45} + S_{13} S_{35} + S_{13} S_{34} S_{45} + S_{12} S_{25} + S_{12} S_{24} S_{45} + S_{12} S_{23} S_{35} + S_{12} S_{23} S_{34} S_{45}) \sigma_{M1} \end{aligned}$$

$$\sigma_{M4}^{eff} = \sigma_{M4} + S_{34} \sigma_3 + (S_{24} + S_{23} S_{34}) \sigma_{M2} + (S_{14} + S_{12} S_{24} + S_{13} S_{34} + S_{12} S_{23} S_{34}) \sigma_{M1}$$

$$\sigma_{M3}^{eff} = \sigma_{M3} + S_{23} \sigma_2 + (S_{13} + S_{12} S_{23}) \sigma_{M1}$$

$$\sigma_{M2}^{eff} = \sigma_{M2} + S_{12} \sigma_1$$

$$\sigma_{M1}^{eff} = \sigma_{M1} \quad (2.6)$$

donde los términos  $S_{ij}$  corresponden a las probabilidades de que ocurra una transición no radiativa de una capa  $M_i$  a una capa  $M_j$ . Luego la sección total de producción de rayos X para la capa M queda como:

$$\begin{aligned} \sigma_M^X = & \sigma_{M1}^X + \sigma_{M2}^X + \sigma_{M3}^X + \sigma_{M4}^X + \sigma_{M5}^X \\ = & \sigma_{M1}^{eff} \omega_1 + \sigma_{M2}^{eff} \omega_2 + \sigma_{M3}^{eff} \omega_3 + \sigma_{M4}^{eff} \omega_4 + \sigma_{M5}^{eff} \omega_5 \end{aligned} \quad (2.7)$$

Hasta el momento se ha mostrado la relación que existe entre las secciones de ionización y las de producción de rayos X para diferentes capas atómicas. Experimentalmente lo que se observa son las diversas líneas de emisión de rayos X. Estas líneas se originan debido a transiciones entre dos niveles atómicos únicamente, aunque en algunos casos la designación de las líneas de emisión pueden involucrar a más de dos niveles atómicos dependiendo de la resolución del sistema de detección que se esté utilizando, pues en estos casos puede ocurrir que no sea posible distinguir entre dos o más

líneas diferentes. En el caso de las líneas de emisión que involucran una transición a las capas atómicas M se les denota con misma letra M seguida de una de las letras griegas  $\alpha, \beta, \gamma$ , etc, en donde la línea más intensa se asocia con la letra  $\alpha$ , la siguiente con  $\beta$ , etc. El origen de esta notación es histórico, debido a los primeros estudios efectuados en espectroscopia atómica. En tanto que para otras de las líneas M que no fueron nombradas de esta manera se les designa con la notación de la capa a la cual es transferido el electrón seguida de la capa de donde proviene. Por ejemplo, para la transición electrónica de la capa  $N_1$  a la capa  $M_3$ , o también  $N_1 \rightarrow M_3$ , tenemos que se denota como  $M_3N_1$ .

A continuación se indican las relaciones para determinar a las secciones de producción de rayos X de las líneas de emisión más intensas correspondientes a la capas M. Inicialmente tenemos a la línea  $M_{\alpha+\beta}$ , o  $M_{\alpha\beta}$ , que es la más intensa y que denotamos de esta manera debido a que está compuesta por las líneas de emisión  $M_\alpha$  y  $M_\beta$  porque con los detectores actuales de estado sólido que se utilizan no es posible distinguirlas claramente la una de la otra. La línea de emisión  $M_{\alpha+\beta}$  involucra a las transiciones  $N_6 \rightarrow M_5$  y  $N_7 \rightarrow M_5$  para la  $M_\alpha$  y a la transición  $N_6 \rightarrow M_4$  para la línea  $M_\beta$ , por lo que la sección de producción de rayos X  $M_{\alpha+\beta}$  estará dada como:

$$\sigma_{M\alpha\beta}^X = \left( \frac{\Gamma_{5N_6}}{\Gamma_5} + \frac{\Gamma_{5N_7}}{\Gamma_5} \right) \omega_5 \sigma_5^{eff} + \frac{\Gamma_{4N_6}}{\Gamma_4} \omega_4 \sigma_4^{eff} \quad (2.8)$$

donde las  $\Gamma_{ij} / \Gamma_i$  son las razones de emisión que indican la probabilidad de que al tener una vacante en la capa atómica  $i$  ocurra una transición electrónica desde la capa  $j$ . La ecuación anterior se explica de la siguiente manera: La cantidad  $\Gamma_{5N_6} / \Gamma_5$  representa la probabilidad de que al tener una transición a la capa  $M_5$  esta provenga de la capa  $N_6$ , con lo cual el término  $(\Gamma_{5N_6} / \Gamma_5) \omega_5 \sigma_5^{eff}$  lo que indica es la probabilidad generar una vacante en la capa  $M_5$  y que esta de lugar a la emisión de un fotón de rayos X debido a la transición  $N_6 \rightarrow M_5$ . Lo mismo ocurre con los otros dos términos del lado derecho de la ecuación (2.8), con lo cual la sección final de producción de rayos X  $M_{\alpha\beta}$  es igual a la suma de las contribuciones debidas a las tres transiciones involucradas.

De manera análoga a lo anterior, para la línea  $M_\gamma$ , la cual es debida a las transiciones  $N_4 \rightarrow M_3$  y  $N_5 \rightarrow M_3$ , tenemos que su sección eficaz de producción de rayos X es:

$$\sigma_{M\gamma}^X = \left( \frac{\Gamma_{3N_4}}{\Gamma_3} + \frac{\Gamma_{3N_5}}{\Gamma_3} \right) \omega_3 \sigma_3^{eff} \quad (2.9)$$

Para la línea  $M_\zeta$  las transiciones involucradas son  $N_2 \rightarrow M_4$  y  $N_3 \rightarrow M_5$ , por lo que:

$$\sigma_{M\zeta}^X = \frac{\Gamma_{4N_2}}{\Gamma_4} \omega_4 \sigma_4^{eff} + \frac{\Gamma_{5N_3}}{\Gamma_5} \omega_5 \sigma_5^{eff} \quad (2.10)$$

Para las transiciones  $O_4 \rightarrow M_3$  y  $O_5 \rightarrow M_3$  tenemos que:

$$\sigma_{M_1, O_1}^x = \left( \frac{\Gamma_3 O_1}{\Gamma_3} + \frac{\Gamma_3 O_2}{\Gamma_3} \right) \omega_3 \sigma_3^{eff} \quad (2.11)$$

Finalmente para la transición  $N_1 \rightarrow M_3$  tenemos que:

$$\sigma_{M_1, N_1}^x = \frac{\Gamma_3 N_1}{\Gamma_3} \omega_3 \sigma_3^{eff} \quad (2.12)$$

### 2.3 Aproximación PWBA

Una de las aproximaciones teóricas más utilizadas para describir a los procesos que ocurren durante colisiones atómicas es la aproximación de onda plana de Born, PWBA (Plane Wave Born Approximation) [2]. Con esta aproximación se efectúa el estudio de la dispersión entre una partícula cargada y un blanco atómico. El modelo para describir la ionización de capas atómicas internas por colisiones ion-átomo, utilizando la aproximación PWBA, fue desarrollado por Merzbacher and Lewis [3, 4].

Este tratamiento utilizando la PWBA se justifica cuando  $Z_1 \ll Z_2$  y  $v_1 \gg v_2$ , donde  $Z_1$  y  $Z_2$  son los número atómicos del proyectil y del blanco, en tanto que  $v_1$  y  $v_2$ , corresponden a la velocidad del proyectil y a la velocidad de los electrones en el nivel  $s$  del átomo blanco. Esto es, que la colisión sea lo más asimétrica posible en cuanto al tamaño de los átomos involucrados y que sea muy rápida, es decir que la colisión dure el menor tiempo posible. Esto último se pide porque de esta manera se puede considerar que los estados cuánticos iniciales del átomo prácticamente no se ven afectados por la presencia del proyectil. Así, en esta aproximación el proyectil incidente es tratado como una perturbación externa independiente del átomo y que actúa sobre los electrones del blanco. Una magnitud muy utilizada para comparar a la velocidad del ion con respecto a la del electrón es la relación reducida de velocidades dada como:

$$\xi_s = \frac{2 v_1}{\theta_s v_{2s}} \quad (2.13)$$

donde  $\theta_s$  es la energía de ligadura reducida y ésta se define más adelante en la ecuación (2.16).

Se encuentra que para un sistema compuesto de un proyectil y un átomo blanco la sección de ionización de alguna de sus capas internas en el sistema centro de masa y usando la aproximación PWBA es:

$$\sigma_s^{PWBA} = \sigma_{0s} \theta_s^{-1} F_s \left( \frac{\eta_s}{\theta_s^2}, \theta_s \right) \quad (2.14)$$

en la que

$$\sigma_{n_s} = 8\pi a_0^2 \left( \frac{Z_1^2}{Z_{2s}^3} \right) \quad (2.15)$$

donde  $a_0 = 0.5291771 \text{ \AA}$  es el radio atómico de Bohr y  $Z_2$ , es el número atómico efectivo del blanco debido al efecto de apantallamiento electrónico [5, 6]. Para la capa K tenemos que  $Z_{2K} = Z_2 - 0.3$ , para las capas L es  $Z_{2L} = Z_2 - 4.15$ . Para las capas  $M_1$ ,  $M_2$  y  $M_3$  tenemos que  $Z_{2M1} = Z_{2M2} = Z_{2M3} = Z_2 - 11.25$  en tanto que para  $M_4$  y  $M_5$  es  $Z_{2M4} = Z_{2M5} = Z_2 - 21.15$ . Las cantidades  $\theta_s$  y  $\eta_s$  son respectivamente la energía electrónica de ligadura reducida y la energía reducida del ion, las cuales están dadas por:

$$\theta_s = 2n^2 \frac{U_{2s}}{Z_{2s}^2} \quad (2.16)$$

y

$$\eta_s = 2 \frac{E_1}{M_1 Z_{2s}^2} \quad (2.17)$$

donde  $U_{2s}$  es la energía de ligadura del electrón de la capa  $s$ . La función  $F_s$  se le llama sección eficaz universal reducida y se escribe como:

$$F_s \left( \frac{\eta_s}{\theta_s}, \theta_s \right) = \left( \frac{\eta_s}{\theta_s} \right) f_s(\eta_s, \theta_s) \quad (2.18)$$

donde

$$f_s(\eta_s, \theta_s) = \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} \frac{dQ}{Q^2} |F_{W,Q}(Q)|^2 \quad (2.19)$$

en la que  $W$  y  $Q$  están dadas por

$$W = 2 \frac{\Delta E}{Z_{2s}^2} = k^2 + \frac{1}{n^2} \quad (2.20)$$

y

$$Q = \frac{q^2}{Z_{2s}^2} \quad (2.21)$$

donde  $\Delta E$  es la energía transferida y  $hq$  es el momento transferido. Los límites de integración se obtienen a partir de los principios de conservación de la energía y el momento, quedando como:

$$Q_{\min} = M^2 \eta_s \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{W}{\eta_s M}} \right)^2, \quad (2.22)$$

$$Q_{\max} = M^2 \eta_s \left( 1 + \sqrt{1 - \frac{W}{\eta_s M}} \right)^2, \quad (2.23)$$

$$W_{\min} = \frac{\theta_s}{\eta^2} \quad (2.24)$$

y

$$W_{\max} = M\eta_s \quad (2.25)$$

donde  $M = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ . El factor de forma  $F_{W,s}(Q)$  para la transición de un electrón de un estado inicial ligado a la capa atómica  $s$  a uno final en el estado continuo está dado por:

$$F_{W,s}(Q) = \int e^{iqr} \psi_s(r) \psi_w^*(r) dr \quad (2.26)$$

donde  $\psi_s$  es la función de onda del estado inicial y  $\psi_w^*$  es el complejo conjugado de la función de onda del estado final en el continuo. Usando funciones de onda hidrogenoides no relativistas y no perturbadas la integral anterior puede resolverse analíticamente. Los factores de forma para las capas  $M$  fueron dados por Choi [6]. Así el integrando es:

$$\frac{1}{Q^2} |F_{W,M'}(Q)|^2 = A(Q, k) \frac{1}{Q} \sum_{i', j'=0}^{i_{\max}, j_{\max}} C_{i', j'}^{(M')} k^{2i'} Q^{j'} = A(Q, k) S_{M'}(W, Q) \quad (2.27)$$

donde  $M' = 3s, 3p, 3d$  y

$$|F_{W,3l_j}(Q)|^2 = \frac{2j+1}{2(2l+1)} |F_{W,3l}(Q)|^2 \quad (2.28)$$

en donde  $l_j$  corresponde a  $s_{1/2}$ ,  $p_{1/2}$ ,  $p_{3/2}$ ,  $d_{3/2}$  y  $d_{5/2}$  por lo que  $l = 0, 1, 2$  y  $j = l \pm 1/2$ . Los valores de  $i_{\max}$  y  $j_{\max}$  se indican más adelante. El factor  $A(Q, k)$  está dado por:

$$A(Q, k) = \frac{2^7 \exp\left[-\frac{2}{k} \arctan\left(\frac{2k/n}{Q-k^2+1/n^2}\right)\right]}{n^3 \left[1 - \exp\left(-\frac{2\pi}{k}\right)\right] \left[Q - k^2 + \frac{1}{n^2} + \left(\frac{2}{n}\right)^2 k^2\right]^{2n+1}} \quad (2.29)$$

Los términos  $S_{M_i}(W, Q)$  están dados de la siguiente manera:

Para  $M_1$  tenemos

$$S_{M1}(W, Q) = \frac{1}{Q} \sum_{i,j=0}^{i_{\max}, j_{\max}} C_{ij}^{(3a)} k^{2i} Q^j \quad (2.30)$$

donde  $i_{\max}$  y  $j_{\max}$  son iguales a 9. Para  $M_2$  tenemos

$$S_{M2}(W, Q) = \frac{1}{3Q} \sum_{i,j=0}^{i_{\max}, j_{\max}} C_{ij}^{(3p)} k^{2i} Q^j \quad (2.31)$$

donde  $i_{\max}$  y  $j_{\max}$  son iguales a 8. Para  $M_3$  tenemos

$$S_{M3}(W, Q) = \frac{2}{3Q} \sum_{i,j=0}^{i_{\max}, j_{\max}} C_{ij}^{(3p)} k^{2i} Q^j \quad (2.32)$$

donde  $i_{\max}$  y  $j_{\max}$  son iguales a 8. Para  $M_4$  tenemos

$$S_{M4}(W, Q) = \frac{2}{5Q} \sum_{i,j=0}^{i_{\max}, j_{\max}} C_{ij}^{(3d)} k^{2i} Q^j \quad (2.33)$$

donde  $i_{\max}$  y  $j_{\max}$  son iguales a 7. Para  $M_5$  tenemos

$$S_{M5}(W, Q) = \frac{3}{5Q} \sum_{i,j=0}^{i_{\max}, j_{\max}} C_{ij}^{(3d)} k^{2i} Q^j \quad (2.34)$$

donde  $i_{\max}$  y  $j_{\max}$  son iguales a 7. Los diferentes coeficientes  $C_{ij}$  están dados en la referencia [6] y como ejemplo, para la capa  $M_1$  hay 55 coeficientes diferentes que incluir en la suma.

Para la evaluación de las secciones de ionización utilizando el modelo PWBA podemos utilizar el programa de cómputo ISICS desarrollado por Liu y Cipolla [7].

## 2.4 Aproximación ECPSSR

Este método se debe a Brandt y Lapicki [8], el cual consiste en la incorporación de correcciones a la PWBA debidos a efectos de deflexión coulombiana del proyectil (C), de cambio en la energía de ligadura y polarización de los electrones del átomo por la presencia del proyectil (PSS), a la pérdida de energía del proyectil durante la colisión debido a la interacción con el núcleo atómico (E), y por último a efectos relativistas de los electrones (R). Este modelo teórico es en un principio más exacto que el PWBA y se ha destacado por ser el más exitoso y utilizado para las aplicaciones de técnicas con haces de iones en los últimos 20 años, sin otro que lo haya desplazado hasta el momento. Una descripción detallada de esta aproximación se encuentra en las referencias [9, 10]

Los efectos de cambios en la energía de ligadura y polarización durante la colisión se calculan utilizando la aproximación adiabática de estados estacionarios perturbados, PSS (Perturbed stationary state). De este modo se calcula el incremento temporal de la energía de ligadura del electrón cuando el ion incidente se encuentra dentro del átomo blanco, pues hay un incremento de la carga nuclear efectiva (binding energy effect). Luego cuando el proyectil pasa fuera de la nube electrónica del blanco produce un efecto de polarización pues atrae a los electrones. Esto hace que cambie nuevamente la energía de ligadura del proyectil. Estos efectos se incluyen en el cálculo de la PWBA multiplicando a  $\theta_i$  por el factor de corrección  $\zeta_i$  el cual da un valor reducido más cercano al real. Esto es, para considerar estos efectos en la ecuación (2.14) cambiamos a  $\theta_i$  por  $\zeta_i \theta_i$ .

Cuando un ion incide a altas velocidades sobre un átomo, la interacción con el núcleo no altera sensiblemente su trayectoria, pero cuando la velocidad del ion es pequeña esta interacción comienza a ser más notoria, produciendo una deflexión de la trayectoria del ion. Además, esta interacción del ion con el núcleo durante la colisión provoca una disminución en la velocidad del proyectil cuando este se aproxima al núcleo. La PWBA, al considerar prácticamente una trayectoria rectilínea del proyectil, como se sabe, no está considerando la interacción con el núcleo atómico. Esto ocasiona que a velocidades bajas del ion las aproximaciones anteriores, al no considerar la disminución en la velocidad del proyectil y la deflexión en la trayectoria, den como resultado una sobrestimación del valor de las secciones de ionización, pues estos efectos reducen la penetración del ion dentro de las capas internas del átomo. Para incluir el efecto de la deflexión coulombiana del proyectil durante la colisión se determina un factor multiplicativo  $C_{hs}^E$  para la sección PWBA, el cual resulta ser función de la distancia de mínimo acercamiento posible del proyectil, dada por:

$$d = \frac{Z_1 Z_2}{M v_1^2} \quad (2.35)$$

del mínimo momento promedio transferido:

$$q_{0s}^R = \frac{U_{2s}}{v_1} \quad (2.36)$$

y de la cantidad  $\zeta_s$ . Así pues tenemos que  $C_{B_s}^E = C_{B_s}^R (d q_{0s}^R \zeta_s)$ .

A medida que va creciendo el número atómico de los átomos los electrones que se encuentran en las capas más internas se mueven cada vez más rápidamente. Esto conduce a que para una descripción más correcta del átomo se requiera del uso de funciones de onda relativistas. En el modelo ECPSSR para hacer más real el cálculo de la sección PWBA, debido a que esta ocurre a funciones de onda no relativistas, lo que hace es incluir correcciones relativistas a la masa del electrón debido a su movimiento. Exactamente esto no corresponde a utilizar funciones de onda relativistas, pero se toma como una consideración inicial para poder corregir un poco por este efecto relativista. Así los cálculos se siguen haciendo con funciones de onda no relativistas pero se considera que la masa del electrón es mayor a la que tiene en reposo debido a su movimiento. Esto anterior se efectúa por medio de un factor  $m_s^R$  que multiplica al término  $\eta_s$  en forma análoga al caso del factor  $\zeta_s$ . Este factor de corrección en un principio estará dado como una función del cociente  $\xi_s / \zeta_s$ , es decir:  $m_s^R = m_s^R (\xi_s / \zeta_s)$ .

De acuerdo con todo lo anterior tenemos que la sección de ionización dada por la ECPSSR está dada como:

$$\sigma^{ECPSSR} = C_{B_s}^E (d q_{0s}^R \zeta_s) \sigma_s^{PWBA} \left( \frac{m_s^R \left( \frac{\xi_s}{\zeta_s} \right) \eta_s}{(\zeta_s \theta_s)^2}, \zeta_s, \theta_s \right) \quad (2.37)$$

Esto anterior significa que para calcular la sección de ionización en el modelo ECPSSR hay que evaluar a la sección PWBA dada por la ecuación (2.14) utilizando las cantidades  $m_s^R$ ,  $\eta_s / (\zeta_s \theta_s)^2$  y  $\zeta_s \theta_s$  en lugar de  $\eta_s / \theta_s^2$  y  $\theta_s$  respectivamente y luego multiplicarla por la función de corrección  $C_{B_s}^E$ .

Para el caso de las capas atómicas K y L existen expresiones analíticas para todos los factores de corrección indicados antes. En el caso de la capa M la situación es diferente pues no se han publicado hasta la fecha las expresiones analíticas adecuadas. Sin embargo existen aproximaciones bastante aceptables que pueden utilizarse adecuadamente.

El factor de corrección  $\zeta_s$  para las diferentes capas  $M_i$  está dado por [11]:

$$\zeta_{Mn} = \left( 1 + \frac{Z_1}{Z_2 - S} \right)^2 \quad (2.38)$$

donde  $S$  es el factor de apantallamiento para corrección del número atómico del blanco, indicados anteriormente.

El factor de corrección coulombiana está dado como [8]:

$$C_{R_s}^R(dq_{0_s}^R, \zeta_s) = \nu E_{\nu+1} \left[ \frac{2\pi d q_{0_s}^R \zeta_s}{z_s (z_s + 1)} \right] \quad (2.39)$$

donde  $\nu = 9 + 2 l_2$  y  $l_2$  es el número atómico de momento angular del electrón del blanco, los cuales están dados como  $l_2 = 0$  para  $M_1$ ,  $l_2 = 1$  para  $M_2, M_3$  y  $l_2 = 2$  para  $M_4, M_5$ . Luego:

$$z_s = \sqrt{1 - \frac{4}{M \zeta_s \theta_s} \left( \frac{\zeta_s}{\zeta_s} \right)^2} \quad (2.40)$$

Finalmente  $E_m(y)$  es la integral exponencial de orden  $m$ , la cual está dada por:

$$E_m(y) = \frac{\exp(-y)}{y+m} \left[ 1 + \frac{m}{(y+m)^2} + \frac{m(m-2y)}{(y+m)^4} + \frac{m(6y^2 - 8my + m^2)}{(y+m)^6} + \dots \right] \quad (2.41)$$

Como se ha mencionado antes, tenemos que para las capas M no hay una expresión analítica para calcular el factor de corrección relativista. Pero como tenemos el hecho de que los electrones del átomo para la capa M no se encuentran muy cerca del núcleo atómico es de esperarse que sus velocidades no sea muy grandes y por tanto las correcciones relativistas en su masa sea muy pequeñas. Por este motivo tomamos a  $m_s^R = 1$ .

## Referencias.

- [1] B.H. Bransden y C.J. Joachain, *Physics of atoms and molecules*, Longman, Londres, 1983.
- [2] L.D. Landau y E.M. Lifshitz, *Mecánica Cuántica no relativista*, Curso de Física Teórica, Vol. 3, Editorial Reverté, Barcelona, 1983.
- [3] E. Merzbacher and H. Lewis, en *Handbook of Physics*, ed. S. Flügge, Springer, Berlín, Vol. 34 (1958) 166.
- [4] D.H. Madison and E. Merzbacher, en *Atomic Inner-Shell Processes*, ed. B Crasemann, Academic Press, New York, 1975.
- [5] J.C. Slater, *Physical Review* **36** (1930) 57.
- [6] B. Choi, *Physical Review A* **7** (1973) 2056.
- [7] Z. Liu and S.J. Cipolla, *Computer Physics Communications* **97** (1996) 315.
- [8] W. Brandt and G. Lapicki, *Physical Review A* **23** (1981) 1717.
- [9] L. Rodríguez Fernández, tesis doctoral, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, México, 1994.
- [10] T. Mukoyama, *International Journal of PIXE*, **1** (1991) 209.
- [11] M. Chen and B. Crasemann, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **33** (1985) 217.

## CAPÍTULO 3

### DESARROLLO EXPERIMENTAL

#### 3.1 Dispositivo experimental.

En este capítulo se da la descripción del dispositivo experimental empleado y el procedimiento seguido para efectuar la medición de las secciones.

Los experimentos se realizaron con el acelerador Van der Graaff de 0.7 MV del Instituto de Física de la UNAM. En la figura 3.1 se muestra un dibujo esquemático de este acelerador.

Este tipo de aceleradores consiste en una terminal aislada de alto voltaje en forma de "campana". Esta terminal de alto voltaje se carga eléctricamente con un potencial positivo transportando electrones de la terminal a tierra. Esto se realiza por medio de una banda de material aulado aislante que se mueve con la ayuda de dos poleas, una de las cuales se encuentra adentro de la terminal y otra afuera con el potencial de tierra. Cuando la banda se encuentra en la parte externa de la terminal pasa por un peine metálico conectado a la terminal positiva de una fuente de voltaje. Esto produce que electrones que se encuentran en la banda sean atraídos por el peine y dejen a la banda aulada con carga eléctrica positiva. Luego al moverse la banda con ayuda de las poleas, la parte cargada positivamente de esta que llega a la terminal atrae a las cargas negativas, electrones, que le son transmitidos por otro peine metálico. Así la banda regresa de la terminal con carga neutra para repetir el ciclo una vez más. De esta manera, al ir quitando electrones a la terminal de alto voltaje ésta se carga positivamente. Para evitar que la terminal de alto voltaje produzca descargas eléctricas se le coloca dentro de un tanque presurizado con gas de hexafluoruro de azufre,  $SF_6$ , el cual es un excelente dieléctrico y le permite obtener grandes diferencias de potencial. En el interior de la terminal de alto voltaje se encuentra una fuente de iones, la cual por medio de radiofrecuencia puede ionizar átomos en estado gaseoso como los de hidrógeno o helio. En esta fuente de iones se produjeron los protones utilizados en este trabajo al ionizar átomos de hidrógeno. Los protones al estar cargados positivamente son expulsados por la propia terminal de alto voltaje a través de un tubo acelerador que se encuentra en vacío (cuando menos unos  $10^{-5}$  Torr). Los protones u otros iones son concentrados a lo largo del tubo acelerador por medio de una serie de anillos equipotenciales los cuales rodean al tubo acelerador. Los anillos equipotenciales reciben este nombre porque se encuentran a una misma diferencia de potencial entre sí. El que los anillos sean equipotenciales se logra por medio de resistencias eléctricas iguales conectadas en serie entre cada uno de los anillos. A la parte donde se encuentran los anillos equipotenciales junto con el tubo acelerador se les conoce como la columna del acelerador. También se tienen unas puntas metálicas, llamadas puntas de corona, que se pueden acercar y alejar a la terminal dentro del tanque. Estas puntas de corona sirven para estabilizar el potencial eléctrico de la terminal. Como las descargas a las puntas de corona tienen lugar dentro del tanque presurizado del acelerador, éstas no interfieren directamente con los experimentos que se estén realizando. Cuando el potencial eléctrico de la terminal es

superior al deseado se produce una descarga que le permite volver a tener un potencial adecuado. De esta manera, el potencial de la terminal se vuelve estable cuando la carga suministrada por la banda a la terminal es igual a la que se pierde por el haz de protones. La corriente a lo largo de la columna y la debida a descargas eléctricas a través de las puntas de corona. La energía de los protones cuando salen al final del tubo acelerador tienen en promedio la equivalente al potencial de la terminal del acelerador.

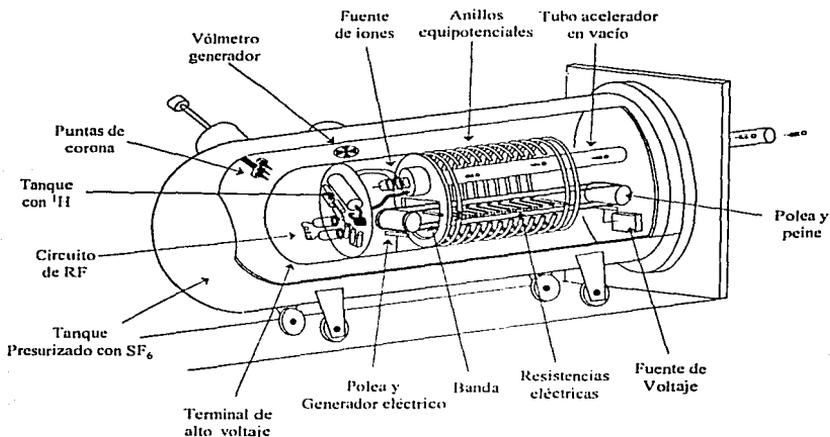
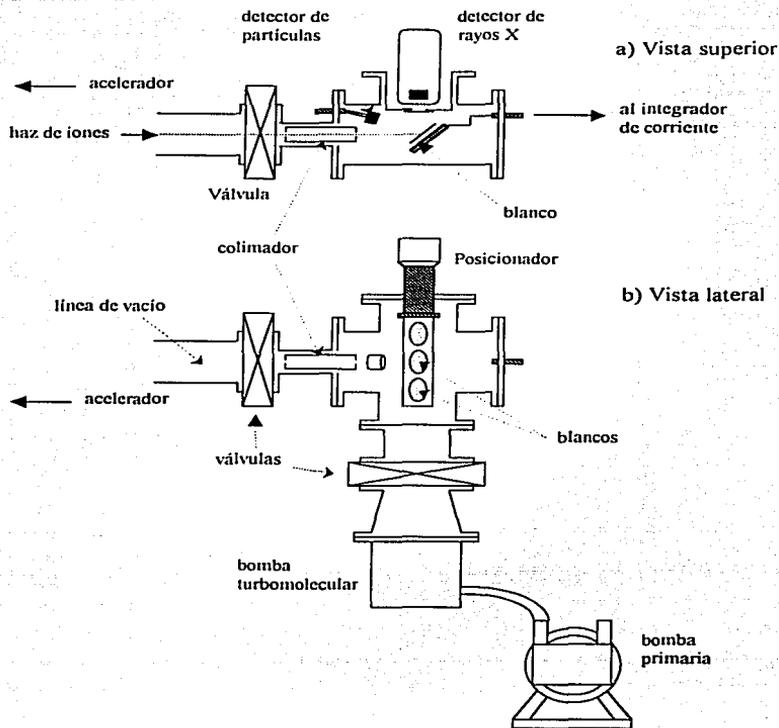


Figura 3.1 Dibujo esquemático del acelerador Van de Graaff de 0.7 MV del Instituto de Física de la UNAM.

A la salida del acelerador los protones son dirigidos hacia alguna de las cámaras de análisis del laboratorio moviéndose en el interior de tubos en vacío llamados líneas de vacío. Para esto, los protones primeramente pasan por el campo magnético generado por un electroimán que los deflecta hacia la línea de vacío que conduzca a la cámara que se quiera utilizar. Este electroimán también sirve para seleccionar la energía de los protones que se van a enviar a la cámara de análisis. De esta forma, dado un campo magnético, los protones que tengan una energía determinada van a ser los únicos deflectados en la dirección de la línea de vacío y en llegar a la cámara donde esté el blanco a bombardear. Para estos experimentos se utilizó la cámara al final de la línea de  $35^\circ$ . El haz de protones antes de entrar a la cámara fue colimado con un orificio circular de  $1 \text{ mm}^2$ . En la figura 3.2 se muestra un diagrama de la cámara de análisis empleada. El vacío en el tubo acelerador, la línea y la cámara se efectuó por medio de bombas turbomagnéticas apoyadas con bombas mecánicas primarias.

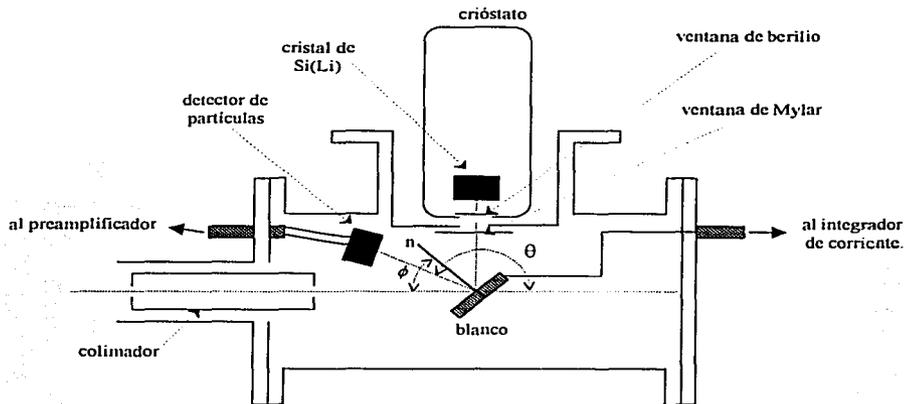


*Figura 3.2 Diagrama de la cámara de análisis utilizada para los experimentos realizados.*

En la figura 3.3 se muestra un diagrama más amplio del interior de la cámara. En la cámara de análisis los blancos se encuentran en vacío y se montaron de tal manera que los protones inciden a un ángulo  $\phi = 45^\circ$  con respecto a la normal de la muestra. Los rayos X inducidos en el blanco fueron registrados con un detector de silicio con litio difundido [1], que suele denotarse como Si(Li), con un área activa de  $30\text{mm}^2$  marca Canberra y modelo SL30165. Estos detectores funcionan a la temperatura del nitrógeno líquido ( $77^\circ\text{K}$ ), por lo cual el cristal de silicio con litio difundido se encuentra en el interior de un crióstato en vacío para evitar que se forme hielo en torno a él. Los rayos X que llegan al cristal de Si(Li) entran en el crióstato a través de una ventana de berilio. El detector de Si(Li) se encuentra localizado en el exterior de la cámara de manera perpendicular a la incidencia del

haz y a  $45^\circ$  con respecto a la normal al blanco. La cámara de análisis tiene una ventana circular de Mylar por donde salen los rayos X emitidos en la dirección del detector de Si(Li). Se utiliza el Mylar como ventana porque está compuesto de elementos muy ligeros (H, C y O) que no atenúan mucho la intensidad de los rayos X y porque además permite mantener el interior de la cámara en vacío. De esta manera los rayos X antes de llegar a la ventana de berilio del detector debieron de pasar a través de la ventana de Mylar y una capa de aire de aproximadamente 20 mm.

Para registrar a los iones retrodispersados por el blanco se utilizó un detector de partículas de estado sólido del tipo PIPS (Passivated Implanted Planar Silicon detector) [1], marca Canberra modelo PD25-12-100AM, localizado en el interior de la cámara a un ángulo  $\theta = 151^\circ$  con respecto a la dirección de incidencia del haz. También ambos detectores se encontraban sobre el mismo plano que forman la normal del blanco y la línea de incidencia del haz (geometría conocida con el nombre de IBM). Para determinar con mejor exactitud el ángulo sólido que subtende el detector de partículas, a éste se le colocó un colimador de área conocida para definir bien el área de detección.



*Figura 3.3 Vista superior de la cámara de análisis. La cámara se encuentra en vacío y el blanco se coloca en su interior. La letra n nos indica la dirección normal al blanco. Los protones inciden sobre la muestra blanco a un ángulo  $\phi = 45^\circ$  con respecto a la normal. Los protones retrodispersados en un ángulo  $\theta = 151^\circ$  son registrados por un detector de partículas. Afuera de la cámara y a  $90^\circ$  con respecto al haz de protones se localiza el detector de rayos X. Este consiste de un cristal de Si(Li) en el interior de un criostato en vacío. Los rayos que se detectan con este cristal salen de la cámara por una ventana de Mylar, atraviesan una capa de aire y luego entran en el criostato por una ventana de berilio.*

El portamuestras en el interior de la cámara de análisis se conecta a un amperímetro e integrador de corriente. Esto anterior se hace la finalidad de tener un control del haz de partículas sobre el blanco, pues permite tener una medida de la intensidad y de la cantidad de protones que inciden sobre la muestra durante la realización del experimento.

En la figura 3.4 se muestran los pasos que se siguieron para el tratamiento de las señales producidas por los dos detectores utilizados. Las señales eléctricas producidas por cada uno de los detectores son linealmente proporcionales a la energía de la radiación y son enviadas inicialmente a un preamplificador, el cual le incrementa la magnitud a la señal para que pueda ser tratada electrónicamente de una manera adecuada. Luego llegan a un amplificador que le da a cada señal una forma cuasigaussiana y una altura proporcional a la energía de la radiación. De ahí se envía a un multicanal el cual muestra el histograma de la energía de la radiación detectada, (esto es, la gráfica de la energía de la radiación contra el número de veces que es registrada por el detector). Estas gráficas nos dan la forma de los espectros de radiación de rayos X y de protones retrodispersados que son emitidos por la muestra al ser bombardeada. En los experimentos se utilizó una tarjeta multicanal MCA marca Ortec modelo TRUMP para computadora personal, donde se obtenía el espectro de la radiación detectada. Este multicanal tiene integrado un sistema de conversión de amplitud de pulso a señal digital, ADC (Analog Digital Converter), con lo cual toda la información recabada por el multicanal podía ser grabada en discos de computadora. Cada uno de estos sistemas de tratamiento de señales fue independiente para cada detector.

Para evitar tener problemas de conteo debido a tiempos muertos en los detectores se procedió a bombardear los blancos con corrientes pequeñas de haz (de 0.5 nA a 8 nA) y así tener bajas tasas de conteo. En ocasiones se comprobó que el tiempo muerto era pequeño con ayuda de un generador de pulsos conectado al preamplificador de cada detector. Al final el número de pulsos enviados por el generador y los que fueron registrados no variaba en más de 1%.

### 3.2 Calibración del sistema de detección de rayos X.

Al bombardear con protones de energía  $E_0$  algún tipo de material sólido en forma de película delgada donde podamos suponer que el protón no pierde energía al atravesarla, tenemos que el número  $Y_X$  de rayos X de una determinada línea de emisión registrados por el detector de Si(Li) y que son producidos por los átomos de un elemento químico en particular presente en la muestra estará dado como:

$$Y_X = \varepsilon Q \sigma_X(E_0) N t / \cos \phi \quad (3.1)$$

donde  $Q$  es el número de protones que inciden sobre la muestra,  $\sigma_X(E_0)$  es la sección de producción de rayos X de la línea en cuestión por protones de energía  $E_0$ ,  $N$  es el número de átomos por unidad de volumen del elemento que produce los rayos X,  $t$  es el espesor de la película delgada,  $\phi$  es el ángulo que hay entre la normal al blanco y la dirección del haz de protones, finalmente  $\varepsilon$  es la eficiencia del detector de Si(Li) que se define como la razón de la cantidad de rayos X que son detectados entre el total de estos que fue producido en el

blanco. Además, para esta película delgada suponemos que los rayos X inducidos por los protones no son atenuados dentro de ella.

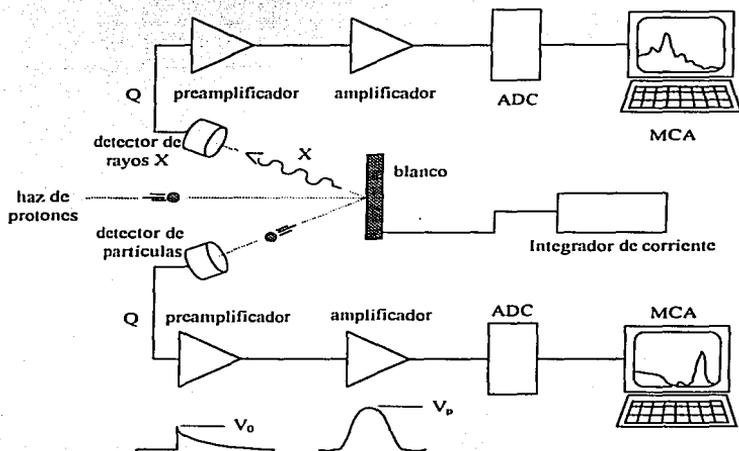


Figura 3.4 Diagrama de bloques del sistema de detección de rayos X y de partículas, que muestra el tratamiento que se le dio a las señales producidas. En la parte inferior se muestran las formas aproximadas de las señales producidas por los preamplificadores y amplificadores.

Análogamente, tenemos que el número  $Y_p$  de protones retrodispersados por la misma película debido a colisiones con los átomos de un elemento químico en particular presente en la muestra y que son registrados por el detector de partículas está dado por:

$$Y_p = \epsilon_p Q \sigma_R(E_0, \theta) N t / \cos \phi \quad (3-2)$$

donde  $\sigma_R(E_0, \theta)$  es la sección de retrodispersión de protones de energía  $E_0$  en la dirección  $\theta$ .

Suponiendo que la película delgada sea homogénea y uniforme, al considerar la pérdida de energía que sufre el proyectil al atravesarla tenemos que las expresiones correctas para  $Y_X$  y  $Y_p$  serían respectivamente:

$$Y_x = \frac{\varepsilon Q N}{\cos \phi} \int_0^x \sigma_x(E) \exp(-\mu x / \sin \phi) dx \quad (3-3)$$

y

$$Y_p = \frac{\varepsilon Q N}{\cos \phi} \int_0^x \sigma_p(E, \theta) dx \quad (3-4)$$

en donde para  $Y_x$  también se tomó en cuenta la atenuación de los propios rayos X inducidos dentro de la misma película, siendo  $\mu$  el coeficiente de atenuación. Las dos integrales anteriores se resuelven poniendo la energía  $E$  del proyectil dentro de la muestra en función de la profundidad  $x$ . En muchos casos cuando las películas delgadas son de hasta el orden de un micrómetro basta con utilizar las ecuaciones (3-1) y (3-2) multiplicadas por un factor de corrección.

La emisión de rayos X inducidos por protones y la retrodispersión de los protones, en ambos casos originados por colisiones con los átomos de un elemento químico en particular presente en la película delgada, son fenómenos independientes pero que dependen en común de las cantidades  $N$  y  $Q$ . Esto tiene la gran ventaja de que los dos fenómenos pueden asociarse simultáneamente en un análisis para eliminar la dependencia de  $N$  y  $Q$  tal como se indica más adelante.

Para saber exactamente la cantidad de rayos X producidos en el blanco es necesario conocer muy bien la eficiencia  $\varepsilon$  del detector de Si(Li) y así poder efectuar las mediciones propuestas. Por ello, la eficiencia se midió utilizando el método de blancos delgados [2], el cual hace uso del conocimiento más preciso y exacto que se tiene actualmente de las secciones de producción de rayos X K [3]. En este método se detectan los rayos X K y con energía  $E_x$  que son producidos por átomos de elementos que se encuentran en forma de películas delgadas al ser bombardeados con protones de energía  $E_0$ . El uso de películas delgadas tiene la ventaja de que los iones retrodispersados por la misma película pueden ser empleados para normalizar la carga total acumulada en el blanco. Esto se puede hacer a partir de la división de la ecuación (3-1) entre la (3-2). Así, la eficiencia  $\varepsilon(E_x)$  para rayos X de energía  $E_x$  esta dada por:

$$\varepsilon(E_x) = \frac{Y_x \sigma_K(E_0) \Omega_p F_p}{Y_p f_a \omega_K \sigma_K(E_0) F_x} \quad (3-5)$$

donde  $Y_x$  y  $Y_p$  son respectivamente el número de rayos X de energía  $E_x$  detectados y el número total de iones retrodispersados por los átomos del mismo elemento que produce los rayos X;  $\sigma_K(E_0)$  y  $\sigma_p(E_0)$  son respectivamente la sección de ionización de la capa K y la sección eficaz de retrodispersión para los protones de energía  $E_0$ ;  $\omega_K$  es la fluorescencia de la capa K,  $f_a$  es la fracción de rayos X K $\alpha$  emitidos y  $\Omega_p$  es el ángulo sólido del detector de partículas;  $F_x$  y  $F_p$  son dos factores para corregir las secciones  $\sigma_K(E_0)$  y  $\sigma_p(E_0)$  por los efectos del frenamiento del protón dentro de la película, así como también considerar los efectos de atenuación de los rayos X en la película.

Se define el factor de corrección  $F_P = N_P / N_P^0$ , donde  $N_P$  es el número de iones retrodispersado cuando se considera el frenamiento en la película delgada de espesor  $T$  (ecuación 3-4) y  $N_P^0$  es cuando no hay frenamiento en el protón, (es decir,  $T \rightarrow 0$ , ver ecuación 3-2). Análogamente se define  $F_X = N_X / N_X^0$ , donde  $N_X$  es el número de rayos X producidos cuando se considera el frenamiento del ion y el atenuamiento de los rayos X en el blanco (ecuación 3-3) y  $N_X^0$  es cuando no hay frenamiento ni atenuamiento (ecuación 3-2). En intervalos pequeños de energía  $E$  del protón se tiene que  $\sigma_R \propto E^\alpha$  donde  $\alpha$  es una constante. Análogamente el frenamiento del ion en el blanco se puede aproximar por  $dE/dx = E^\beta$  donde  $\beta$  es una constante. Con estas consideraciones Pajek et al. [4] deducen una expresión para estos factores de corrección cuando la incidencia de los protones es a  $45^\circ$  con respecto de la normal a la muestra. Así obtiene el factor de corrección:

$$F(E_0, \Delta E) = \frac{F_P}{F_X} = \frac{1 + \frac{1}{2}(\beta + 2) \frac{\Delta E}{E_0}}{1 - \frac{1}{2} \left( \alpha - \beta + \frac{\mu E_0}{S(E_0)} \right) \frac{\Delta E}{E_0}} \quad (3.6)$$

donde  $S(E_0) = dE/dx$  es el frenamiento evaluado en  $E_0$  y  $\Delta E = S(E_0)T$ ;  $\mu$  es el coeficiente de atenuación de los rayos  $E_X$  en el blanco. El espesor de la película fue determinado a partir de la cantidad  $Y_P$  obtenida del espectro de retrodispersión de iones, RBS, y haciendo uso de la ecuación (3-2) multiplicada por un factor de corrección  $F_P$  [5].

En principio para la sección de retrodispersión  $\sigma_P$  se utiliza la sección de Rutherford en forma diferencial y en el sistema de referencia del laboratorio:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_P} = \left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E \sin^2 \theta} \right)^2 \frac{(m_2^2 - m_1^2 \sin^2 \theta)^{1/2} + \cos \theta}{(m_2^2 - m_1^2 \sin^2 \theta)^{1/2}} \quad (3.7)$$

donde  $Z_1$  y  $Z_2$  son respectivamente los números atómicos del proyectil y del átomo blanco, cuyas masas son  $m_1$  y  $m_2$ ;  $e$  es la carga del electrón,  $E$  la energía del ion antes de la colisión y  $\theta$  es el ángulo de retrodispersión. Debido a que los electrones que se encuentran alrededor del núcleo atómico del átomo blanco producen un efecto de apantallamiento de la carga real del núcleo, para considerar este efecto se utiliza la expresión de L'Ecuyere et al. [6], dada como:

$$\sigma_P = \left( 1 - 0.049 \frac{Z_1 Z_2^{4/3}}{E} \right) \sigma_R \quad (3.8)$$

donde  $\sigma_R$  es la sección de Rutherford.

Los otros parámetros involucrados en la ecuación (3-5) los obtenemos a partir de las respectivas tablas de datos que han sido publicadas y que fueron las siguientes: Las  $\sigma_K(E_0)$

se obtuvieron de las tablas de valores de referencia de Paul y Sacher [3]. Los valores de  $\omega_K$  se tomaron de las tablas de Krause [7] y los de  $f_{\alpha}$  se obtuvieron a partir de las razones de las intensidades  $K\beta/K\alpha$  de Khan y Karimi [8]. El valor de las constantes  $\alpha$  se determinó a partir de un ajuste a valores de  $\sigma_K(E)$  de las tablas de Paul y Sacher [3]. Los valores de  $\beta$  se obtuvieron a partir de las tablas de Ziegler *et al.* [9] para el poder de frenamiento de protones. Los valores de  $\mu$  se obtuvieron a partir del programa de cómputo ATTENV4 de Orlic *et al.* [10], que utiliza la compilación de datos del programa de cómputo XCOM [11] para fotones de alta energía y funciones semiempíricas para los de baja energía.

Para la calibración de la eficiencia del detector de Si(Li) se bombardearon películas delgadas con protones de 700 keV. Los blancos fueron películas delgadas ( $\approx 50 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ) evaporadas sobre mylar de los siguientes compuestos: Mg, Al, SiO, GaP, CuS<sub>x</sub>, NaCl, KCl, CaF<sub>2</sub>, ScF<sub>3</sub>, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ge. Estas películas fueron adquiridas a la compañía Micromatter, de Estados Unidos.

Los espectros de rayos X que se obtienen con los detectores como el de Si(Li), en general, consisten en picos de forma cuasigaussiana o lorenciana (es decir, de forma gaussiana con una cola del lado de baja energía) superpuestos sobre un fondo continuo de radiación. Tanto los picos como el fondo de radiación son emitidos simultáneamente por la muestra al ser bombardeada con protones. Los picos lorencianos corresponden a las líneas de emisión de rayos X que están siendo detectadas. El área debajo de los picos, que consiste en el número de cuentas que lo integran, corresponde a la cantidad  $Y_N$ . Para extraer de una manera adecuada esta cantidad es necesario "remover" al fondo de radiación hasta conseguir que los picos tengan la forma cuasigaussiana deseada. A este proceso se le conoce como la deconvolución del espectro de rayos X.

Las áreas  $Y_N$  de los picos de rayos X fueron obtenidas utilizando el programa de cómputo AXIL [12]. Este programa fue desarrollado para efectuar el análisis de espectros de rayos X por PIXE o fluorescencia de rayos X, XRF (X-Ray Fluorescence Analysis). Este programa permite la deconvolución de los picos de rayos X ajustando por medio de mínimos cuadrados no lineales un fondo al continuo de radiación, picos gaussianos y correcciones en los lados de baja energía de los picos gaussianos para tomar en cuenta las colas exponenciales que se producen en el detector de Si(Li) [13]. El número de iones retrodispersados en la película delgada por el elemento en cuestión  $Y_P$  se determinó utilizando el programa RUMP [14], el cual se utiliza para el análisis de espectros de RBS. En estos casos de retrodispersión por una película delgada el espectro RBS prácticamente es un pico gaussiano de donde el área se extrae directamente después de restar un fondo continuo prácticamente lineal. Finalmente los valores experimentales para la eficiencia se obtuvieron sustituyendo en la ecuación (3-5).

Para poder tener la eficiencia del detector para cualquier fotón con energía  $E_X$  se procede a ajustar una curva continua a las eficiencias medidas directamente. La curva que conviene ajustar en estos casos es la propuesta por Gallagher y Cipolla [15] para su parte de baja energía dada como:

$$\varepsilon(E_X) = \Omega' \exp(-\alpha' E_X^{-\beta'}) \quad (3-9)$$

donde  $\Omega$ ,  $\alpha'$  y  $\beta'$  son parámetros que se ajustan por medio de mínimos cuadrados no lineales. Para efectuar estos ajustes se utilizó el programa de cómputo ORIGIN 5.0 de Microcal.

Otra propiedad fundamental del detector de Si(Li) que fue necesario determinar fue su resolución. Los picos de rayos X que se observan en un espectro tomado con un detector de Si(Li) son prácticamente un pico gaussiano con una cola en el lado de baja energía. El ancho del pico gaussiano es debido a efectos estadísticos en la generación de carga en el detector y a el ruido electrónico del preamplificador [1]. La cola es debida principalmente a efectos de mala colección de carga en el cristal detector, lo que produce pulsos correspondientes a radiación de menor energía [16]. La resolución del detector se expresa generalmente en términos de la anchura del pico a la mitad del máximo, FWHM (Full Width at Half Maximum). La resolución es función de la energía  $E_X$  de los fotones y para rayos X con energías menores a 40 keV ésta se expresa como [1]:

$$(FWHM)^2 = W_{elec}^2 + (2.35)^2 \delta F E_X \quad (3-10)$$

donde  $W_{elec}^2$  es la contribución debida al ruido electrónico,  $\delta = 3.81$  eV que es la energía necesaria para producir un par electrón-hueco en silicio a 77 °K, F es el factor de Fano que sirve para considerar las desviaciones que puedan existir en la estadística de Poisson en el proceso de formación de portadores de carga en el detector. Utilizando los mismos espectros de rayos X obtenidos para medir la eficiencia del detector se procedió a determinar el FWHM de las líneas  $K\alpha$ . Finalmente utilizando la expresión (3-10) se procedió a determinar la resolución del detector en función de la energía de los fotones.

### 3.3 Medición de las secciones de producción de rayos X M.

Para medir las secciones de producción de rayos X M se utilizó también el método de blancos delgados, pues como se ha mencionado antes permite el empleo de la retrodispersión de iones para determinar el número de iones que incidieron sobre la muestra. Se midieron estas secciones para los elementos  $^{79}\text{W}$ ,  $^{79}\text{Au}$ ,  $^{82}\text{Pb}$ ,  $^{83}\text{Bi}$ ,  $^{90}\text{Th}$  y  $^{92}\text{U}$  utilizando protones con energías entre 0.3 MeV y 0.7 MeV en pasos de 50 keV. Los blancos utilizados consistieron también en películas delgadas ( $\approx 50$   $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ ) depositadas sobre Mylar marca Micromatter de los siguientes compuestos:  $\text{WO}_3$ , Au, Pb, Bi,  $\text{ThF}_4$  y  $\text{UF}_4$ . La cantidad de rayos X de las líneas M más intensas se obtuvo ajustando funciones gaussianas a cada una de ellas. Para el  $^{79}\text{W}$  las líneas consideradas fueron la  $M_C$ ,  $M_{\alpha+\beta}$ ,  $M_\gamma$ ,  $M_1-N_3$  y  $M_1-O_{2,3}$ . Para los demás elementos las líneas consideradas fueron la  $M_C$ ,  $M_3-N_1$ ,  $M_{\alpha+\beta}$ ,  $M_\gamma$ ,  $M_3-O_{4,5}$ ,  $M_2-O_4$  y  $M_1-O_2$ . Las energías de estas líneas se obtuvieron a partir de las tablas de Bearden [17].

La sección de producción de rayos X  $\sigma_{M_i}(E)$  inducidos con protones de energía E para la línea  $M_i$  se obtiene a partir del área  $Y_X$  de su correspondiente pico gaussiano ajustado y del número de iones retrodispersados  $Y_P$  por el elemento de interés utilizando la expresión:

$$\sigma_{M_i}(E) = \frac{Y_X \sigma_p(E) \Omega_p}{Y_p \epsilon(E_{M_i})} F(E, \Delta E) \quad (3-11)$$

donde  $\sigma_p$  es la sección de retrodispersión para protones dada por la ecuación (3-8),  $\epsilon(E_{M_i})$  es la eficiencia del detector para los fotones de la línea  $M_i$ ; y  $F(E, \Delta E)$  es el factor de corrección dado por la ecuación (3-6) para considerar los efectos de frenamiento del protón y la absorción de rayos X en la misma película.

En este caso el cálculo del factor  $F(E, \Delta E)$  es diferente al que se utilizó para la calibración del detector debido a que no se conoce el valor de la constante  $\alpha$  porque es la sección de rayos X la que se está midiendo. Para ello lo que se propone es ajustar en forma autoconsistente el parámetro  $\alpha$  [18]. Esto se efectúa de la siguiente manera: primero se toma el valor de la sección  $\sigma_{M_i}$  considerando que  $F = 1$ . Con estos primeros datos para la línea  $M_i$  se procede a ajustarles una función de la forma  $y = kE^{-\alpha}$  de donde se obtiene una primera aproximación de  $\alpha$ . Luego, se repite este procedimiento tomando ahora para el cálculo de la función  $F$  el de la constante  $\alpha$  obtenida anteriormente. Se continúa repitiendo este procedimiento hasta que el valor de la  $\alpha$  llega a un valor estable. Prácticamente después de tres iteraciones se llegaba al valor  $\alpha$  estable.

Para determinar los valores de las intensidades  $Y_X$  se utilizó inicialmente el programa AXIL, pero debido a que en su proceso de ajuste de los picos gaussianos permite la variación del ancho del pico y del centroide los resultados que se fueron obteniendo no fueron consistentes en algunos casos. Por este motivo se procedió a efectuar la deconvolución de los espectros utilizando los ajustes no lineales del programa ORIGIN 5.0 con el cual fue posible mantener fijo la posición (energía de las líneas) y el ancho de los picos de acuerdo con correspondiente resolución en energía. De esta manera se ajustó simultáneamente un fondo continuo de radiación y los picos gaussianos de las líneas de rayos X M. Para el fondo se utilizó un polinomio de cuarto grado. Así la función ajustada fue:

$$f = \sum_{n=0}^4 A_n x^n + \sum_j B_j \exp\left(\frac{(x - x_j)^2}{2C_j^2}\right) \quad (3-12)$$

donde  $x$  corresponde a la energía de los fotones, las  $A_n$  son los coeficientes del polinomio ajustado al fondo,  $x_j$  es la energía de los rayos X correspondientes a la línea  $M_j$ , la  $B_j$  es la altura de la gaussiana y  $C_j$  es su ancho. En los ajustes solamente se variaron los parámetros  $A_n$  y  $B_j$  en tanto que se mantuvieron constantes las  $x_j$  y  $C_j$ . Para que el proceso de ajuste no lineal del ORIGIN no tuviera problemas la primer aproximación de los coeficientes  $A_n$  se tomó de los resultados del AXIL.

## Referencias.

- [1] G. F. Knoll, Radiation detection and measurement, John Wiley & Sons, New York, 1979.
- [2] W.N. Lennard and D. Phillips, Nuclear Instruments and Methods In Physics Research **166** (1979) 521.
- [3] H. Paul and J. Sacher, Atomic Data and Nuclear Data Tables **42** (1989) 105.
- [4] M. Pajek, A.P. Kobzev, R. Sandrik, R.A. Ilkhamov and S.H. Khosmurudov, Nuclear Instruments and Methods In Physics Research **B 42** (1989) 346.
- [5] W.K. CHU, J.M. Mayer and M.A. Nicolet, Backscattering Spectrometry, Academic Press, New York, 1978.
- [6] J.L. L'Ecuyere, J. A. Davies and N. Matsunami, Nuclear Instruments and Methods In Physics Research **160** (1979) 337.
- [7] M.O. Krause, J. Physical Chemical Reference Data **8** (1979) 307.
- [8] Md.R. Khan and M. Karimi, X-Ray Spectrometry **9** (1980) 307.
- [9] J.F. Ziegler, J.P. Bierzack and U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in Solids, Vol. 1, Pergamon Press, New York, 1985.
- [10] I. Orlic, K.K. Loh, C.H. Sow, S.M. Tang and P. Thong, Nuclear Instruments and Methods In Physics Research **B 74** (1993) 352.
- [11] M.J. Berger and J.H. Hubbell, National Bureau of Standars, Report NBSIR 87-3597, 1987.
- [12] P. Van Espen, H. Nullens and W. Maenhaut, en Microbeam Analysis 1979, San Francisco Press, San Francisco, 1979.
- [13] P. Van Espen, H. Nullens and F. Adams, Nuclear Instruments and Methods In Physics Research **145** (1977) 579.
- [14] L.R. Doolittle, Nuclear Instruments and Methods In Physics Research **B 15** (1986) 227.
- [15] W.J. Gallagher and S.J. Cipolla, Nuclear Instruments and Methods In Physics Research **122** (1974) 405.
- [16] L. Rodriguez-Fernández, J. Miranda and A. Oliver, Journal of X-Ray Science and Technology **4** (1994) 221.
- [17] J. A. Bearden, Review of Modern Physics, **39** (1967) 78.
- [18] M. Pajek, A.P.Kobzev, R. Sandrik, A.V. Skrypnik, R.A. Ilkhamov, S.H. Khusmurodov, G. Lapicki, Phys. Rev. A **42** (1990) 261.

## CAPÍTULO 4

### RESULTADOS Y CONCLUSIONES

#### 4.1 Resultados de la calibración del detector de Si(Li).

En este capítulo mostramos los resultados experimentales obtenidos a partir de los procedimientos experimentales expuestos en el capítulo anterior. Además hacemos una comparación con las teorías PWBA y ECPSSR.

Para la medición de la eficiencia del detector de Si(Li) las películas delgadas soportadas sobre Mylar de los siguientes compuestos Mg, Al, SiO, GaP, CuS<sub>x</sub>, NaCl, KCl, CaF<sub>2</sub>, ScF<sub>3</sub>, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, y Ge se bombardearon con un haz de protones de 0.7 MeV. Solamente las intensidades de las líneas K $\alpha$  detectadas fueron utilizadas. Los factores de corrección F(E,  $\Delta E$ ) dados por la ecuación (3.6) fueron menores al 4%. Las medidas de la eficiencia se muestra en la figura 4.1. También se muestra en la figura el ajuste de la función dada por la ecuación (3.9) ajustada. Los parámetros obtenidos fueron:  $\Omega' = 0.00094 \pm 0.00001$ ,  $\alpha' = 10.6 \pm 0.99$  y  $\beta' = 2.24 \pm 0.093$ .

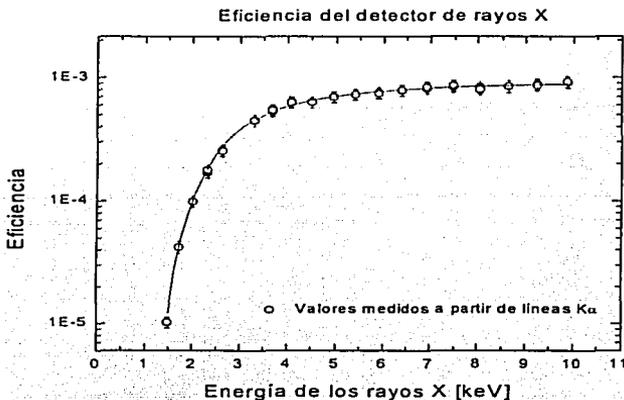


Figura 4.1 Eficiencia del detector de Si(Li) para los rayos X emitidos en la cámara de análisis. Los puntos representan los valores experimentales y la curva continua corresponde al ajuste de la ecuación (3.9).

A partir de las líneas  $K\alpha$  obtenidas antes se determinó la resolución en energía del detector de Si(Li) en términos del FWHM y la energía de los fotones. Estas resoluciones se muestran en la figura 4.2 junto con la recta ajustada de acuerdo con la ecuación (3.10). De esta manera el ruido electrónico del detector resulta ser de  $270 \text{ eV} \pm 30 \text{ eV}$  y un factor de Fano de  $0.090 \pm 0.008$ . Con estas resoluciones del detector en función de la energía se procedió a tomarlas como base para la deconvolución de los espectros de rayos X M que se obtuvieron posteriormente.

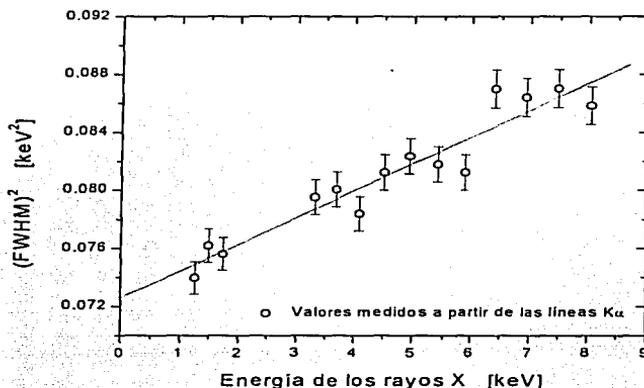


Figura 4.2. Gráfica del cuadrado de la resolución del detector de Si(Li) en función de la energía de las líneas de emisión de rayos X. La resolución se expresa en términos de la anchura del pico de rayos X a la mitad de su altura máxima, FWHM. La línea continua corresponde al ajuste de la ecuación (3.10).

#### 4.2 Resultados de las secciones de producción de rayos X M.

Se midieron las secciones de producción de rayos X M para los elementos  $^{79}\text{W}$ ,  $^{79}\text{Au}$ ,  $^{82}\text{Pb}$ ,  $^{83}\text{Bi}$ ,  $^{90}\text{Th}$  y  $^{92}\text{U}$  utilizando protones con energías entre 0.3 MeV y 0.7 MeV en pasos de 50 keV bombardeando películas delgadas de  $\text{WO}_3$ , Au, Pb, Bi,  $\text{ThF}_4$  y  $\text{UF}_4$  depositadas sobre Mylar.

Para mostrar como son en general los espectros de rayos X que se obtienen, en la figura 4.3 se da de ejemplo al espectro de rayos X de  $^{79}\text{Au}$  inducido con protones de 0.6 MeV y en la figura 4.4 se amplía la zona de los rayos X M de  $^{79}\text{Au}$ . En esta figura las líneas continuas corresponden a los ajustes del fondo de radiación y de los picos gaussianos para las líneas

más intensas de acuerdo con la ecuación (3.12). La localización de los picos de las líneas de emisión de los rayos X M se efectúa con base en sus respectivas energías de acuerdo con los datos reportados en la tabla de Bearden [1]. En la figura 4.5 se muestra el respectivo espectro de RBS donde el pico de la derecha corresponde al de los protones retrodispersados por el  $^{79}\text{Au}$ . Los dos pequeños escalones que se encuentran a la izquierda del espectro corresponden a los protones retrodispersados por los átomos de  $^8\text{O}$  y  $^{12}\text{C}$  del Mylar que soporta a la película de  $^{79}\text{Au}$ .

En las figuras 4.6 y 4.7 se muestran respectivamente el espectro de rayos X obtenido para  $^{92}\text{U}$  y el de la región de los rayos X M inducidos con protones de 0.7 MeV. El correspondiente espectro de RBS se muestra en la figura 4.8 donde se indican los picos debidos a la retrodispersión de los protones con los átomos de  $^{92}\text{U}$  y de  $^{19}\text{F}$  de la película. Las líneas continuas en la figura 4.7 representan los ajustes realizados para efectuar la deconvolución del espectro. También en esta figura se observa en la extrema izquierda al llamado pico de escape que se origina cuando un detector de Si(Li) se encuentra registrando una intensidad muy grande de rayos X con una energía mayor a 1.84 keV, correspondiente a la energía de ionización de la capa K del silicio [2]. En este caso en particular el pico se debe a los rayos X K del silicio que son generados en el cristal de Si(Li) y que además escapan del mismo cristal al momento de estar detectando la gran intensidad de los rayos X M $\alpha$  del  $^{92}\text{U}$ . Las cuentas de este pico de escape corresponden en realidad al pico M $\alpha$ . Debido a este efecto en el detector de Si(Li), en todos los espectros de rayos X donde se observó la presencia del pico de escape después de su deconvolución se procedió a sumar el número de cuentas del pico de escape con las del pico M $\alpha$ .

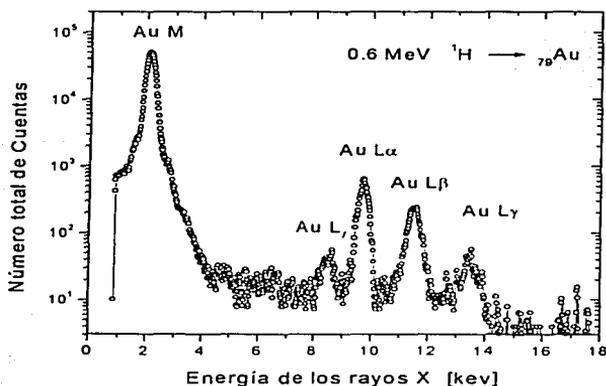
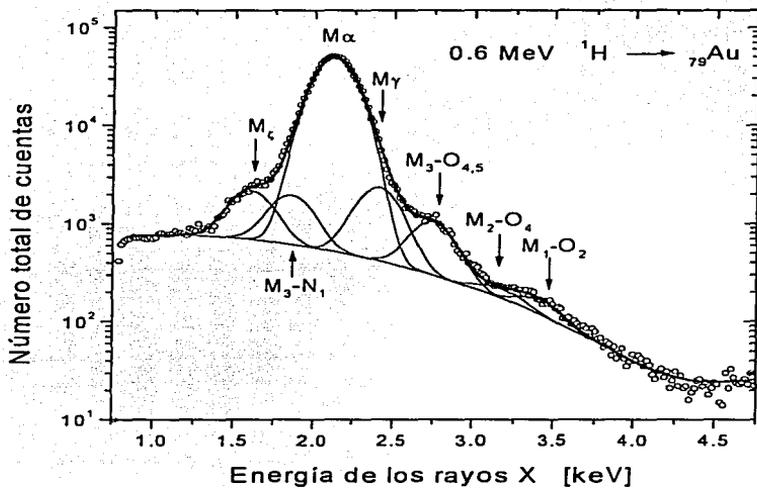


Figura 4.3 Espectro de emisión de rayos X del  $^{79}\text{Au}$  inducidos por protones de 0.6 MeV.



*Figura 4.4 Ampliación de la zona del espectro donde se encuentran los rayos X M del  $^{79}\text{Au}$  inducidos por protones de 0.6 MeV. La deconvolución final del espectro se muestra por medio de las líneas continuas que indican el ajuste realizado para los picos y el fondo de radiación de acuerdo con la ecuación (3.11).*

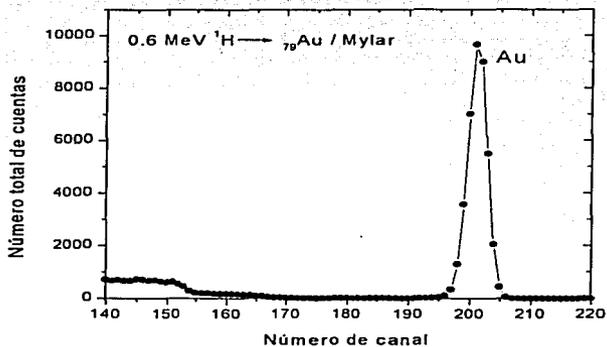


Figura 4.5 Espectro de los protones retrodispersados por la película delgada de  $^{70}\text{Au}$  soportada sobre Mylar al ser bombardeada con protones de 0.6 MeV.

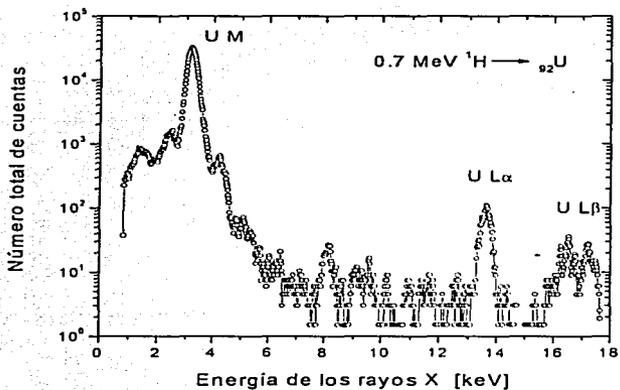


Figura 4.6 Espectro de emisión de rayos X del  $^{92}\text{U}$  inducidos por protones de 0.7 MeV.

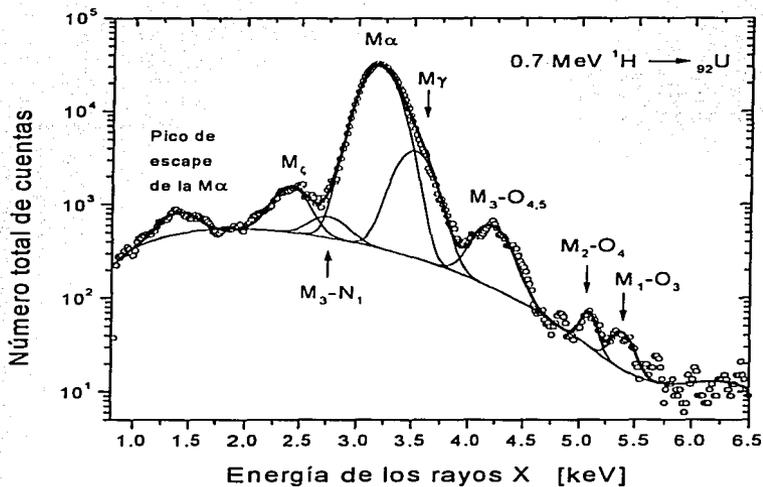


Figura 4.7 Ampliación de la zona del espectro donde se encuentran los rayos X M del  $^{92}\text{U}$  inducidos por protones de 0.7 MeV. La deconvolución final del espectro se muestra por medio de las líneas continuas que indican el ajuste realizado para los picos y el fondo de radiación de acuerdo con la ecuación (3.11).

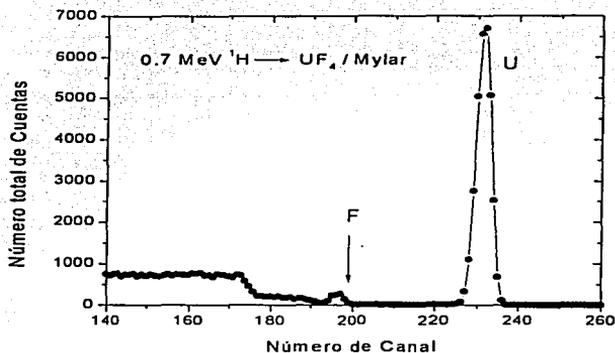


Figura 4.8 Espectro de los protones retrodispersados por la película delgada de  $UF_4$  soportada sobre Mylar al ser bombardeada con protones de 0.7 MeV.

Los cálculos para la obtención de las secciones de cada una de las diferentes líneas de emisión se hicieron a partir de la ecuación (3-11). Para el factor de corrección  $F(E, \Delta E)$  fueron necesarias tres o menos interacciones para que su valor converja a un valor fijo. En la tabla 4.1 se muestran los resultados obtenidos para las secciones de producción de rayos X del  $^{79}W$  correspondientes a las líneas  $M_L$ ,  $M_{\alpha+\beta}$ ,  $M_\gamma$ ,  $M_1-N_3$  y  $M_1-O_{2,3}$ . Las incertidumbres en las medidas se indican en el encabezado de la tabla. Los resultados para las líneas  $M_L$ ,  $M_3-N_1$ ,  $M_{\alpha+\beta}$ ,  $M_\gamma$ ,  $M_3-O_{4,5}$ ,  $M_2-O_4$  y  $M_1-O_2$  de los demás elementos se muestran en la tabla 4.2.

Los resultados experimentales obtenidos se comparan con datos de secciones de rayos X obtenidos a partir de las secciones de ionización teóricas dadas por las teorías PWBA y ECPSSR indicadas en el capítulo 2. Se compara con estas dos teorías por dos motivos: Uno es que para las aplicaciones analíticas como PIXE, son las que pueden calcularse más rápidamente y con la propiedad de que pueden normalizarse de acuerdo con reglas de escalamiento. El segundo se debe a que aunque existen otras teorías, éstas hacen siempre uso en algún momento de parámetros semiempíricos que demeritan el que sea algo totalmente fundamentado en la teoría. También como se ha indicado antes existen pocas medidas experimentales de la inducción de rayos X M con iones como para incorporar parámetros semiempíricos confiables a estas teorías. Los valores teóricos de la PWBA y ECPSSR para las secciones de ionización los obtenemos utilizando el programa ISICS [3].

Tabla 4.1  
Secciones de producción de rayos X M para protones en  $^{74}\text{W}$ . Las unidades son barns.

Energy [MeV]	$M_{\zeta}$ $\pm 18\%$	$M_{\alpha,\beta}$ $\pm 11\%$	$M_{\gamma}$ $\pm 22\%$	$M_1 - N_3$ $\pm 16\%$	$M_1 - O_{2,3}$ $\pm 18\%$	$M_{\text{total}}$ $\pm 13\%$
0.70	87	655	45	4.8	0.37	792
0.65	78	590	40	3.8	0.29	712
0.60	73	527	36	3.0	0.22	638
0.55	66	465	32	2.4	0.16	565
0.50	58	406	26	1.9	0.11	492
0.45	40	357	19	1.4	0.075	418
0.40	33	275	15	1.1	0.047	324
0.35	25	213	11	0.86	0.021	250
0.30	20	167	8.9	0.68	0.016	196

Para obtener las secciones teóricas de producción de rayos X de cada capa atómica M a partir de las secciones de ionización se recurre a las ecuaciones (2.6) a (2.12). Los valores de las fluorescencias  $\omega_i$ , de las transiciones no radiativas  $S_{ij}$  y de las razones de emisión  $\Gamma_{ij}/\Gamma_i$  para las transiciones a capas M se obtienen a partir de los valores calculados por Chen y Crasemann [4, 5, 6]. Estos valores teóricos están calculados utilizando funciones de onda relativistas en la aproximación de Dirac-Hartree-Slater. Existen otros valores calculados por otros autores pero fueron utilizados los anteriores porque son los únicos que calculan los tres parámetros  $\omega_i$ ,  $S_{ij}$  y  $\Gamma_{ij}/\Gamma_i$  utilizando el mismo modelo.

En las figuras 4.9 a 4.14 se muestran graficados los resultados obtenidos para las secciones de producción de rayos X totales para los elementos estudiados. Estos resultados se comparan con los resultados reportados por otros autores: Bush et al. [7], Sarkar et al. [8], Mehta et al. [9], Castro Faria et al. [10], Gressett et al. [11], Jesús et al. [12], Bienkowski et al. [13], Pajek et al. [14] y Cipolla [15].

En las figuras 4.15 a 4.20 se muestran graficados los resultados obtenidos para las diferentes líneas de emisión de rayos X M que fueron ajustadas. Los cálculos teóricos utilizando la PWBA se indican con líneas punteadas y con líneas continuas los de la ECPSSR.

Tabla 4.2

Secciones de producción de rayos X M inducidos con protones. Las unidades son barns.

Blanco	Energía [MeV]	$M_{\zeta}$ $\pm 12\%$	$M_{\beta} - N_1$ $\pm 20\%$	$M_{\alpha,\beta}$ $\pm 9\%$	$M_{\gamma}$ $\pm 15\%$	$M_{\beta} - O_{4,5}$ $\pm 12\%$	$M_{\text{total}}$ $\pm 10\%$
$^{79}\text{Au}$	0.70	64	7.4	448	14.2	2.3	536
	0.65	59	6.2	404	12.8	1.9	484
	0.60	43	5.4	331	11.2	1.5	392
	0.55	40	4.3	307	10.7	1.2	363
	0.50	27	2.8	268	7.8	0.80	307
	0.45	23	2.3	213	6.4	0.60	245
	0.40	20	1.9	188	4.2	0.49	214
	0.35	15	1.2	152	3.1	0.36	172
	0.30	9.4	0.99	116	2.4	0.21	129
$^{82}\text{Pb}$	0.70	55	5.0	323	11.0	1.9	396
	0.65	51	3.9	302	8.8	1.4	366
	0.60	40	2.7	250	7.9	1.4	302
	0.55	32	2.2	219	6.7	1.1	261
	0.50	26	2.0	186	5.1	0.85	221
	0.45	22	1.4	152	4.3	0.64	181
	0.40	16	0.90	123	3.3	0.52	144
	0.35	13	0.77	99	2.3	0.39	115
	0.30	8.5	0.56	70	1.2	0.26	81
$^{83}\text{Bi}$	0.70	39	4.1	295	9.9	1.7	350
	0.65	37	3.5	262	8.1	1.3	312
	0.60	31	2.6	221	6.3	1.1	262
	0.55	28	2.3	196	5.6	0.85	232
	0.50	20	1.5	153	5.1	0.70	180
	0.45	15	1.2	128	4.0	0.57	149
	0.40	13	0.99	103	2.7	0.44	120
	0.35	11	0.51	86	2.3	0.35	100
	0.30	7.2	0.37	64	1.8	0.20	74
$^{90}\text{Th}$	0.70	11	2.6	159	4.8	1.02	179
	0.65	11	2.0	143	4.7	0.94	161
	0.60	9.4	1.8	123	4.1	0.78	139
	0.55	8.4	1.2	111	3.2	0.69	124
	0.50	6.5	1.1	90	2.2	0.55	101
	0.45	5.0	0.95	73	2.0	0.46	82
	0.40	3.5	0.70	60	1.6	0.39	66
	0.35	2.6	0.50	46	0.86	0.28	50
	0.30	1.5	0.25	32	0.44	0.17	34

Tabla 4.2 (continuación).

Secciones de producción de rayos X M inducidos con protones. Las unidades son barns.

Blanco	Energía [MeV]	$M_{\zeta}$ $\pm 12\%$	$M_{\beta} - N_1$ $\pm 20\%$	$M_{\alpha,\beta}$ $\pm 9\%$	$M_{\gamma}$ $\pm 15\%$	$M_{\beta} - O_{4,5}$ $\pm 12\%$	$M_{total}$ $\pm 10\%$
${}_{92}\text{U}$	0.70	10.5	2.3	136	4.4	0.92	154
	0.65	9.9	2.1	120	3.4	0.71	136
	0.60	9.0	2.0	104	2.8	0.55	118
	0.55	7.2	1.5	91	2.6	0.42	103
	0.50	6.3	1.0	77	2.1	0.39	86
	0.45	4.5	0.70	60	1.7	0.26	67
	0.40	3.8	0.63	46	1.2	0.22	52
	0.35	2.4	0.51	36	1.1	0.16	40
	0.30	1.4	0.41	23	0.71	0.10	26

Para poder comparar de una mejor forma todos los resultados obtenidos experimentalmente con la teoría ECPSSR hacemos un escalamiento con ayuda de la velocidad reducida  $\xi_M$  promedio para la capa M dada como:

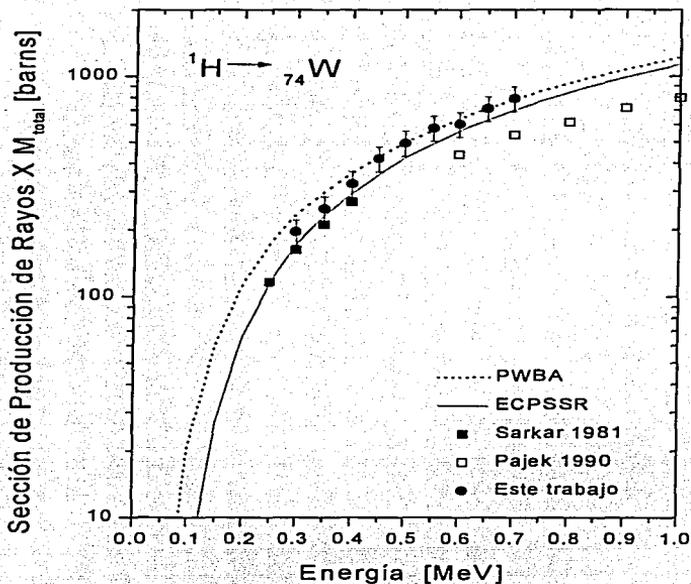
$$\xi_M = (\xi_{M1} + \xi_{M2} + 2\xi_{M3} + 2\xi_{M4} + 3\xi_{M5}) / 9 \quad (4.1)$$

donde las  $\xi_{Mi}$  están dadas por la ecuación (2-13). En la figura 4.21 se muestran los cocientes  $\sigma_M / \sigma_{ECPSSR}$  correspondientes a las secciones medidas experimentalmente entre su respectivo valor teórico como función de  $\xi_M$ .

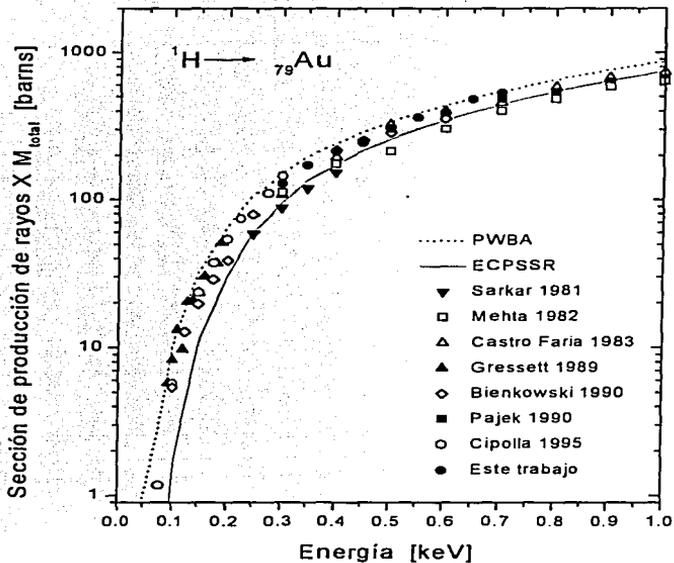
De esta última figura podemos ver que los valores medidos para la sección  $M_{total}$  se encuentran considerablemente dispersos y que el valor promedio de la sección eficaz es un 12% mayor que el predicho por la teoría ECPSSR, aunque para los elementos más pesados ( ${}_{90}\text{Th}$  y  ${}_{92}\text{U}$ ) la desviación es de hasta un 35% para las velocidades  $\xi_M$  más bajas.

Para las medidas de  $M_{\alpha}$  también se presenta un comportamiento similar, pero la sección eficaz de los elementos más ligeros es más cercana a la predicción teórica.

Para las otras líneas M los valores medidos experimentalmente son mucho más grandes que los cálculos de la ECPSSR. Para la  $M_{\gamma}$  los valores medidos son 1.7 veces más grandes pero en el caso del  ${}_{74}\text{W}$  la desviación fue cuatro veces mayor. Esta última desviación puede ser originada por la incertidumbre tan grande que hay en los ajustes gaussianos de las líneas  $M_i$  debidos a la pobre resolución del detector utilizado para resolver las líneas de rayos X.



*Figura 4.9 Gráfica de los resultados obtenidos para la sección eficaz total de producción de rayos XM en  $^{74}\text{W}$  inducidos por protones. Estos resultados se comparan con los reportados por otros autores, así como también con los modelos teóricos PWBA y ECPSSR.*



*Figura 4.10 Gráfica de los resultados obtenidos para la sección eficaz total de producción de rayos X M en  $^{79}\text{Au}$  inducidos por protones. Estos resultados se comparan con los reportados por otros autores, así como también con los modelos teóricos PWBA y ECPSSR.*

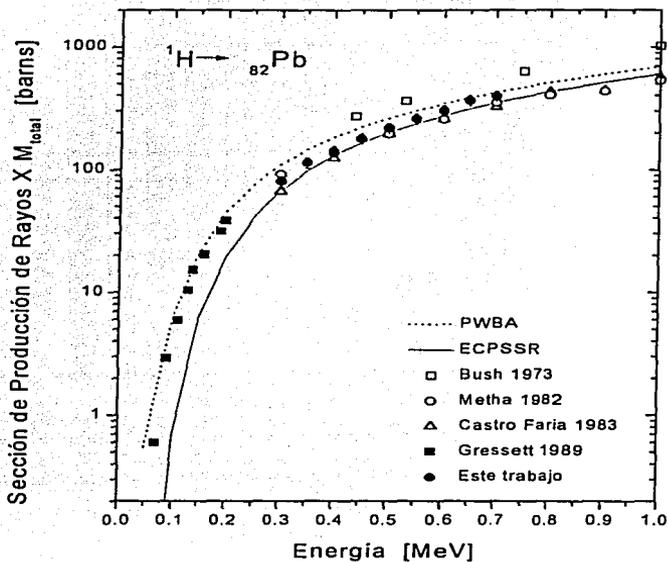


Figura 4.11 Gráfica de los resultados obtenidos para la sección eficaz total de producción de rayos XM en  $^{82}\text{Pb}$  inducidos por protones. Estos resultados se comparan con los reportados por otros autores, así como también con los modelos teóricos PWBA y ECPSSR.

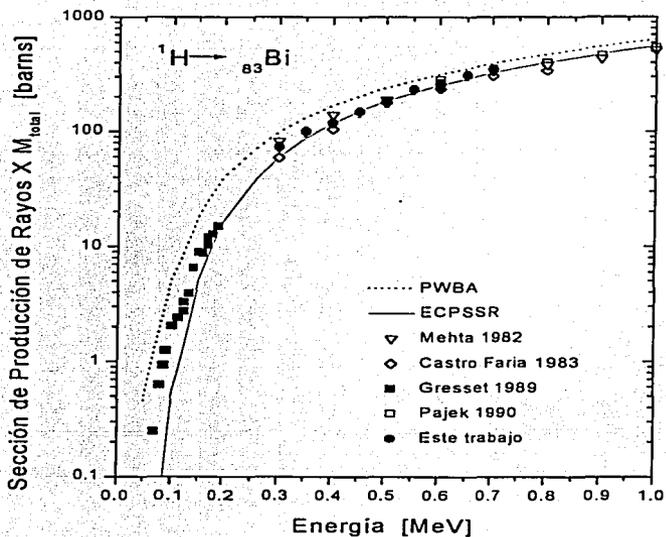
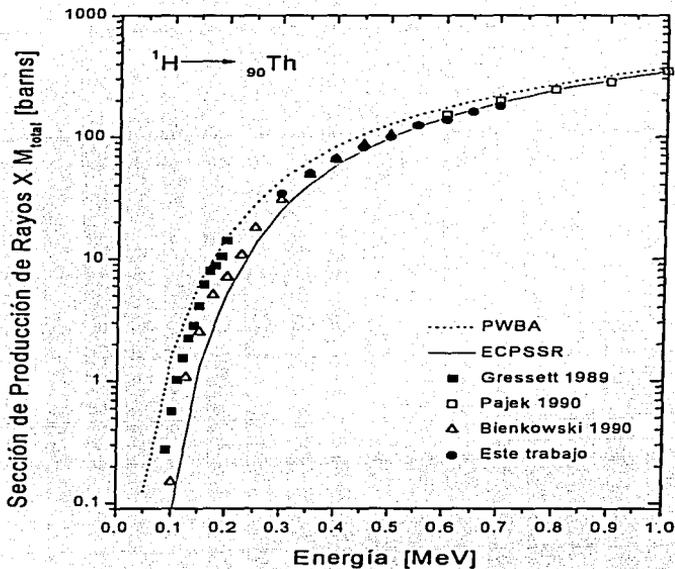
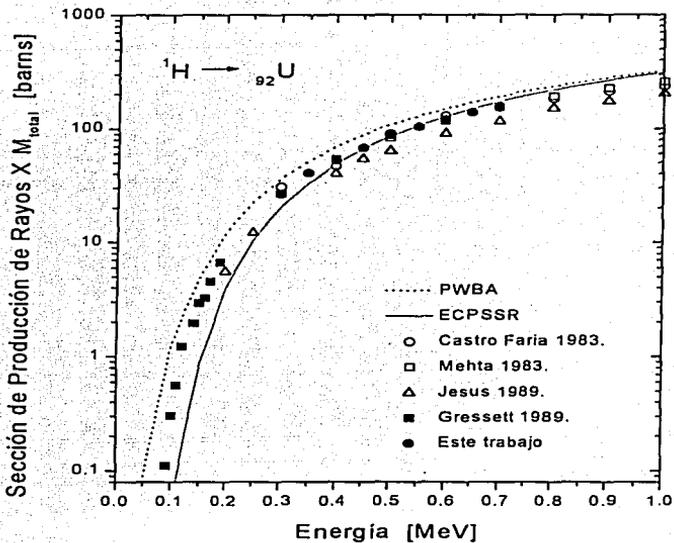


Figura 4.12 Gráfica de los resultados obtenidos para la sección eficaz total de producción de rayos X M en  ${}_{83}\text{Bi}$  inducidos por protones. Estos resultados se comparan con los reportados por otros autores, así como también con los modelos teóricos PWBA y ECPSSR.



*Figura 4.13 Gráfica de los resultados obtenidos para la sección eficaz total de producción de rayos X M en  ${}_{90}\text{Th}$  inducidos por protones. Estos resultados se comparan con los reportados por otros autores, así como también con los modelos teóricos PWBA y ECPSSR.*



*Figura 4.14 Gráfica de los resultados obtenidos para la sección eficaz total de producción de rayos XM en  $^{92}\text{U}$  inducidos por protones. Estos resultados se comparan con los reportados por otros autores, así como también con los modelos teóricos PWBA y ECPSSR..*

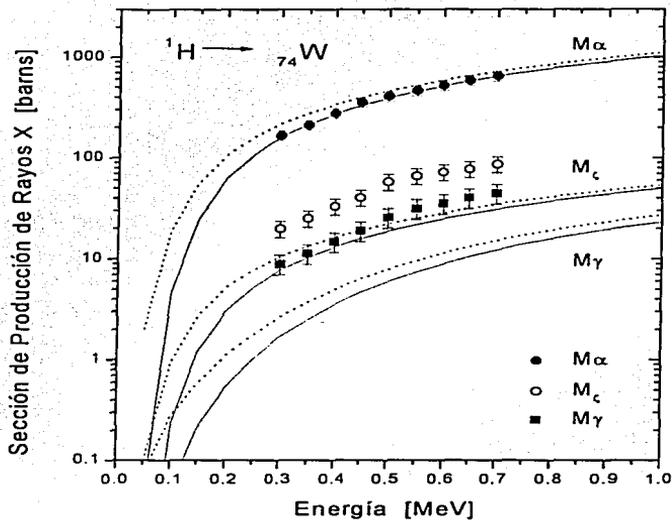


Figura 4.15 Secciones eficaces de producción de rayos X inducidas por protones medidas en este trabajo para las líneas de emisión  $M\alpha$ ,  $M_c$  y  $M_\gamma$  del  $^{74}\text{W}$ . Las líneas punteadas corresponden a las predicciones de la teoría PWBA y las líneas continuas a las predicciones de la teoría ECPSSR.

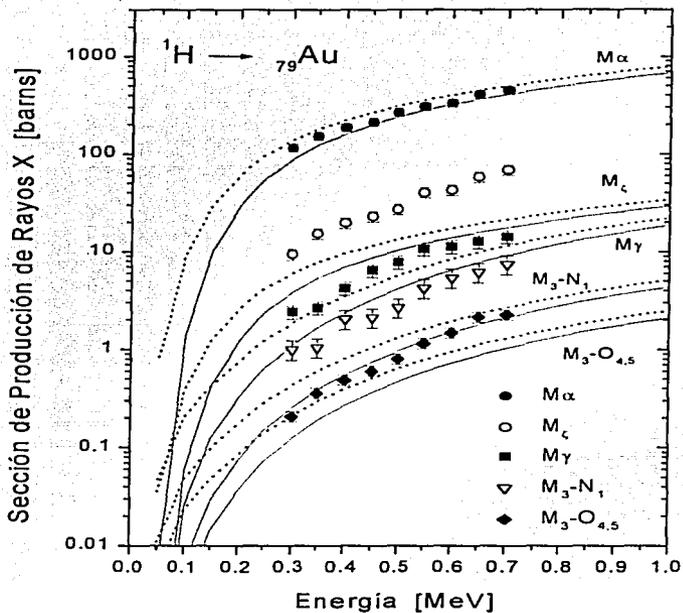


Figura 4.16 Secciones eficaces de producción de rayos X inducidas por protones medidas en este trabajo para las líneas de emisión  $M_\alpha$ ,  $M_\zeta$ ,  $M_\gamma$ ,  $M_3-N_1$  y  $M_3-O_{4.5}$  del  ${}_{79}\text{Au}$ . Las líneas punteadas corresponden a las predicciones de la teoría PWBA y las líneas continuas a las predicciones de la teoría ECPSSR.

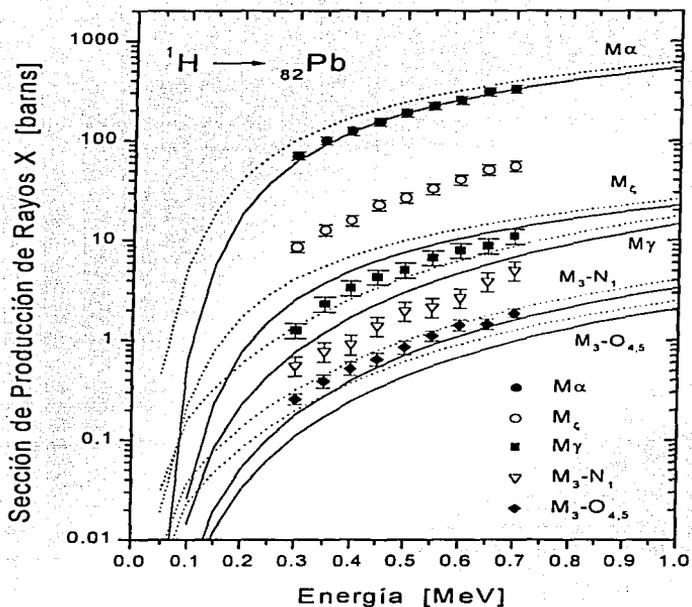
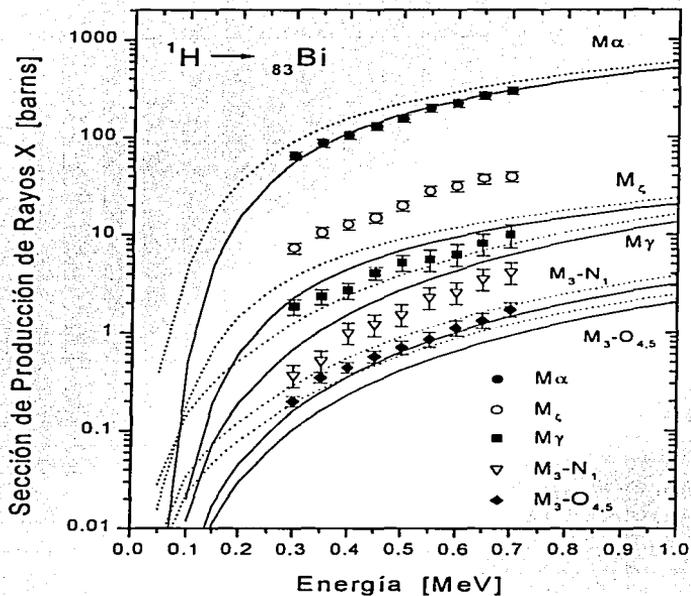


Figura 4.17 Secciones eficaces de producción de rayos X inducidas por protones medidas en este trabajo para las líneas de emisión  $M\alpha$ ,  $M\zeta$ ,  $M\gamma$ ,  $M_3-N_1$  y  $M_3-O_{4,5}$  del  $^{82}\text{Pb}$ . Las líneas punteadas corresponden a las predicciones de la teoría PWBA y las líneas continuas a las predicciones de la teoría ECPSSR..

ESTA TESIS NO SALE  
DE LA BIBLIOTECA



*Figura 4.18 Secciones eficaces de producción de rayos X inducidas por protones medidas en este trabajo para las líneas de emisión  $M\alpha$ ,  $M\zeta$ ,  $M\gamma$ ,  $M_3-N_1$  y  $M_3-O_{4.5}$  del  ${}_{83}\text{Bi}$ . Las líneas punteadas corresponden a las predicciones de la teoría PWBA y las líneas continuas a las predicciones de la teoría ECPSSR..*

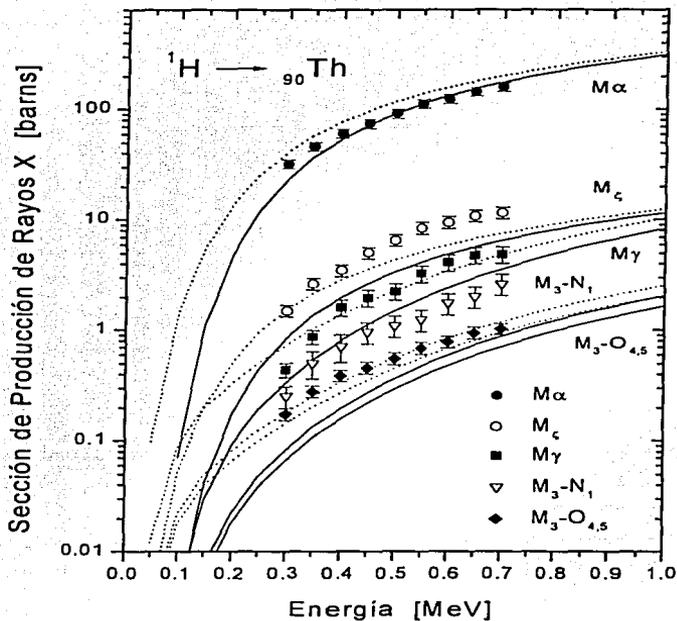
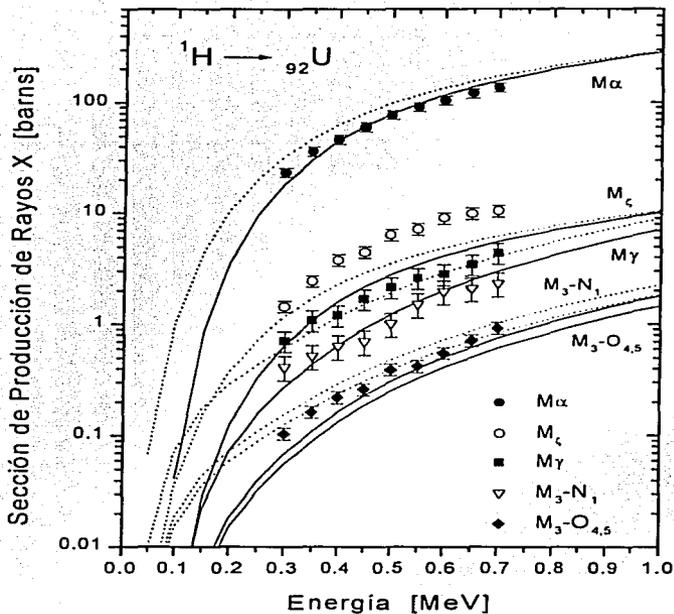


Figura 4.19 Secciones eficaces de producción de rayos X inducidas por protones medidas en este trabajo para las líneas de emisión  $M\alpha$ ,  $M_c$ ,  $M\gamma$ ,  $M_3-N_1$  y  $M_3-O_{4.5}$  del  ${}_{90}\text{Th}$ . Las líneas punteadas corresponden a las predicciones de la teoría PWBA y las líneas continuas a las predicciones de la teoría ECPSSR.



*Figura 4.20 Secciones eficaces de producción de rayos X inducidas por protones medidas en este trabajo para las líneas de emisión  $M_{\alpha}$ ,  $M_{\zeta}$ ,  $M_{\gamma}$ ,  $M_{3-N_1}$  y  $M_{3-O_{4,5}}$  del  ${}_{92}\text{U}$ . Las líneas punteadas corresponden a las predicciones de la teoría PWBA y las líneas continuas a las predicciones de la teoría ECPSSR.*

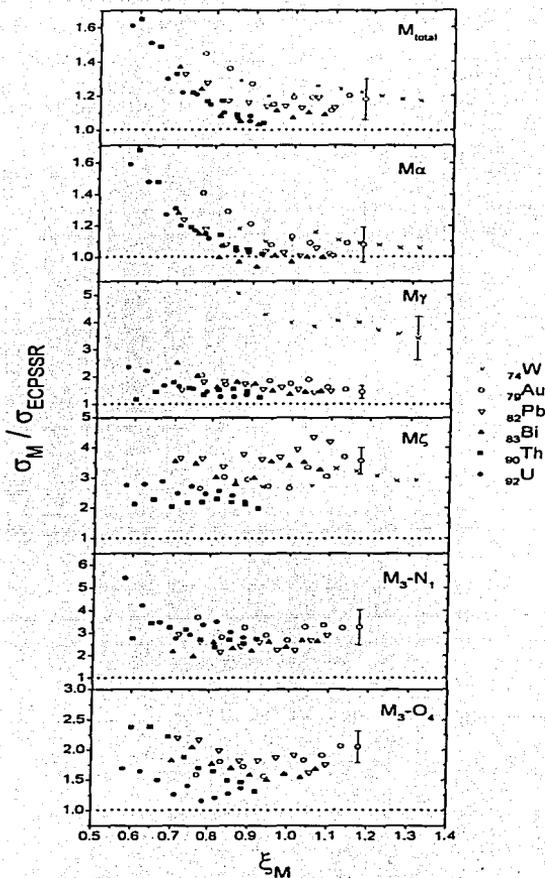


Figura 4.21 Cocientes de las secciones medidas experimentalmente entre su valor teórico ECPSR en función de la velocidad reducida  $\xi_M$  para cada una de las líneas de emisión.

De la figura 4.21 podemos ver que las secciones para la  $M_2$  las secciones forman dos grupos. Uno que comprende a los elementos  ${}_{90}\text{Th}$  y  ${}_{92}\text{U}$  que presentan una desviación promedio con respecto a la ECPSSR de cerca de 100%. El segundo grupo está compuesto por los otros elementos estudiados los cuales presentan una dispersión mayor que es 3 veces más grande que la teoría.

En el caso de las líneas  $M_3-N_1$  y  $M_3-O_4$  la desviación promedio de los valores experimentales es alrededor de 1.8 a 3 veces mayor que los valores teóricos. El  ${}_{92}\text{U}$  es el que presenta los valores más alejados para la  $M_3-N_1$  a velocidades  $\xi_M$  menores que 0.65.

### 4.3 Discusión de los resultados y conclusiones

En este trabajo se efectuaron medidas experimentales para las secciones de producción de rayos X M correspondientes a las líneas de emisión más intensas de los elementos  ${}_{74}\text{W}$ ,  ${}_{79}\text{Au}$ ,  ${}_{82}\text{Pb}$ ,  ${}_{83}\text{Bi}$ ,  ${}_{90}\text{Th}$  y  ${}_{92}\text{U}$  inducidos por impacto de protones a energías entre 0.3 MeV y 0.7 MeV.

Las medidas obtenidas para las secciones totales de producción de rayos X M se compararon con los resultados reportados por otros autores en el rango de energía de impacto de protones de cero a 1 MeV (ver figuras 4.9 a 4.14). Para este rango de energía se observa que solamente han sido publicados nueve artículos con secciones experimentales para los mismos elementos químicos considerados en este trabajo (referencias [7] a [15]). Estos nueve trabajos dan un número total de 195 medidas experimentales. El elemento más estudiado ha sido el  ${}_{79}\text{Au}$  con un total de 59 medidas, seguido del  ${}_{93}\text{Bi}$  con 37 datos. El que menos ha sido estudiado de los seis elementos considerados en este trabajo es el  ${}_{74}\text{W}$  con 9 valores reportados. En el caso de los otros elementos tenemos que son 26 datos para el  ${}_{82}\text{Pb}$ , 29 datos para el  ${}_{90}\text{Th}$  y 35 datos para el  ${}_{92}\text{U}$ . Existen otros resultados experimentales publicados para otros elementos químicos con  $Z > 70$ , pero éstos son en total menos de 40 medidas.

Por otro lado, en este trabajo se efectuó la medición de un total de 54 secciones totales de producción de rayos X M inducidos por protones con energías menores a 1 MeV. Siendo 9 medidas para cada elemento. De esta manera un aporte importante de esta tesis es que se está contribuyendo con el 22% de las medidas que existen en la actualidad para los seis elementos considerados en este rango de energías. Las medidas realizadas próximamente aparecerán publicadas [16].

Como se puede apreciar de las figuras 4.9 a 4.14, tenemos que las medidas reportadas, incluyendo las de este trabajo, presentan entre ellas una dispersión que en algunos casos llegan a ser de más del 50%. Esta dispersión resulta ser un inconveniente si se piensa en utilizar estos datos para obtener ajustes de funciones semiempíricas exactas para las secciones de producción de rayos X. En las medidas del  ${}_{74}\text{W}$  encontramos que los valores obtenidos en este trabajo son mucho mayores (- 60%) a los reportados en los dos trabajos

de las referencias [8] y [13]. Para los otros elementos estudiados se observa que las medidas obtenidas se encuentran un poco arriba del promedio.

Con los datos experimentales existentes para las secciones de producción de rayos X M por impacto con protones es posible ajustar funciones semiempíricas a estas secciones para cada elemento, pero no será posible tener funciones con una buena exactitud debido a la dispersión que presentan estos datos. Podemos llegar a concluir en este caso, que hay que esperar a que sean reportadas más medidas de estas secciones eficaces a energías menores de 1 MeV para poder tener funciones semiempíricas mucho más exactas que puedan llegar a ser consideradas como de referencia.

En términos generales, todas las medidas en conjunto para energías de los protones de más de 0.5 MeV muestran en promedio un ajuste con la teoría ECPSSR, (ver figuras 4.9 a 4.14). Para protones de menores energías las medidas en promedio se encuentran entre la teoría PWBA y la ECPSSR. Esto apunta a que para tener una mejor descripción de este fenómeno es necesario incluir en la aproximación ECPSSR algún nuevo tipo de corrección que incremente la sección de ionización para protones de energías menores a 0.5 MeV.

En este trabajo también se hizo la determinación de los valores de las secciones de producción de rayos X para las líneas más intensas que componen a los rayos X M de los elementos químicos estudiados, (ver figuras 4.15 a 4.20). El número de trabajos publicados en los cuales se hace este análisis para estos elementos es solamente 2, (ver referencias [14] y [15]). El inconveniente de estos dos trabajos es que no presentan directamente sus resultados experimentales para cada una de las líneas de emisión, sino que reportan como datos finales a las secciones de ionización de las diferentes capas atómicas M.

Los resultados obtenidos y mostrados en las figuras 4.15 a 4.20 nos indican, con excepción de las medidas de la línea  $M\alpha$ , que todas los valores resultan ser mucho mayores que sus correspondientes predicciones con las teorías PWBA y ECPSSR. El origen de esta discrepancia no está claro del todo. Un posible origen es que como son picos mucho menos intensos que el de la  $M\alpha$  vamos a tener que el proceso de deconvolución juega un papel muy importante. Este proceso puede llegar a producir una incerteza que puede llegar a ser de hasta un 20%. Pero es claro, que esta incertidumbre no puede ser la que de origen a las grandes diferencias observadas con los modelos teóricos.

Para poder tener una mejor idea del comportamiento de todas las medidas de las secciones de producción de rayos X para cada línea de emisión se procede a normalizarlas todas juntas con respecto a la velocidad reducida  $\xi_M$  y así poder tener conjuntos de 54 medidas que ofrecen una mejor visión estadística. Estos conjuntos de medidas se muestran comparadas con respecto a la aproximación ECPSSR en la figura 4.21. En general los resultados obtenidos indican que en este caso para protones con energías en el intervalo considerado la teoría ECPSSR subestima el valor experimental de las secciones de producción de rayos X M, tal como se menciona en la sección anterior. En el caso de las líneas  $M_{total}$  y  $M\alpha, \beta$  los correspondientes valores medidos resultaron ser mayores que los predichos por la ECPSSR pero menores que los calculados con la aproximación PWBA. Además se observa que estas secciones la diferencia con la ECPSSR es más notable para

elementos ligeros que para los pesados. Pero en general la desviación con la ECPSSR aumenta para valores pequeños de  $\xi_M$  en todos los elementos estudiados. La desviación más grande con esta teoría se encuentra en el caso de las líneas  $M_{\zeta}$  y  $M_{\lambda-N_1}$ .

Así también se puede concluir que es necesario esperar a que sean reportadas más medidas de estas secciones de producción de rayos X M por incidencia de protones para tener más información que nos permita intentar explicar de una mejor manera el porque de las dispersiones tan grandes entre la teoría y los experimentos para las secciones de las diversas líneas de emisión M.

#### Referencias.

- [1] J.A. Bearden, Review of Modern Physics, 39 (1967) 78.
- [2] G.F. Knoll, Radiation detection and measurement, John Wiley & Sons, New York, 1979.
- [3] Z. Liu and S.J. Cipolla, Computer Physics Communications 97 (1996) 315.
- [4] M.H. Chen and B Crasemann, Physical Review A 21 (1980) 346.
- [5] M.H. Chen and B Crasemann, Physical Review A 27 (1983) 2989.
- [6] M.H. Chen and B Crasemann, Physical Review A 30 (1984) 170.
- [7] C.E. Bush, A.B. Baskin, P.H. Nettles and S.M. Shafroth, Physical Review A 7 (1973) 1601.
- [8] M. Sarkar, H. Mommsen, W. Sarter and P. Schurkes, Journal of Physics B 14 (1981) 3163.
- [9] R. Mehta, J.L. Duggan, J.L. Price and F.D. McDaniel, Physical Review A 26 (1982) 1883.
- [10] N.V. de Castro Faria, F.L. Freire, Jr., A.G. de Pinho, and E.F. da Silveira, Physical Review A 28 (1983) 2770.
- [11] J.D. Gressett, D.K. Marble, F.D. McDaniel, J.L. Duggan and J.F. Culwell, and G. Lapicki, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 40/41 (1989) 116.
- [12] A.P. Jesus and J.P. Ribeiro, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 280 (1989) 370.
- [13] A. Bienkowski, J. Braziewicz, T. Czyzewski, L. Glowacka, M. Jaskola, G. Lapicki and M. Pajek, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 49 (1990) 19.
- [14] M. Pajek, A.P. Kobzev, R. Sandrik, A.V. Skrypnik, R.A. Ilkhamov, S.H. Khumurodov, G. Lapicki, Physical Review A 42 (1990) 261.
- [15] S.J. Cipolla, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 99 (1995) 22.
- [16] L. Rodríguez-Fernández, J. Miranda, J.L. Ruvalcaba-Sil, E. Segundo, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, (2002), En Prensa.