



UNIVERSIDAD NACIONAL DE MEXICO



......

FACULTAD DE CIENCIAS

# CARACTERIZACION DE DETECTORES DE ESTADO SOLIDO PARA RAYOS X

| Т    |    | Ε    | S       |  |      | •      |     | S   |  |
|------|----|------|---------|--|------|--------|-----|-----|--|
| QUE  | PA | RA   | OBTENER |  | ΕL   | TITULO |     | DE: |  |
| F    | I  |      | S       |  | ı c  |        | 0   |     |  |
| Ρ    | RE |      | SE      |  | N    | т      | Α   | A : |  |
| JUAN |    | GERA | ARDO (  |  | ANAD | os     | GAL | VEZ |  |

DIRECTOR DE TESIS: DR. LUIS RODRIGUEZ FERNANDEZ



2003







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



Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en tormato electrónico e impreso el contenido de mi trabalo recepcional. NGMERE: U.G.M. CLETORY DO ELECHA: OL for personal FECHA: OL for personal 2003

## DRA. MARÍA DE LOURDES ESTEVA PERALTA Jefa de la División de Estudios Profesionales de la Facultad de Ciencias Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito: "Caracterización de detectores de estado sólido para rayos X"

realizado por Granados Gálvez Juan Gerardo

con número de cuenta 08652166-2 , quien cubrió los créditos de la carrera de: Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

| Director de<br>Propietario |  |
|----------------------------|--|
| Propietario                | Dr. Luis Rodríguez Fernández                                     |
| Propietario                | Dra. Beatriz Elizabeth Fuentes Madariaga Beatry E. Guentos M.    |
|                            | Dra. María Isabel Gamboa de Buen appl                            |
| Suplente                   | Dr. José Rubén Alfaro Molina                                     |
| Suplente                   | Dra. María del Pilar Constanza Ortega Bernal Ma de Cil. ( Sta, M |

Consejo Departamental de F odula

DRA. PATRICIA GALOSTEIN PREMACUED. CIENCIAS Coordinadora de Licenciaturatamento de fisica

- Te quiero mucho papá.
- Yo también hijita.
- ¿Hasta donde papá?
- Hasta el infinito, Chaparra.
- Yo de aquí a Sahuayo que está más lejos.
- No hijita, el infinito está más lejos.
- No papá, el infinito no existe y Sahuayo sí.

A mi hija Geraldine quien me ha hecho dudar hasta de las cosas más sencillas y tomado del corazón me ha llevado a los mejores lugares de la vida, a ella que hace cinco años llegó y me cambió para s iempre, a ese pequeño cuerpo color rosa que vino a este mundo entre jalones y llanto, y lo primero que hizo fue mirarme y llorar -espero que lo primero no haya sido causa de lo segundo-, quien después de los cuidados necesarios y las limpiezas obligadas, acomodó su cuerpo entre mis brazos y sus ojos en mi cara, tomó mi pulgar con su manita como quien reclama propiedades, y desde entonces me tiene endosado a su nombre, a esa vocecita que canta en otras lenguas y me da paz, amor y un número casi infinito de besos, quien me ha dejado más que claro la importancia de las palabras, lo necesario de estar cerca, lo inaplazable de los actos y lo efimero del tiempo. A quien me dio motivos y fuerzas para ser mejor y merecer estar a su lado, a esa pequeñita que solo amor despierta y que me explica las cosas importantes de este mundo, a esa voz dulce y suave que en las madrugadas reclama que la abrace, a esos dedos tiernos y pequeños que cuando me toman de la mano me conducen por el camino correcto, y me hacen agradecer al sol y al viento el milagro de estar juntos, a mi pequeña maestra que me ha enseñado tantas cosas desde aquel día que clavó sus ojos en los míos, y al apretar mi pulgar acepté el compromiso de adorarla. A mi maestra, mi niña, mi princesa, a mi amiguita de cinco años. A mi pequeña Geraldine.

Te amo Chaparra.

A mis padres Luis y María a quienes les debo todo.

A mis hermanos: Esperanza, Teresa, Santiago, Luis, Salvador, María de Jesús, Sandra y Julio, de quienes siempre he recibido apoyo, respeto y cariño.

A mis otros hermanos: Memo, Yola, Canito y Rebe, ejemplos de lucha y esperanza.

A todos mis sobrinos, ustedes saben cuanto los quiero.

A mi amigo y director de tesis el Dr. Luis Rodríguez Fernández, gracias por todas las horas de trabajo, de apoyo y de explicaciones, muchas veces a consta de su propia salud. Sin su ayuda y su guía, esta tesis no sería posible.

A mis sinodales: Dra. Alicia María Oliver Gutiérrez, Dra. Beatriz Elizabeth Fuentes Madariaga, Dra. María Isabel Gamboa de Buen, Dra. María del Pilar Constanza Ortega Bernal, Dr. José Rubén Alfaro Molina, Dr. José Luis Ruvalcaba Sil, a quienes les agradezco sus observaciones, comentarios, sugerencia y correcciones, gracias por una revisión tan detallada y por todo el tiempo empleado en ello.

Al mi amigo el Dr. José Luis Ruvalcaba Sil por todo su apoyo y sus comentarios.

A mi amigo el M. en C. Juan Gabriel Morales Morales por todo su apoyo.

A todos mis amigos que no nombro por temor de olvidar a alguno.

### Agradecimientos

A mi asesor, Luis Rodríguez Fernández, por su apoyo y paciencia para la realización de este trabajo.

A los sinodales: Dra. Beatriz Elizabeth Fuentes Madariaga Dra. María Isabel Gamboa de Buen Dr. José Rubén Alfaro Molina Dra. María del Pilar Constanza Ortega Bernal por revisar este trabajo así como por todas sus correcciones y comentarios al mismo.

Al Instituto de Física de la UNAM por las facilidades otorgadas para la realización de este trabajo en sus instalaciones.

Al proyecto CONACYT G35465-E por su apoyo económico para la compra de un detector de rayos X.

Al proyecto PAPIIT IN102500 por su apoyo económico para la adquisición de blancos y materiales diversos requeridos durante este trabajo.

Al Dr. José Luis Ruvalcaba Sil por todo su apoyo y consejos para la realización de este trabajo.

Al Sr. Karim Uriel López Guzmán y al Sr. Francisco Javier Jaimes Beristain por su ayuda en la operación del Acelerador Peletrón del Instituto de Física de la UNAM.

Al Fis. Juan Carlos Pineda por toda su valiosa colaboración en el manejo de los detectores y fuentes radiactivas.

Al M. en C. Juan Gabriel Morales Morales por su ayuda para la preparación de blancos y montaje de muestras para irradiar.

T-5

# Índice

## INTRODUCCIÓN

| CAPÍTULO 1, LA RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA   |                |
|---|----------------|
| 1.1 Radiación electromagnética.   | 1-1-1          |
| 1.2 Descripción clásica de la radiación electromagnética.                             | 1-2            |
| 1.3 Aspectos elementales de la descripción cuántica de la radiación electromagnética. | 1-6            |
| 1.4 Fuentes de rayos X y gammas.  | 1-10           |
| 1.4.1 Rayos X característicos.  | 1-10           |
| 1.4.2 Bremsstrahlung (radiación de frenado),  | 1-15           |
| 1.4.3 Radiación de sincrotrón.  | 1-15           |
| 1.4.4 Emisión por decaimientos radiactivos.   | 1-15           |
| 1.4.5 Emisión por reacciones nucleares.   | 1-16           |
| 1.4.6 Procesos de aniquilación  | 1-16           |
| Referencias   | 1-17           |
| - 「「「「」」「「」」」、「」」、「」」、「」」、「」」、「」」、「」、「」、「」  | 1.1            |
| CAPÍTULO 2, INTERACCIÓN DE LOS RAYOS X Y GAMMAS CON LA MATERIA                        |                |
| 2.1 Efecto fotoeléctrico.   | 2-1            |
| 2.2 Dispersión Compton  | 2-2            |
| 2.3 Producción de pares.  | 2-4            |
| 2.4 Dispersión Thomson.   | 2-4            |
| 2.5 Dispersión de Rayleigh.   | 2-7            |
| 2.6 Atenuación.   | 2-8            |
| Referencias   | 2-15           |
| 에는 이번 것에서 이번 사람들은 것을 가지 않는 것이 있는 것이 가지 않는 것이 있는 것이 있는 것이 있는 것이 같이?                    |                |
| CAPÍTULO 3, DETECTORES DE RADIACIÓN   | - 1 <u>(</u> - |
| 3.1 Modelo simplificado de operación.   | 3-1            |
| 3.2 Tratamiento de señales.   | 3-2            |
| 3.2.1 Forma de los pulsos.  | 3-3            |
| 3.2.2 Preamplificación.   | 3-4            |
| 3.2.3 Amplificación.  | 3-5            |
| 3.2.4 Discriminación de pulsos y contadores.  | 3-6            |
| 3.2.5 Conversión de pulsos analógicos a digitales.                                    | 3-7            |
| 3.2.6 Analizador multicanal.  | 3-8            |
| 3.2.7 Estadística de conteo.  | 3-8            |
| 3.2.8 Transmisión de señales.   | 3-9            |
| 3.3 Propiedades generales de los sistemas de detección.                               | 3-9            |
| 3.3.1 Eficiencia de detección.  | 3-9            |
| 3.3.2 Resolución en energía.  | 3-10           |
| 3.3.3 Tiempo muerto.  | 3-12           |
| 3.3.4 Efecto de apilamiento.  | 3-13           |
| 3.3.5 Consideraciones para sistemas de alta resolución.                               | 3-13           |
| 3.4 Detectores de gas y centelladores.  | 3-14           |
| 3.4.1 Detectores de gas.  | 3-14           |
| 3.4.2 Centelladores.  | 3-16           |
| 3.5 Detectores semiconductores.   | 3-17           |
| 3.5.1 Propiedades de los semiconductores.   | 3-17           |
| 3,5.2 Efectos de la radiación en un semiconductor.                                    | 3-20           |
| 3.5.3 Los contactos eléctricos.   | 3-20           |
| 3.5.4 Configuración de los detectores semiconductores.                                | 3-20           |
| 3.5.4.1 Detectores de junta semiconductora.   | 3-21           |
| 3.5.4.2 Detectores p-i-n.   | 3-22           |

1-1

|   |   | en a substance substance |
|---|---|--------------------------|
|   | 3.5.5 Efectos generales durante la operación de detectores semiconductores.                 | 3-22                     |
|   | 3.5.5.1 Corrientes de luga.   | 3-22                     |
|   | 3.5.5.2 Fuentes de ruido y resolución.  | 3-23                     |
|   | 3.5.5.3 Daño por radiación  | 3-23                     |
| 1 | Referencias.  | 3-24                     |
| 1 | CAPITH 0.4. DETECTORES DE RAYOS X Y SUS PRINCIPALES CARACTERÍSTICAS                         |                          |
| 2 | 4.1 Generalidades   | 4-1                      |
|   | 4 2 Procesos de fabricación   | 4-2                      |
|   | <b>1.2</b> a Finciencia v reculesta   | 4-4                      |
|   | 4 A Determinación experimental de la eficiencia   | 4-8                      |
|   | 4.4.1 Medida de la eficiencia utilizando fuentes radiactivas                                | 4-8                      |
|   | 4.4.2 Métodos por inducción de rayos X en blancos delgados                                  | 4-8                      |
|   | 4.4.2 includes por inducciones agenerales de la inducción de rayos X en blancos delgados    | 4-8                      |
|   | 4 4 2 2 Determinación de la eficiencia utilizando PIXE y RBS                                | 4-10                     |
|   | 4.4.2.3 Determinación de la crictoriola dinzando i nel y rese                               | 4-13                     |
|   | 4.4.3 Internolación de la eficiencia entre valores medidos                                  | 4-15                     |
|   | 4.4. Método de Montenegro   | 4-16                     |
|   | 4.5. Determinación de las consciencies de los detectores de estado sólido nara rayos X      | 4-18                     |
|   | 4.5 1 Linenlidad  | 4-18                     |
|   | 4.5.2 Basolunión en energía   | 4-18                     |
|   | 4.5.2 A noulo sólido y fintores geométricos   | 4-18                     |
| ÷ | A > 1 Angulo sondo y ractores geometricos.  | 4-20                     |
|   | 4.5.3.1 Alta atuva del detector a la ventana de herilio                                     | 4-20                     |
|   | 4.5.3.2 Dependencia del ángulo sólido con la energía del fotón                              | 4-21                     |
|   | 4.5.3.5 Dependencia del anguno sondo con la cinciga del rotori.                             | 4-23                     |
|   | 4.54 Esnegor de la ventana de Re  | 4-23                     |
|   | A 5 F Engeor de la cana de bielo  | 4-24                     |
|   | A 5.6 Espesor de la capa du mieto.  | 4-24                     |
|   | A 57 Benesor de la contacta de oro  | 4-26                     |
|   | 4.5.7 Espesor de la zona activa   | 4-20                     |
|   | 4.5.6 Espesoi de la zona activa.  | 4-28                     |
|   | 4.3.7 Floos de escalec.   | A-31                     |
|   | 4.5.10 Kegion de colección meompleta de carga.  | 4-32                     |
|   | Referencias.  | 4-72                     |
|   |   |                          |
|   | CAPITULO 5, CARACTERIZACIÓN EXPERIMENTAL Y RESULTADOS                                       | 51.                      |
|   | 5.1 Aspectos generates.   | 51                       |
|   | 5.2 Encandad del deletori.  | 5-1                      |
|   | 5.5 Alicia activa del relection.  | 57                       |
|   | 5.4 Distancia dei crista a la ventana de bernio.  | 5 9                      |
|   | 5.5 Resourcion.   | 510                      |
|   | 5.0 Espesor de la capa muera.   | 5 11                     |
|   | 5.7 Espesor de la capa de oro.<br>5.9 Diana de asema  | ə-11<br>5 11             |
|   | 5.0 Ficianzia utilizando fuentes rediastivos  | J-11<br>E 13             |
|   | 5.9 Enciencia utilizando luentes radiacuvas.<br>5.10 Efizianzia utilizando DIVE y DDS       | 5-13                     |
|   | 5.10 Enciencia utilizando PIAE y KB5.<br>5.11 Efisionaia utilizando al mátodo da Montenegro | J-14<br>5 12             |
|   | 5.17 Enciencia utilizando el metodo de Montenegro.  | 5-10                     |
|   | 5.12 Ajustes a la enciencia.  | 5-19                     |
|   | 5.15 Constructions  | 5-19                     |
|   | <b>5.14 Conclusiones.</b>   | 5-21                     |
|   | Kelerencias.  | 5-22                     |

## INTRODUCCIÓN

La espectroscopía de rayos X es de gran importancia en el estudio de fenómenos atómicos relacionados con estudios básicos y aplicados, muchas de las técnicas de análisis de materiales la emplean: Fluorescencia de rayos X, microscopía electrónica y emisión de rayos X inducidos por partículas, todas estas técnicas requieren del uso de detectores de radiación.

Los detectores de estado sólido para rayos X se caracterizan por su capacidad de analizar todo el espectro de radiación simultáneamente, por lo cual son ampliamente utilizados, tienen características y propiedades comunes, pero sus magnitudes o cualidades difieren de un detector a otro, debido a su proceso de fabricación. Sin tomar en cuenta que las propiedades especificadas por el fabricante pueden variar con el tiempo debido a la degradación que va sufriendo el detector.

Para un correcto uso de estos detectores, es necesario determinar la eficiencia del sistema de detección donde se encuentran. En la actualidad para muchas de las nuevas aplicaciones prácticas y experimentos de física atómica es necesario conocer muy bien como es el detector y como es su respuesta [Papp]. Como ejemplos se tiene: la detección de rayos X emitidos en direcciones rasantes a la superficie de una muestra [Lennard], el desplazamiento de las líneas de rayos X al inducirlas por medio de colisiones con iones pesados y a la superposición o traslape de diversas líneas. Por este motivo para poder describir y analizar los espectros de radiación con precisión y obtener la información deseada sin ambigüedades, es necesario el conocimiento de las propiedades del detector, sobretodo para efectuar la deconvolución de los espectros de rayos X obtenidos bajo circunstancias especiales.

En un trabajo previo [Cruz] se muestran diversos procedimientos para efectuar la determinación de la eficiencia de un sistema de detección de rayos X. Sin embargo en éste no se aborda lo relacionado con la determinación de otras propiedades de los detectores.

En esta tesis se plantea una revisión completa de los diversos tipos de detectores de estado sólido que existen para el registro de rayos X, y de sus propiedades más importantes: linealidad y resolución con la energía de la radiación, área y volumen activo, respuesta en la generación y colección de la carga inducida por la radiación, determinación de regiones de buena y mala colección de carga, generación de picos de escape, colas de baja energía, etc. Se detallan los procedimientos para la determinación de la eficiencia de detección en un sistema de análisis, también se revisan los diversos modelos físicos planteados para explicar la respuesta de estos detectores con la radiación.

Con base en el conocimiento de las características propias de los detectores de estado sólido para el registro de rayos X y su respuesta, se proponen procedimientos para determinar experimentalmente las diversas propiedades un detector de este tipo.

Finalmente se hace una caracterización experimental de tres detectores de estado sólido empleados para el registro de rayos X que son utilizados en los aceleradores de partículas del Instituto de Física de la UNAM. Esta caracterización incluye un detector de silicio con litio difundido, Si(Li), un detector de germanio, LEGe, para rayos X, y un detector de silicio con enfriamiento termoeléctrico (efecto Peltier). El detector estudiado más a fondo es el de Si(Li) pues es el que se planea utilizar en el Laboratorio del Acelerador Peletrón del IFUNAM para efectuar estudios de emisión de rayos X a ángulos rasantes a la superficie de la muestra [Rodriguez].

Estos resultados se comparan con las propiedades generales indicadas inicialmente por el fabricante de cada detector. Encontrándose que en algunos casos estas características coinciden y en otros casos han cambiado con el tiempo. Además con estos resultados es posible contribuir a la implementación de nuevas técnicas de análisis por inducción de rayos X en los aceleradores de partículas del IFUNAM, las cuales serán posibles efectuar pues se cuenta con información más completa de los detectores y su respuesta.

También con esta tesis se establece un compendio probado de procedimientos para la caracterización de detectores de estado sólido para rayos X. Ofreciendo de esta manera una guía para efectuar futuras caracterizaciones de estos u otros detectores similares.

En resumen, esta tesis tiene dos aportaciones fundamentales:

1. Ofrecer una guia de procedimientos para efectuar futuras caracterizaciones de este tipo de detectores.

2. A yudar a abrir las puertas para la implementación de nuevas técnicas de análisis por inducción de rayos X, gracias a la caracterización a fondo de los detectores.

La tesis e stá distribuida en cinco capítulos. En el primero s e indican los aspectos básicos de la radiación electromagnética tanto en su descripción clásica como en la cuántica. También ahí se indica como es el proceso de generación de rayos X y gammas.

En el segundo se hace una revisión de los procesos de interacción de la radiación electromagnética con la materia, puesto que los procesos de detección de rayos X y gammas tienen su origen en estas interacciones.

El capítulo tercero ofrece una visión general sobre los detectores de radiación así como de los equipos electrónicos utilizados con mayor frecuencia y que se encuentran a sociados a todo sistema de registro de radiación. En esta visión de los detectores se hace mayor énfasis en los de estado sólido en tanto que para el caso de los detectores de gas y centelladores solamente se dan sus conceptos más generales.

En el cuarto se presenta una descripción detallada de los detectores de estado sólido para rayos X. Se hace una recopilación lo más completa posible de los procedimientos que han sido propuestos para la caracterización de los detectores.

Finalmente en el capítulo cinco se muestra el proceso de caracterización efectuado para los tres detectores mencionados con anterioridad.

#### Referencias

[Cruz] Fernando Cruz Aranda, "Calibración de un sistema de rayos X para la técnica PIXE," Tesis profesional, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, México, D.F., 1991.

[Lennard] W.N. Lennard, Kim and L. Rodriguez-Fernandez, Nucl. Instrum. and Meth. B 189 (2002).

[Papp] T. Papp, J.L. Campbell and E. Papp-Szabó, Nucl. Instrum. and Meth. B 189 (2002) 33. T. Papp, T. Lakatos, Z. Nejedly and J.L. Campbell, Nucl. Instrum. and Meth. B 189 (2002) 66.

[Rodriguez] L. Rodriguez-Fernández, W.N. Lennard, H. Xia and G.R. Massoumi, Applied Surface Science (1996)

# **CAPÍTULO 1**

## LA RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA

#### 1.1 Radiación electromagnética.

La radiación electromagnética presenta un carácter dual porque puede describirse en términos de ondas o de partículas. Actualmente este aspecto ondulatorio y corpuscular se explica en términos de la electrodinámica cuántica, la cual describe a las interacciones electromagnéticas y transporte de energía en términos de fotones. Los fotones son partículas sin masa los cuales tienen asociado un paquete o cuanto de energía dado por:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \tag{1.1}$$

donde  $c = 3 \times 10^8$  m/s es la velocidad de la luz,  $h = 6.6254 \times 10^{-34}$  Js es la constante de Planck, v es la frecuencia y  $\lambda$  la longitud de onda. De acuerdo con la ecuación (1.1) la radiación electromagnética suele expresarse en términos de: a) su energía, b) su frecuencia en Hz y c) su longitud de onda, dada a partir de  $\lambda = c / v$ . De acuerdo a la expresión relativista para energía de una partícula libre se tiene que el momento del fotón es [Eisberg]:

$$p = \frac{E}{c} = \frac{hv}{c} \tag{1.2}$$

1-1

El espectro electromagnético dependiendo de su energía y origen suele dividirse en diferentes regiones: ondas de radiofrecuencia, microondas, infrarrojo, visible, ultravioleta, rayos X y rayos gamma. Las unidades empleadas para la descripción de estas ondas depende del procedimiento y variables que sean empleadas comúnmente para registrarla. Se prefiere a la frecuencia (Hz) para describir a la radiofrecuencia y microondas; a la longitud de onda para el infrarrojo, visible, ultravioleta y rayos X, y a la energía para rayos X y gammas. En la figura 1.1 se muestra el espectro electromagnético.





Las ondas de radiofrecuencia corresponden a fotones con frecuencias que oscilan desde pocos Hz hasta 10<sup>9</sup> Hz, es decir una longitud de onda que va de varios kilómetros a ~0.3 m. Esta radiación es emitida principalmente por el movimiento de electrones en circuitos eléctricos.

Las microondas se extienden alrededor de los  $10^9$  Hz hasta  $3 \times 10^{11}$  Hz, correspondientes a longitudes de onda de 30 cm a 1.0 mm. Del orden de microondas son los efectos de las rotaciones moleculares, del espín del electrón y del espín nuclear y aparecen en transiciones atómicas en las que los niveles de energía involucrados se encuentran muy próximos entre sl. También se producen por circuitos electrónicos como los magnetones y los klystrons.

La región infrarroja va aproximadamente de  $3 \times 10^{11}$  Hz a  $4 \times 10^{14}$  Hz, correspondiente a longitudes de 1.0 mm a 780 nm. Se producen principalmente por las vibraciones moleculares y agitación térmica de los átomos.

La parte visible corresponde a la luz, o la radiación que puede detectar el ojo humano, la cual va de  $3.84 \times 10^{14}$  Hz a  $7.69 \times 10^{14}$  Hz. Se produce generalmente por transiciones electrónicas entre los niveles atómicos externos y moleculares.

El ultravioleta está en la región de  $8 \times 10^{14}$  Hz a  $3 \times 10^{17}$  Hz, cuyas energías de fotón van de 3.2 eV a 1.2 keV. Se producen principalmente en transiciones atómicas y aceleración de cargas en sincrotrones. La energía de la radiación ultravioleta es suficiente para ionizar átomos, lo que la hace importante como fuente para iniciar reacciones químicas.

Los rayos X tienen su origen en las transiciones electrónicas que involucran capas atómicas internas, donde las energías de los fotones producidos van de  $1.2 \times 10^3$  eV a  $2.1 \times 10^5$  eV llamados rayos X característicos. También se producen cuando partículas cargadas son aceleradas o frenadas bruscamente generando rayos X, y a éstos se les llama de radiación de frenado o bremsstrahlung. Finalmente el origen de los rayos gamma se encuentra en las transiciones dentro del núcleo atómico.

#### 1.2 Descripción clásica de la radiación electromagnética.

Desde el punto de vista clásico la radiación electromagnética consiste en ondas originadas por cambios en campos eléctrico y magnético, los cuales se encuentran relacionados entre si y son gobernados por las leyes de Maxwell. La teoría electromagnética clásica conduce a la consideración de una transferencia continua de energía por medio de las ondas electromagnéticas. La descripción clásica es válida cuando el momento de la radiación, ecuación (1.2), es menor que el producto mc, donde m es la masa en reposo del electrón. Bajo esta condición el carácter corpuscular de la radiación puede despreciarse. Sin embargo, en diversos casos cuando las longitudes de onda son muy pequeñas, la descripción clásica no resulta ser la más conveniente, especialmente para explicar los procesos de absorción y emisión de energía radiante. Bajo estas condiciones resulta ser necesario el modelo corpuscular de fotones.

En la electrodinámica clásica [Jackson, Reitz, Feynman] los campos eléctrico E y magnético B se encuentran regidos por las ecuaciones de Maxwell:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon} \tag{1.3}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \tag{1.4}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \tag{1.5}$$

1-2

$$\nabla \times \mathbf{B} - \mu \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \mu \mathbf{J}$$
(1.6)

donde  $\rho$  es la densidad de carga, J es la densidad de corriente,  $\epsilon$  es la constante de permitividad y  $\mu$  es la constante de permeabilidad magnética del medio. De acuerdo con estas ecuaciones se tiene que los campos E y B pueden obtenerse a partir de un potencial escalar  $\Phi$  y un potencial vectorial A como:

$$\mathbf{E} = -\nabla \Phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$
(1.7)

$$\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A} \,. \tag{1.8}$$

De estas dos últimas ecuaciones se observa que los campos eléctrico y magnético permanecen sin cambio si se sustituyen los potenciales  $\Phi$  y A por otros  $\Phi$ ' y A' tales que cumplan con las siguientes condiciones:

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \, \psi \tag{1.9}$$

$$\Phi \to \Phi' = \Phi + \frac{\partial \psi}{\partial t}$$
(1.10)

donde  $\psi$  es una función escalar. Esto permite una gran libertad para la selección de los potenciales electromagnéticos. Así pues se tiene la posibilidad de que junto con las ecuaciones de Maxwell e imponiendo la condición:

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \varepsilon \, \mu \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0 \tag{1.11}$$

más conocida como condición o norma de Lorentz, se obtienen las ecuaciones más sencillas que deben cumplir los potenciales electromagnéticos. Estas ecuaciones son:

$$\nabla^2 \Phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = -\frac{1}{\varepsilon} \rho$$
(1.12)

$$\nabla^2 A_i - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A_i}{\partial t^2} = -\mu_0 J_i$$
(1.13)

donde los subíndices i = 1, 2, 3 corresponden a cada una de las componentes x, y, z del potencial vectorial A. Las soluciones generales de las ecuaciones (1.12) y (1.13) son:

$$\Phi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int_{\nu} \frac{\rho(\mathbf{r}',t')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} dV'$$
(1.14)

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\mathcal{V}} \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}',t')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} dV'$$
(1.15)

1-3

У

У

ý

У

donde r es el punto en el que se están evaluando los potenciales  $\Phi$  y A, r' corresponde a la posición de un elemento diferencial, o "punto", en la distribución de carga  $\rho$  o corriente J. Finalmente t' es el tiempo de retardo dado como:

$$t' = t - \frac{\left|\mathbf{r} - \mathbf{r'}\right|}{c} \tag{1.16}$$

Debido a que las señales viajan a la velocidad finita c, se tiene que el tiempo de retardo es el que tarda en observarse en el punto r un cambio en los potenciales  $\Phi$  y A originado por una variación en la densidad de carga o en la corriente en el punto r'.

De esta manera, a partir de las ecuaciones (1.7), (1.8), (1.14) y (1.15) es posible determinar el campo electromagnético producido por distribuciones de carga y corriente, así como también, por un conjunto de cargas en movimiento. Otras propiedades importantes del campo electromagnético son la densidad de energía u y el vector S de flujo de energía. La densidad de energía u del campo electromagnético en el vacío es:

$$\boldsymbol{u} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2 \right) \tag{1.17}$$

El flujo de energía del campo electromagnético S se conoce como el vector de Poynting y está relacionado con los campos E y B como:

$$\mathbf{S} = \varepsilon_{\rm n} c^2 \mathbf{E} \times \mathbf{B} \tag{1.18}$$

La potencia que irradia el conjunto de cargas en movimiento sobre una superficie A es:

$$P = \frac{dW}{dt} = \int \mathbf{S} \cdot \mathbf{\hat{n}} da \tag{1.19}$$

En muchas ocasiones no se está interesado en la potencia radiada por las cargas en movimiento sino más bien en la energía irradiada por ángulo sólido d $\Omega = da / r^2$ , tal que:

$$\frac{dW}{d\Omega} = r^2 \int S dt \tag{1.20}$$

Las ondas más sencillas de describir son las de tipo armónico o sinusoidales con las cuales se describen ondas electromagnéticas planas. Si en el medio no existen cargas ni corrientes eléctricas entonces las soluciones en forma de onda plana para las ecuaciones (1.12) y (1.13) son:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}_0 e^{i(k\,\mathbf{u}\,\mathbf{r}\,\cdot\,\boldsymbol{\omega}\,\mathbf{t})} \tag{1.21}$$

У

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}.t) = \mathbf{B}_{0} e^{i(k \mathbf{u} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$$
(1.22)

donde  $\mathbf{E}_0$  y  $\mathbf{B}_0$  son dos vectores constantes que indican la amplitud de las ondas, **u** es el vector unitario en la dirección de propagación,  $\omega = 2\pi v$  es la frecuencia angular y  $k = 2\pi / \lambda$  en la que  $\lambda$  es la longitud de onda. En esta situación para que se cumplan las ecuaciones de Maxwell (1.5) y (1.6) se tiene que:

$$\mathbf{B} = \frac{1}{c} (\mathbf{u} \times \mathbf{E}) \tag{1.23}$$

Bajo esta condición el vector de Poynting, ecuación (1.18), puede expresarse como:

$$\mathbf{S} = \varepsilon_0 \mathbf{c} \mathbf{E}^2 \mathbf{u} \tag{1.24}$$

Para el caso de una particula con carga q en movimiento, los potenciales electromagnéticos que genera en un punto r se o btienen i ntegrando las e cuaciones (1.14) y (1.15) u tilizando la función  $\delta$  de Dirac. É stos se conocen como potenciales de Lienard-Wiechert y se encuentran expresados como:

$$\Phi(\mathbf{r},t) = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 \left[ \left| \mathbf{r} - \mathbf{r}' \right| + \frac{\mathbf{v} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{c} \right]_{rel}}$$
(1.25)  
$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \frac{q\mathbf{v}}{c}$$
(1.26)

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 c_0^2 \left[ \left| \mathbf{r} - \mathbf{r}'_{\cdot} \right| - \frac{\mathbf{v} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{c} \right]_{\mathrm{ret}}}$$
(1.26)

donde todas las cantidades dentro del parentesis cuadrado se toman en el instante retardado t' = t - |r - r'| / c.

Sustituyendo (1.25) y (1.26) en las ecuaciones (1:7) y (1.8) se encuentra que para una carga que se mueve en forma arbitraria los campos eléctrico y magnético que produce son [Feynman, Eyges]:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \frac{\mathbf{q}}{4\pi\varepsilon_0} \left[ \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} + \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c} \frac{d}{dt} \left( \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \right) + \frac{1}{c^2} \frac{d^2}{dt^2} \left( \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \right]$$
(1.27)  
$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = -\frac{1}{c} \mathbf{E} \times \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$
(1.28)

donde los vectores r y r' son evaluados al tiempo de retardo t'.

Los cálculos anteriores pueden simplificarse cuando la velocidad de la partícula es pequeña y el punto de observación del campo electromagnético se encuentra muy lejos de la carga. Si  $r' \ll r$  entonces pueden desarrollarse en serie los términos:

$$\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right| \approx \mathbf{r}-\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{\mathbf{r}}+\dots$$
 (1.29)

У

y

Y

$$\frac{1}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|} \approx r^{-1} \left(1+\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r^2}+\ldots\right)$$
(1.30)

1-5

Sustituyendo ambos desarrollos en las ecuaciones (1.14), (1.15) y (1.16) para los potenciales electromagnéticos y sin considerar los términos que decaen más rápidamente que  $r^{-1}$ , entonces se encuentra que los campos eléctrico y magnético están dados como:

у

$$\mathbf{B}(\mathbf{r},t) = -\frac{\mu_0}{4\pi\varepsilon_0 c^2} \mathbf{r} \times \mathbf{\ddot{p}}$$
(1.31)

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 c^2} \left[ \frac{(\mathbf{r}\cdot\ddot{\mathbf{p}})\mathbf{r}-\mathbf{r}^2\ddot{\mathbf{p}}}{r^3} \right] = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 c^2 r^3} \mathbf{r} \times (\mathbf{r}\times\ddot{\mathbf{p}}) = -\frac{c}{r} \mathbf{r} \times \mathbf{B}(\mathbf{r},t)$$
(1.32)

donde  $\mathbf{p} = q \mathbf{r}'$  es el momento dipolar de la carga q,  $\ddot{\mathbf{p}} = q \dot{\mathbf{r}}' = q \dot{\mathbf{v}}$ , es la segunda derivada de **p** con respecto del tiempo en la que **v** es la velocidad de la partícula y **v** es su aceleración.

Sustituyendo (1,31) y (1.32) en (1.18) se tiene que el flujo de energía indicado por el vector de Poynting es:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{16\pi^2 \varepsilon_0 c^3 r^5} \mathbf{r} (\mathbf{r} \times \mathbf{\ddot{p}})^2 = \frac{\mathbf{\ddot{p}}^2 \operatorname{sen}^2 \theta}{16\pi^2 \varepsilon_0 c^3 r^2} \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}}$$
(1.33)

donde  $\theta$  es el ángulo entre el vector de aceleración del momento dipolar y el de observación del campo electromagnético. De esta última ecuación puede verse que la mayor potencia radiada es en la dirección perpendicular ( $\theta = 90^{\circ}$ ) a la de la aceleración de la carga. Finalmente, a partir de la ecuación (1.19) se tiene que la potencia irradiada en un punto lejano debido a una carga acelerada que se mueve lentamente es:

$$P = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{3} \frac{\dot{\mathbf{v}}^2}{\mathbf{c}^3} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{3} \frac{\ddot{\mathbf{p}}^2}{\mathbf{c}^3} .$$
(1.34)

A los resultados de estos cálculos utilizando esta aproximación se les conoce como aproximación dipolar y tienen un amplio intervalo de validez en muchas aplicaciones.

#### 1.3 Aspectos elementales de la descripción cuántica de la radiación electromagnética.

La descripción del estado de una partícula no relativista a nivel cuántico se da por medio de una función de onda  $\psi$  que satisface a la ecuación de Schodinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = [H_0 + V(\mathbf{r},t)]\psi(\mathbf{r},t)$$
(1.35)

donde  $H_0$  es el operador hamiltoniano del sistema no perturbado y  $V(\mathbf{r},t)$  es el potencial perturbador el cual también puede depender explícitamente del tiempo. De manera general la función  $\psi(\mathbf{r},t)$  es una superposición de los estados n-ésimos posibles que puede tener el sistema de tal manera que:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_{n} c_{n}(t) e^{-iE_{n}^{o}t/\hbar} \phi_{n}(\mathbf{r})$$
(1.36)

donde las  $\phi_n$  (r) son las funciones de onda independientes del tiempo correspondientes al hamiltoniano no perturbado  $H_0$  para el estado n-ésimo de energía  $E_n^0$ , Las  $c_n(t)$  son constantes que indican para un instante dado t la contribución del estado n-ésimo. La probabilidad  $P_n$  de que la partícula en el instante t se encuentre en el estado n-ésimo está dada por:

$$P_{n}(t) = \left| c_{n}(t) \right|^{2}$$
(1.37)

Aplicando la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo a primer orden, se tiene que si la partícula inicialmente se encontraba en el estado k entonces el valor de la constante  $c_n(t)$  esta dado como:

$$c_n(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle \phi_n | V(t) | \phi_k \rangle e^{i(E_n^u - E_n^k)/\hbar} dt$$
(1.38)

El Hamiltoniano que describe la interacción de un electrón en un potencial estático V(r) con un campo electromagnético descrito por el potencial vectorial A(r, t) es [Gasiorowicz, Bransden]:

$$H = \frac{\left[\left[\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right]^{2}}{2m} + V(r)$$
(1.39)

donde p es el momento de la partícula. Obsérvese que en este caso sólo se ha considerado la parte vectorial del potencial. Esto es posible gracias a la libertad que dan las ecuaciones (1.9) y (1.10). Además se impone la condición de norma:

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r},t) = 0 \tag{1.40}$$

La justificación de tomar solamente al potencial vectorial radica en que el campo puede ser tratado como un sólo operador en cualquier punto en particular r del espacio. De acuerdo con la electrodinámica cuántica el operador de potencial del campo electromagnético de un fotón es:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \mathbf{A}_{0}^{*}(\mathbf{r}) e^{i\omega t} + \mathbf{A}_{0}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}$$
(1.41)

donde  $A_0^*(\mathbf{r})$  y  $A_0(\mathbf{r})$  son respectivamente los operadores de creación y aniquilación para el caso del oscilador armónico. De este potencial dado por la ecuación (1.41) solamente se toma el primer miembro del lado derecho de la igualdad cuando se tiene un proceso de emisión de un fotón, en tanto que solamente se toma al segundo término si el proceso es la absorción de un fotón. Así con el empleo de los operadores de creación y aniquilación se encuentra que el número de fotones de energía  $\hbar\omega$  (o  $h\nu$ ) del campo electromagnético puede asociarse directamente con el número cuántico n del estado en el que se encuentra un oscilador armónico. La aplicación del operador  $A_0^*(\mathbf{r})$  conducirá a la creación de un fotón y n aumentará en una unidad. Por otro lado la aplicación de  $A_0(\mathbf{r})$  disminuirá el número de fotones n en una unidad.

De acuerdo con el hamiltoniano dado por la ecuación (1.39) se tiene la aplicación directa y de segundo orden del operador del potencial vectorial. El término  $A^2$  contribuye en los aspectos de dispersión de luz por un átomo y con las transiciones que involucren la emisión de dos fotones. Pero por otro lado, éste no contribuirá a las transiciones acompañadas de la emisión o absorción de un fotón.

De acuerdo con principio de correspondencia se tiene que el potencial  $A(\mathbf{r}, t)$  dado por (1.41) debe satisfacer la ecuación (1.13); Para ello se tiene que el operador de aniquilación puede expresarse como:

$$\mathbf{A}_{0}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_{0} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$
(1.42)

donde

$$\mathbf{k}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \tag{1.43}$$

y la constante  $A_0$  tiene una dirección determinada por la polarización del campo eléctrico. De la condición de norma impuesta por la ecuación (1.40) se tiene que:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{0}} = \mathbf{0} \tag{1.44}$$

Incorporando la forma del operador  $A_0(\mathbf{r})$  dada por (1.42) en el potencial (1.41), se tiene que los campos E y B pueden obtenerse sustituyendo este potencial en las ecuaciones (1.7) y (1.8). La densidad de energía del campo electromagnético se obtiene a partir de la ecuación (1,17) de tal manera que:

$$u = \frac{1}{2} \left( \mathbf{E}^{2} + \mathbf{B}^{2} \right) = \frac{\omega^{2}}{2\pi c^{2}} \mathbf{A}_{0} \cdot \mathbf{A}_{0}^{*} = \frac{\omega^{2}}{2\pi c^{2}} \left| \mathbf{A}_{0} \right|^{2}$$
(1.45)

donde se ha tomado un promedio en el tiempo de los campos E y B por lo que los términos que oscilan en el tiempo se anulan. Si en un volumen V existen N fotones, entonces la densidad de energía debe de ser:

$$u = \frac{\omega^2}{2\pi c^2} \left| \mathbf{A}_0 \right|^2 = \frac{N\hbar\omega}{V}$$
(1.46)

De esta última expresión es posible conocer el valor  $A_0$  de la intensidad del potencial electromagnético por lo que finalmente se tiene que:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \left[\frac{2\pi c^2 (N+1)\hbar}{\omega V}\right]^{1/2} \mathbf{\varepsilon} e^{-t(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} + \left[\frac{2\pi c^2 N\hbar}{\omega V}\right]^{1/2} \mathbf{\varepsilon} e^{t(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}$$
(1.47)

donde  $\varepsilon$  es el vector unitario en la dirección de  $A_0$  y, de la ecuación (1.44) se tiene que  $\varepsilon \cdot \mathbf{k} = 0$ . El empleo del primero o segundo término del lado derecho de la igualdad dependerá de si el proceso es la emisión o la absorción de un fotón.

Una vez conocidas las propiedades que tiene el operador del potencial de campo electromagnético se retoma el problema original de la interacción de un electrón con este campo por medio de la ecuación de Schodinger. Utilizando el Hamiltoniano dado por la ecuación (1.39) y descartando los términos cuadráticos del potencial vectorial como una primera aproximación, se tiene que el potencial perturbador dependiente del tiempo es:

$$V(t) = \frac{e}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{p}$$
(1.48)

Esta es una aproximación aceptable y se tratará inicialmente la emisión de un solo fotón a partir de un estado inicial k en el que no hay fotones a uno m que solo contiene uno. Así sustituyendo el potencial dado por (1.48) en la ecuación (1.38) se tiene que:

$$P_{k \to m} = \left| c(t) \right|^{2} = \frac{2 \pi e^{2}}{m^{2} \hbar \omega V} \left| \left\langle \phi_{m} \left| e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{\epsilon} \cdot \mathbf{p} \right| \phi_{k} \right\rangle \right|^{2} \left| \int_{0}^{t} e^{i(E_{m}^{n} - E_{k}^{n} + \hbar \omega)t/\hbar} \right|^{2}$$
(1.49)

donde para tiempos largos la integral al cuadrado es equivalente a la función delta de Dirac  $\delta(E_k^0 - E_m^0 - \hbar\omega)$ . La probabilidad por unidad de tiempo de que una transición electrónica dentro de un átomo del estado k al m vaya acompañada por la emisión de un fotón con energía  $\hbar\omega = E_k^0 - E_m^0$  está dada por:

$$\Gamma_{k \to m} = 2\pi\hbar \frac{2\pi e^2}{m^2 \hbar \omega V} \left| \left\langle \phi_m \left| e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{\epsilon} \cdot \mathbf{p} \right| \phi_k \right\rangle \right|^2 \delta(E_k^0 - E_m^0 - \hbar \omega)$$
(1.50)

Aquí la expresión anterior indica la probabilidad de detectar un fotón con energía  $\hbar\omega$  y con momento en el intervalo entre k y k +  $\Delta k$ . De esta manera la razón total de la transición es la suma sobre todos los intervalos  $\Delta k$ , es decir:

$$\underline{R}_{k \to m} = \sum_{\Delta k} \Gamma_{k \to m}$$
(1.51)

Para el caso de una partícula libre encerrada en una caja de lados L se tiene que:

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x$$
  $k_y = \frac{2\pi}{L} n_y$   $k_z = \frac{2\pi}{L} n_z$  (1.52)

por lo que:

$$\Delta \mathbf{k} = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z$$
(1.53)

Si L es grande, entonces la densidad de estados se puede tratar de manera continua, con lo cual:

$$R_{k \to m} = \sum_{\Delta k} \Gamma_{k \to m} = \int \frac{V d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \Gamma_{k \to m}$$
(1.54)

donde V es el volumen de la caja y  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ . Luego el elemento de volumen en el espacio de momentos se puede expresar como:

$$d^3 \mathbf{p} = p^2 \, dp \, d\,\Omega \tag{1.55}$$

donde p se relaciona con la energía del fotón por medio de E = pc. En el caso de tratarse de una partícula con masa diferente de cero se tiene que  $E = p^2 / 2m$  o si es relativista  $E = (p^2c^2 + m^2c^4)^{1/2}$ . Efectuando la integral sobre el espacio de momentos se tiene:

$$R_{k\to m} = \int \frac{e^2}{2\pi\hbar c} \omega_{km} \left| \frac{1}{mc} \left\langle \phi_m \left| e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{\epsilon} \cdot \mathbf{p} \right| \phi_k \right\rangle \right|^2 d\Omega$$
(1.56)

donde

$$\omega_{km} = \frac{E_k^0 - E_m^0}{\hbar} \tag{1.57}$$

Finalmente, solo queda tratar el cálculo del término correspondiente a la matriz de perturbación:

$$\left\langle \phi_{m} \left| e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{\epsilon} \cdot \mathbf{p} \right| \phi_{k} \right\rangle$$
 (1.58)

1-9

Esta última expresión se suele simplificar expandiendo en serie de potencias:

$$e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{(n!)} (\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})^n$$
(1.59)

De esta manera el primer término que contribuye a la probabilidad de emisión de un fotón es

$$\left\langle \phi_{m} \left| e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{\varepsilon} \cdot \mathbf{p} \right| \phi_{k} \right\rangle \approx \left\langle \phi_{m} \left| \mathbf{\varepsilon} \cdot \mathbf{p} \right| \phi_{k} \right\rangle + \dots = \frac{im}{\hbar} \mathbf{\varepsilon} \cdot \left\langle \phi_{m} \left| [H, \mathbf{r}] \right| \phi_{k} \right\rangle + \dots = im\omega \mathbf{\varepsilon} \cdot \left\langle \phi_{m} \left| \mathbf{r} \right| \phi_{k} \right\rangle + \dots$$

(1.60)

#### donde $[H, \mathbf{r}]$ es el conmutador de los operadores H y $\mathbf{r}$ .

Al empleo del primer término para el cálculo de la probabilidad de emisión de un fotón por un átomo se le conoce como la aproximación dipolar eléctrica, la cual corresponde a las transiciones de emisión más probables. Es decir, las líneas de emisión atómica más intensas corresponden a la contribución del término dipolar de la ecuación (1.60). También, el cálculo del término dipolar en (1.60) conduce a valores diferentes de cero sólo para funciones de onda atómicas  $\phi$  correspondientes a ciertos niveles de energía con determinados números cuánticos. Estos términos diferentes de cero son los que contribuyen a la emisión dipolar y señalan cuales s on las transiciones posibles en esta a proximación. En este caso s e dice que los números cuánticos de las funciones satisfacen las reglas de selección para las transiciones posibles. Por otro lado a los términos nulos se les asocia con transiciones prohibidas en la aproximación dipolar, pues éstas no contribuyen a la emisión y por lo tanto la transición no puede tener lugar. Aquí es importante recalcar que el hecho de que una transición sea prohibida en la aproximación dipolar no quiere decir que ésta no se pueda dar al considerar más términos en la serie dada por la ecuación (1.60), aunque la probabilidad de que ocurra es mucho más pequeña.

#### 1.4 Fuentes de rayos X y gammas.

El origen de la radiación electromagnética es debido a partículas cargadas en movimiento acelerado, así como a procesos moleculares, atómicos o nucleares que involucran transiciones entre diferentes niveles de energía. Las fuentes de rayos X y gammas se detallan a continuación.

#### 1.4.1 Rayos X característicos.

Los átomos emiten fotones cuando ocurren transiciones electrónicas de un estado o nivel de mayor energía (excitado) a uno de menor energía. Cuando estas transiciones involucran niveles atómicos de muy baja energía los fotones emitidos tienen energías correspondientes a la de rayos X.

De acuerdo con la mecánica cuántica y bajo la descripción de un átomo en la a proximación 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. Con esta aproximación es 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 a nalogía con los estados de á tomos hidrogenoides.

Los niveles con números cuánticos principales n = 1, 2, 3, 4,... suelen expresarse respectivamente con las letras K, L, M, N,... Los valores posibles para el número l son l = 0, 1,..., n-1. A cada valor numérico de l se le suele representar r espectivamente por las letras s, p, d, f, g, h,... Para  $m_l$  s e tiene que sus valores

posibles son  $m_l = -l$ , -l+1,..., -1, 0, 1,..., l-1, l. Esto se escribe en forma equivalente como  $m_l \le |l|$ . El número s nos indica el espín del electrón que puede ser  $s = \pm \frac{1}{2}$ . El número j nos indica los valores del momento angular total del electrón en un orbital dado, siendo j = |l-s|, ..., |l+s|. Finalmente se puede definir  $m_l$  como las proyecciones del momento angular total donde se tiene que  $m_l \le |j|$ .

De acuerdo con el principio de exclusión de Pauli, a un conjunto único de números cuánticos le corresponde a un electrón en un orbital dado. Esto es, dos o más electrones nunca van a poder tener los mismos números cuánticos. Con esto, el número máximo de electrones que se puede tener en cada capa atómica se puede determinar del conjunto de números cuánticos posibles de cada orbital. Dentro de esta aproximación se considera que un átomo neutro se encuentra en estado base o de mínima energía cuando todos sus electrones están distribuidos de tal manera que vayan ocupando todas los orbitales atómicos en orden de menor a mayor energía.

Los niveles atómicos se suelen clasificar de acuerdo con sus números n, l y j utilizando la notación  $nl_j$ , 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 se tiene que n = 1, l = 0, y s = ± ½, con lo cual f = 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 se puede obtener del total de número cuánticos n, j y  $m_j$  posibles. Así pues se tiene que:

|   |          |       |   |   |                       | 100 0 0 0 0 0         |   |  | A. 1996.  |   | and the second | Tall and the bally of                          |                                       | <ul> <li>Alternative State</li> </ul> |       |
|---|----------|-------|---|---|-----------------------|-----------------------|---|--|---|---|--|--|---------------------------------------|---------------------------------------|-------|
|   |          |       |   | 1 M 1 M 1   |                       |                       |   |  |   |   |  |  | 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 |                                       |       |
|   |          |       |   |   | 1.1.1.1.1.1.1         |                       | •   | <u>.</u>   |   |   |  | Y 11 7 1 12                                    |                                       | 199 St. 1                             |       |
|   |          |       |   |   |                       |                       |   |  |   | A server of the server  |  |  | 1000 A. D. A.                         |                                       |       |
|   |          | · · · |   |   | (*) 1 (*) 4 (*)       |                       |   |  |   |   | C 4 C  | 61 11 15 11                                    |                                       | en a se como                          |       |
|   |          |       |   |   |                       | 11.                   |   |  |   | Arrest to be a set of the set of |  |  |                                       | 1.1.1                                 |       |
|   |          |       | 100 C 10 C 10 C                         |   |                       |                       |   |  |   | N 4 - 9   | a fail a fair a station  |  |                                       | C 2 1 2 1                             |       |
|   |          |       |   |   | 5.5 Ave. 6.4          | 1                     |   |  |   | 1   |  | N  |                                       | - 2 - C.E.                            | 1.00  |
|   |          |       |   | 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1   |                       |                       |   |  | 1.1 Alta 1.1 Alta   | <ul> <li>A DEL DEL SA DEL DEL</li> </ul>  |  |  |                                       | 10 AC 11 11                           | A 197 |
|   |          |       |   |   | 56 a. h. 1 h.         |                       | 10 million 1 | 42 m 1 T 1 2 L   |   | August 151  |  |  |                                       |                                       |       |
|   |          |       |   |   |                       | and the second second |   |  |   |   |  | No. 2010 100 100 10                            | NY 11 I NO 1911                       | 2 M 2 10 1 10 1                       |       |
|   |          |       |   |   |                       |                       |   | 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 -  |   | 1.0.1.0.000   | 1.1  |  |                                       |                                       | 12.5  |
|   |          |       |   | - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1   | Sec. 2012 - 2012      |                       | 1910 - 1920   |  |   |   | 14.0 C K   |  |                                       | 10 A 10 A 10 A                        |       |
|   |          |       | 1000                                    | - C.S   |                       |                       |   |  |   | S 2 4 1 1 1 1 1 1   |  | · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·          |                                       | Pr 6 20 1 1                           | 10.00 |
|   |          | 1.6   |   |   |                       |                       |   |  |   |   |  |  | Start Solar ak                        | - 1. Contraction - 1.                 | 656   |
|   |          |       |   |   |                       |                       |   | _ /  |   |   | 19 19 19 19 19 19 19 19 19 19 19 19 19 1   | 10 C        |                                       |                                       | 1.77  |
|   | 11 4 6 1 |       |   |   |                       |                       |   |  |   |   |  | Sec. 2010.00                                   |                                       |                                       |       |
| _ |          | 14    | <b>4</b> ( )                            | Statistics of the state of the |                       |                       |   |  | _   |   |  |  |                                       | S                                     | 61164 |
|   |          |       |   | 1.2.2 *** * *   |                       |                       |   | 0.2 m - 2 m - 2 m  |   | Transfer 1  | · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·  |  |                                       | • • • • • • • • • • • • • • • • • • • |       |
|   |          |       |   |   |                       |                       |   | ちょうかん マンドー   |   | No. 19 1 1 1  |  |  |                                       |                                       | - 12  |
|   |          |       |   |   | and the second second |                       | (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1)   | A DOMESTIC AND A   |   | 2222.2022   |  |  | TEAL                                  |                                       |       |
|   |          |       |   |   |                       |                       | 5 M - 56 M  |  | - 10 C |   |  |  |                                       |                                       |       |
|   |          |       |   | The second second   |                       |                       | 1. St. 1. St.   |  |   |   |  |  |                                       |                                       |       |
|   |          |       | 1                                       |   |                       |                       |   | (  | <b>.</b>  |   |  |  |                                       |                                       |       |
|   |          |       |   |   |                       | 1 10 1                |   |  |   |   |  |  | 0 I. 2 S. M. A. M.                    |                                       |       |
|   |          |       | 1 A 1 A 1 A 1 A 1 A 1 A 1 A 1 A 1 A 1 A |   | <b>.</b> .            |                       |   |  |   |   |  | · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·          |                                       | 1                                     |       |
|   |          |       |   | 17 1 2 15   |                       |                       |   | A101 1   |   |   | 1.1.1. March 11. P.  | (a) (a) (b) (b) (b) (b) (b) (b) (b) (b) (b) (b | - N. A. S. C. M.                      | 4. No. 1                              |       |
|   |          |       |   |   |                       |                       |   |  |   |   | and a second second  | 141  |                                       | 172 A 2 A 3 A 4                       | ×.,   |
|   |          |       |   |   |                       |                       |   | And the second s |   |   |  |  |                                       |                                       | - 21  |
|   |          |       |   | · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·   |                       |                       | 1.  |  |   |   | and the second second  |  | and the second second                 |                                       |       |

En el caso de la capa L se tiene que n = 2, l = 0,  $1 | y s = \pm \frac{1}{2}$ , con lo cual para l = 0 se tiene que  $j = \frac{1}{2}$  y  $m_{1/2} \le 1/2$  |, en tanto que para l = 1 se tiene que  $j = \frac{1}{2}$  y  $\frac{3}{2}$  con lo que  $m_{1/2} \le 1/2$  | y  $m_{3/2} \le 3/2$  |. 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<sub>1</sub>, L<sub>2</sub> y L<sub>3</sub> respectivamente. En total hay 8 electrones para la capa L que se reparten de la siguiente forma:

$$\begin{array}{c} (n, \ j, \ m_{j} \ ) \\ \text{nivel } L_{i} \circ 2S_{1/2} & (2, 1/2, -1/2) \\ (2, 1/2, 1/2) \ \end{pmatrix} 2 \text{ electrones} \\ (n, \ j, \ m_{j} \ ) \\ \text{nivel } L_{2} \circ 2P_{1/2} & (2, 1/2, -1/2) \\ (2, 1/2, -1/2) \ (2, 1/2, -1/2) \ \end{pmatrix} 2 \text{ electrones} \\ (n, \ j, \ m_{j} \ ) \\ (2, 3/2, -3/2) \\ \text{nivel } L_{3} \circ 2P_{3/2} & (2, 3/2, -1/2) \\ (2, 3/2, -1/2) \\ (2, 3/2, 3/2) \ \end{pmatrix} 4 \text{ electrones} \end{array}$$

En una colisión entre un electrón, ion o fotón con un átomo, puede ocurrir que alguno de los electrones de una capa interna, es decir, de un nivel de energía inferior, pase a uno de mayor energía o sea expulsado del átomo

quedando ionizado, ver figura 1.2*a*. De esta manera se produce una vacante en esta capa interna, ocasionando que el átomo se encuentre en un estado inestable o excitado. La forma en como el átomo ionizado alcanza un estado de mínima energía es por medio de la transición de un electrón de una capa superior a la capa donde se encuentra la vacante junto con la emisión de un fotón (figura 1.2b) o de un electrón Auger (figura 1.2c), o de ambos (efecto Auger radiativo). La energía de emisión del fotón o del electrón Auger es característica del elemento atómico y de los niveles entre los cuales ocurre la transición. A los rayos X o electrones Auger producidos se les denota en términos de las capas K, L, M,... donde se haya producido inicialmente la vacante. En la figura 1.3 se muestran las transiciones atómicas de las principales líneas de emisión. Además en esta figura se indica la notación utilizada para designar a las diferentes líneas de emisión de rayos X K.



Figura 1.2 Ejemplos de los procesos de generación de rayos X característicos y emición Auger (a) generación de una vacante en la capa K por incidencia de un ion, (b) emisión de un rayo X por una transición de un electrón a la vacante en la capa K, (c) emisión de un electrón Auger por una transición electrónica a la capa K

Otro efecto que debe considerarse son las transiciones no radiativas que ocurren entre subniveles de una misma capa atómica. De esta manera, una vacante producida en una subcapa es ocupada por un electrón proveniente de una subcapa superior dentro de la misma capa atómica. Esto da como resultado neto la presencia de una vacante en una subcapa superior en lugar de aquella en la que se produjo la vacante inicialmente. A estas transiciones no radiativas se les conoce como Coster-Kronig. Así, 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. Un caso de esto, 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 1.4a por medio de una transición de M<sub>5</sub> a L<sub>3</sub>. Pero también el proceso anterior puede tener lugar de una manera indirecta: Inicialmente se produce una vacante en la capa L<sub>1</sub>, la cual puede ser ocupada por un electrón de la capa L<sub>3</sub> por medio de una transición no radiativa que da como resultado una vacante efectiva en la capa L<sub>3</sub>, como se muestra en la figura 1.4b, la cual luego conduce a la emisión de un fotón de rayos X debido a la transición de M<sub>5</sub> a L<sub>2</sub>.





Figura 1.3 Transiciones electrónicas más probables.

El tiempo que tarda en presentarse la transición electrónica dentro del átomo es del orden de  $10^{-8}$  s [Skoog, Eisberg]. Si  $\Gamma(i)$  es la probabilidad por unidad de tiempo de que ocurra un decaimiento electrónico a una vacante producida en la capa *i*, entonces el tiempo de vida del estado con esta vacante es [Mitchell]:

$$\tau = \frac{h}{\Gamma(i)} \tag{1.61}$$

La probabilidad de que ocurra una de estas transiciones viene dada por las reglas de selección. Además esta probabilidad se puede descomponer en la contribución de los cuatro procesos involucrados en la transición:

$$\Gamma(i) = \Gamma_{R}(i) + \Gamma_{A}(i) + \Gamma_{AR}(i) + \Gamma_{CK}(i)$$
(1.62)

donde  $\Gamma_R(i)$  es la probabilidad de decaimiento por emisión radiativa,  $\Gamma_A(i)$  es por emisión Auger,  $\Gamma_{AR}(i)$  es por medio de Auger radiativo y  $\Gamma_{CK}(i)$  involucra la presencia de transiciones de Coster y Kronig. La probabilidad de ocurrencia del efecto Auger radiativo es muy pequeña y por lo regular suele despreciarse.

El rendimiento fluorescente, o simplemente, fluorescencia de la capa i ( $i = K, L_1, L_2$ , etc) denotada  $\omega_i$  se define como la probabilidad de que la transición electrónica vaya asociada con la emisión de un fotón. De esta manera se tiene que  $\omega_i$  está dada por:

$$\omega_i = \frac{\Gamma_R(i)}{\Gamma(i)} . \tag{1.63}$$



Figura 1.4 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  $L_3$ . En (b) se presenta la generación de una vacante en la capa  $L_3$  debida inicialmente a una ionización en la capa  $L_1$  la cual por medio de una transición Coster-Kronig es ocupada por un electrón de la capa  $L_3$ . Posteriormente en (c) se produce la emisión de un fotón de rayos X.

Análogamente se tiene que a la probabilidad  $a_i$  de que al ocurrir la transición electrónica a la capa *i* se presente la emisión de un electrón Auger es:

$$q_i = \frac{\Gamma_A(t)}{\Gamma(t)} \tag{1.64}$$

La probabilidad de una transición Coster-Kronig de una subcapa j a otra i, donde j > i, dentro de la misma capa atómica, se define de manera similar y se denota como  $f_{ij}$ . De esta manera para una vacante en la capa i se tendrá que:

$$\omega_i + a_i + \sum_{j \ (j>i)} f_{ij} = 1 \tag{1.65}$$

Debido a la creación de una vacante en la capa atómica K se tiene que la probabilidad de emisión de un fotón es directamente  $\omega_K$ , en tanto que para capas superiores ésta se complica debido a la presencia de las transiciones Coster-Kronig. Una forma de ver el efecto de estas transiciones Coster Kronig es a partir de la probabilidad de ionización  $\sigma_i^l$  de alguna subcapa *i*. De esta manera, la probabilidad  $\sigma_X^K$  de emisión de un fotón en una transición a la capa K es:

$$\sigma_X^K = \omega_K \sigma_I^K \tag{1.66}$$

en tanto que para las subcapas L es:

$$\sigma_{\chi}^{L1} = \omega_{L1} \sigma_{I}^{L1} \tag{1.67}$$

$$\sigma_X^{L2} = \omega_{L2} \left[ f_{12} \, \sigma_I^{L1} + \sigma_I^{L2} \right] \tag{1.68}$$

$$\sigma_{X}^{L3} = \omega_{L3} \left[ \left( f_{13} + f_{12} f_{23} \right) \sigma_{I}^{L1} + f_{23} \sigma_{I}^{L2} + \sigma_{I}^{L3} \right]$$
(1.69)

En algunos casos también conviene utilizar un valor promedio para la fluorescencia para las capas atómicas, como por ejemplo  $\overline{\omega}_L$  o  $\overline{\omega}_M$  para las capas L y M respectivamente.

#### 1.4.2 Bremsstrahlung (Radiación de frenado).

De acuerdo con la electrodinámica clásica, ecuaciones (1.27) y (1.28), toda carga que se encuentre en movimiento emitirá radiación electromagnética. Si la carga se mueve a velocidades no relativistas la generación de radiación se producirá cuando la partícula este siendo acelerada, (ver ecuaciones (1.31) y (1.32). Este efecto se aprecia cuando partículas cargadas se mueven en el interior de la materia. Así pues, todos los iones o partículas cargadas que se muevan en un medio material sufrirán interacciones con los átomos del medio ocasionando que las partículas comiencen a detenerse. En este proceso de frenado, al encontrarse las cargas desacelerándose emitirán fotones dentro de un continuo de radiación cuyo valor máximo no podrá exceder la energía cinética inicial de la carga. A este proceso se le llama bremsstrahlung o emisión de radiación de frenado. Este proceso se presenta cuando iones acelerados a grandes velocidades se hacen incidir sobre blancos desde gaseosos hasta sólidos. Los iones producirán bremsstrahlung al ser frenados dentro del medio debido a las colisiones con los electrones y núcleos de los átomos que componen el medio. Pero el bremsstrahlung más intenso no provendrá del ion, sino del frenado de los electrones que son expulsados de los átomos debido a la colisión con el ion, llamados electrones secundarios [Morales]. Los electrones al tener mucho menor masa que un jon, son más fáciles de acelerar y por tanto de producir radiación. Esta radiación debida a los electrones secundarios se da cuando un material se encuentra sometido a algún otro tipo de radiación que produzca la ionización de los átomos, como podrían ser la incidencia de electrones, rayos X o gamma. La descripción del bremsstrahlung debido a electrones secundarios involucra procesos cuánticos que la hacen más compleja y no puede ser descrita del todo por medio de métodos de la electrodinámica clásica.

#### 1.4.3 Radiación de sincrotrón.

Se conoce como radiación de sincrotrón a la que es generada por partículas cargadas que describen un movimiento cíclico a lo largo de una trayectoria circular o cerrada. El proceso de emisión de radiación electromagnética es el mismo que en el caso del bremsstrahlung, pero la diferencia radica en que la carga no se encuentra ahora frenándose, sino que está acelerada cambiando únicamente la dirección de su movimiento. En la Naturaleza esta radiación se produce a un nivel astronómico, cuando partículas cargadas de alta energía son atrapadas bajo un campo magnético que las obliga a girar en órbitas circulares o helicoidales [Longair]. En la Tierra la radiación de sincrotrón se produce en aceleradores cíclicos donde las partículas cargadas son confinadas a moverse en una trayectoria cerrada por medio de campos eléctricos y magnéticos. Cada vez que la partícula sea forzada a cambiar su trayectoria de su emucho mayor intensidad que la lograda por otros medios como es el caso de los tubos convencionales de rayos X.

#### 1.4.4 Emisión por decaimientos radiactivos.

El decaimiento nuclear ocurre siempre que un núcleo atómico que contiene cierto número de nucleones se encuentra en un estado de energía que no es el más bajo posible. El decaimiento nuclear se divide en tres categorías [Alonso, Eisberg]: 1.) decaimiento alfa, que consiste en la emisión espontánea de una partícula alfa, generalmente por un núcleo de número atómico grande (Z > 82); 2.) decaimiento beta consistente en la

emisión o absorción espontánea de un electrón o de un positrón por el núcleo; 3.) decaimiento gamma que consiste en la emisión espontánea de fotones de alta energía, cuando un núcleo realiza una transición de un estado excitado a su estado base o a otro estado excitado.

Los rayos gamma son fotones emitidos por la mayoría de los núcleos radiactivos. A esto se le conoce también como decaimiento gamma. La emisión de estos fotones se debe al proceso de desexcitación de los núcleos al pasar de un estado de energía mayor, o excitado, a uno de menor energía. La descripción del núcleo por medio del modelo de capas permite predecir la intensidad de las posibles transiciones dentro de un mismo núcleo. Típicamente, el decaimiento gamma aparecerá cuando un decaimiento beta anterior ha producido alguno de los nuevos núcleos en un estado excitado. Los fotones gamma no son perfectamente monoenergéticos, sino que tienen un pequeño intervalo de energías de ancho  $\Gamma$ . Este ancho  $\Gamma$  está asociado con el tiempo T de vida del estado excitado por medio del principio de incertidumbre:  $\Gamma = h / T$ . Así, para un estado excitado con T ~  $10^{-10}$  s el ancho en energía es de  $10^{-5}$  eV.

#### 1.4.5 Emisión por reacciones nucleares.

Las reacciones nucleares se producen cuando dos núcleos atómicos colisionan con energías suficientes que permitan superar la barrera Coulombiana y por tanto se de la interacción entre sus nucleones [Alonso]. Dependiendo de la energía de la colisión, esta interacción puede provocar desde la simple excitación de sus estados nucleares hasta la producción de nuevos núcleos. En una reacción nuclear siempre se conserva 1) la energía relativista total, 2) el momento, 3) el momento angular, 4) la carga, 5) la paridad y 6) el número de nucleones.

A manera de ilustrar este proceso de producción de rayos gamma considere el siguiente ejemplo. Se tiene una colisión en la que se produce la reacción de un protón con un núcleo de <sup>19</sup>F. En este caso se forma un núcleo de <sup>20</sup>Ne y se libera una energía Q = 12.485 MeV por medio de un fotón gamma. La liberación de esta energía es porque el núcleo de <sup>20</sup>Ne se crea en un estado excitado y los mecanismos para desexcitarse pueden ser la emisión de fotones gamma o partículas como neutrones, protones o núcleos de helio.

Las colisiones entre una partícula o ion ligero y un núcleo suelen representarse como:

$$x + X \rightarrow y + Y$$

donde x representa al proyectil incidente, X es el núcleo del átomo blanco, Y es el núcleo del átomo obtenido como resultado de la reacción y finalmente y es la partícula emitida en la reacción. Otra manera de representar a la reacción es como X(x,y)Y. Así, para el caso del ejemplo indicado éste se representaría como <sup>19</sup>F (p, γ) <sup>20</sup>Ne. Otra reacción posible sería <sup>19</sup>F (p, α) <sup>16</sup>O. En esta sección se tratan solamente las reacciones del tipo iongamma las cuales son generadoras de radiación electromagnética.

#### 1.4.6 Procesos de aniquilación.

Cuando una partícula y su antipartícula chocan puede desaparecer la masa de las dos y transformarse en dos fotones [Eisberg]. La suma de las energías de los fotones emitidos es igual a la energía relativista total de la partícula y la antipartícula. Los fotones son emitidos en direcciones que permiten la conservación del momento. El caso más típico de este procurro es la aniquilación de un electrón con un positrón. En este caso la energía mínima esperada para los fotones emitidos se da si las dos partículas se encuentren en reposo. Así, para la conservación del momento se tendrían dos fotones con frecuencias v iguales, pues  $p_1 = p_2$  que implica que  $hv_1/c = hv_2/c$ . De la conservación de la energía se tiene  $m_0c^2 + m_0c^2 = hv + hv = 2hv$ , donde  $m_0$  es la masa en reposo del electrón. En consecuencia se tiene que la energía mínima del fotón producido en la aniquilación de un electrón con un positrón es de  $hv = m_0c^2 = 0.51$  MeV.

#### Referencias

[Alonso] M. Alonso y E. Finn, Fisica, volumen 3, Addison-Wesley Iberoamericana, México, D.F., 1986.

[Bransden] B.H. Bransden y C.J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, Longman Scientific & Technical, Inglaterra, 1983.

[Eisberg] R. Eisberg y R. Resnick, Fisica Cuántica, Editorial Limusa, Mexico 1978.

[Eyges] L. Eyges, The Classical Electromagnetic Field, Dover Publications, Inc., N.Y., 1972.

[Feynman] R. Feynman, R.B. Leighton y M. Sands; *Fisica*, *volumen 11*: Electromagnetismo y materia, Addison-Wesley Iberoamericana, México, 1987.

[Gasiorowicz] S. Gasiorowicz, Quantum Physics, John Wiley & Sons, N.Y. 1974.

[Jackson] J.D. Jackson, Classical Eletrodynamics, segunda edición, John-Wiley & Sons, N.Y., 1975.

[Longair] M.S. Longair, *High Energy Astrophysics*, volumen 1, segunda edición, Cambridge University Press, N.Y., 1992.

[Mitchell] I.V. Mitchell y J.F. Ziegler, *Ion Induced X-rays*, en Ion Handbook for Material Analysis, Editado por J.W. Mayer y E. Rimini, Academic Press, N.Y. 1977.

[Morales] P. Morales Vegara, Análisis de la radiación emitida durante la colisión ion-átomo en el intervalo de energía de 1 MeV - 3 MeV, Tesis de licienciatura, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, 1998.

[Reitz] J.R. Reitz, F.J. Milford y R.W. Christy, Fundamentos de teoría electromagnética, tercera edición, Addison-Wesley Iberoamericana, México, 1986.

[Skoog] Skoog y Leary, Analisis instrumental, cuarta edición, McGraw Hill, México, 1991, pagina 202.

# CAPÍTULO 2

## INTERACCIÓN DE LOS RAYOS X Y GAMMAS CON LA MATERIA

En términos generales los fotones al interaccionar con la materia sufren dispersión, esto es, se produce un cambio en su dirección, en su frecuencia o son absorbidos por la materia. La descripción de esta interacción puede hacerse de dos formas dependiendo de la energía de los rayos X y gamma: a) considerando a la radiación como partículas si tienen alta energía, o en caso contrario, b) tratándolas como ondas electromagnéticas. Dentro del primer caso se encuentran el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton y la producción de pares, en tanto que para el segundo se presenta la dispersión de Rayleigh y la de Thomson. A continuación se mencionan estos procesos de dispersión que sufren los rayos X y gamma.

#### 2.1 Efecto fotoeléctrico.

Es el proceso mediante el cual un fotón al incidir sobre un átomo es absorbido completamente por uno de los electrones y es expulsado del átomo. En este proceso el fotón desaparece y se emite un electrón llamado fotoelectrón. El proceso puede representarse como:

$$\gamma + (\text{átomo}) \rightarrow (\text{átomo}) + e$$

donde (átomo)<sup>\*</sup> se refiere a que éste se encuentra ionizado y en un estado excitado. La energía E del electrón emitido es:

$$E = \hbar\omega - \hbar\omega_0 = \hbar\omega - E_B \tag{2.1}$$

donde  $\hbar\omega_0 = E_B$  es la energía necesaria para extraer un electrón, es decir, la energía de ligadura. Para que se pueda producir el efecto fotoeléctrico es necesario que la energía  $h\nu$  del fotón sea igual o mayor que  $\hbar\omega_0$ pues de lo contrario la energía sería insuficiente para expulsar al electrón del átomo. Es conveniente recalcar que el efecto fotoeléctrico solamente ocurre cuando el electrón se encuentra ligado a un átomo, molécula o sólido. Esta condición de que el electrón esté ligado es para que se conserve el momento total en la colisión del fotón con el electrón. El excedente de momento se lo lleva el átomo, el cual al ser mucho más pesado que el electrón prácticamente no cambia su velocidad. Una vez que se ha creado la vacante por la emisión del fotoelectrón, el átomo vuelve a su estado base por medio de una transición electrónica y libera un fotón o un electrón Auger, tal como se menciona en la sección 1.4.1.

El efecto fotoeléctrico se puede ver como el efecto inverso de la emisión de radiación. A partir de la razón de transición de este proceso d ada por la ecuación (1.56) para un fotón, se puede sacar la sección e ficaz de dispersión emisión de un fotoelectrón dentro del ángulo sólido  $d\Omega$ .

En el caso de la interacción del fotón con la capa K, la sección eficaz se evalúa utilizando las funciones de onda  $\phi_K$  para un electrón ligado a la capa K y  $\phi_{lib}$  para un electrón libre. De esta manera se tiene que la sección eficaz de la emisión de un electrón por efecto fotoeléctrico es [Gasiorowicz]:

$$\frac{d \sigma_F^K}{d \Omega} = \frac{32\sqrt{2} Z^5 \alpha^8 a_0 (E/mc^2)^{1/2} \operatorname{sen}^2 \theta}{\left[ (\alpha Z)^2 + \frac{2E}{mc^2} \left( 1 - \frac{v_e}{c} \cos \theta \right) \right]^4}$$
(2.2)

donde  $\alpha = e^2/hc$  es la constante de estructura fina,  $a_0$  es el radio a tómico de Bohr, *E* es la energía del fotoelectrón dada por la ecuación (2.1),  $\theta$  es el ángulo de emisión del fotoelectrón con respecto a la dirección del fotón incidente. La sección total fotoeléctrica para la capa K se obtiene integrando sobre el ángulo sólido. Si la velocidad del fotoelectrón no es relativista entonces el denominador a la cuarta potencia en la ecuación (2.2) puede desarrollarse en serie de potencias, de tal manera que la sección fotoeléctrica total para la capa K puede escribirse como [Bransden]:

$$\sigma_{F}^{K} = \frac{256 \pi}{3} \alpha Z^{-2} \left( \frac{|E_{K}|}{\hbar \omega} \right)^{7/2} a_{0}^{2}$$
(2.3)

donde  $E_{\kappa}$  es la energía de ligadura del electrón a la capa K.

De manera análoga pueden sacarse las secciones para las otras capas atómicas. De esta manera puede verse que la sección fotoeléctrica se puede escribir como la contribución de las secciones de cada una de las capas K, L, M,..., esto es:

$$\sigma_F = \sigma_F^K + \sigma_F^L + \sigma_F^M + \dots$$
 (2.4)

La contribución de cada capa i = K, L, M,... es tomada en cuenta solamente si la energía de la radiación incidente es mayor que la energía de ligadura  $E_i$  del electrón en esa capa. Esto da como resultado que para fotones con energía  $\hbar\omega$  poco mayores que  $E_i$  la sección aumente bruscamente a manera de saltos en estas energías. Estos saltos aumentan la probabilidad de que el electrón absorba al fotón incidente, por lo que a estos saltos se les conoce como bordes de absorción.

Otras estimaciones teóricas simplificadas no relativistas que utilizan un modelo hidrogenoide de Bohr indican que las secciones totales del efecto fotoeléctrico para fotones con energía mayor que un borde de absorción de energía  $E_a$  correspondiente a una subcapa atómica que se puede expresar de la forma [Mitchell]:

$$\sigma_F = \frac{4\pi\hbar e^2}{mc} (\hbar\omega)^{-3} \sum_{j=1}^q Z_j E_j^2$$
(2.5)

donde  $\hbar\omega$  es la energía del fotón incidente,  $Z_j$  es el número de electrones en el nivel *j* y  $E_j$  es la energía de ligadura de la capa atómica *i*. La suma corre sobre todas las capas atómicas con energías  $E_j$  menores que  $\hbar\omega$ . Se observa de la relación (2.1), que a mayor energía del fotón incidente mayor es la energía transferida al electrón y por tanto la sección fotoeléctrica irá disminuyendo.

#### 2.2 Dispersión Compton.

Este proceso se da cuando un fotón interacciona con un electrón libre dando como resultado la dispersión de ambas partículas. En esta colisión el fotón transfiere parte de su energía al electrón conservándose el momento y la energía relativista total. De esta manera, el fotón dispersado resulta con una energía menor (una mayor longitud de onda). El efecto Compton puede representarse por:

$$\gamma_i + e_i \rightarrow e_f + \gamma_f$$

Suponiendo que el electrón libre se encontraba inicialmente en reposo luego entonces debe de cumplirse la conservación del momento y de la energía [Alonso, Eisberg]:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{p}_e \tag{2.6}$$

$$h\nu + m_e c^2 = h\nu' + \sqrt{p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4}$$
(2.7)

donde p y p' son los momentos del fotón antes y después de la colisión (ver ecuación 1.2),  $\mathbf{p}_e$  es el momento del electrón después de la colisión, v y v' son las frecuencias del fotón antes y después de la colisión,  $m_e$  es la masa en reposo del electrón. Si  $\theta$  es el ángulo de dispersión del fotón con respecto a su trayectoria original y despejando  $p_e$  de las ecuaciones (2.6) y (2.7), se tiene que:

$$\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} = \frac{h}{m_e c^2} (1 - \cos\theta)$$
(2.8)

la cual nos relaciona el cambio en la frecuencia del fotón con el ángulo de dispersión. Es conveniente señalar que el electrón libre no puede absorber toda la energía del fotón como en el caso del efecto fotoeléctrico porque la conservación de las ecuaciones (2.6) y (2.7) se violaría. De esta manera, para que el efecto Compton pueda tener lugar el electrón no puede estar muy ligado al átomo. En el caso del efecto fotoeléctrico la energía del fotón absorbido es compartida por el electrón y el átomo, la molécula o la red del sólido a la cual el electrón estaba acoplado, permitiendo la no violación de los principios de conservación.

Como en este caso se tiene un proceso que involucra dos fotones, entonces el potencial perturbativo V(t) debe de considerar al término cuadrático en A(r,t), de tal manera que la ecuación (1.48) se cambia por:

$$V(t) = \frac{e}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{r}, t)$$
(2.9)

En este caso el cálculo de la sección eficaz utilizando el potencial anterior conduce a la fórmula de Klein-Nishina [Gasiorowicz]:

$$\sigma_{c} = 2\pi \left(\frac{e^{2}}{mc^{2}}\right)^{2} \left\{ \frac{1+x}{x^{2}} \left[ \frac{2(1+x)}{1+2x} - \frac{1}{x} \ln(1+2x) \right] + \frac{1}{2x} \ln(1+2x) - \frac{1+3x}{(1+2x)^{2}} \right\}$$
(2.10)

donde

$$x = \frac{\hbar\omega}{mc^2}$$
(2.11)

Para el caso de las energías de rayos X sus frecuencias pueden considerarse como pequeñas y la sección anterior se aproxima de muy buena manera a:

$$\sigma_{c} = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^{2}}{mc^{2}}\right)^{2} (1-2x)$$
(2.12)

2-3

#### 2.3 Producción de pares.

La producción de pares se puede entender como el proceso opuesto al de la aniquilación de partículas (ver sección 1.4.6). En este caso un fotón de alta energía interacciona con el campo eléctrico de un núcleo, dando como resultado la producción de dos partículas con cargas opuestas. Los electrones son las partículas más fáciles de producir pues son las que tienen menor masa. La energía mínima para producir un par es la de dos electrones en reposo, es decir 1.02 MeV. Para fotones con energías menores que la anterior no podrán producirse pares de partículas. Si la energía del fotón es muy grande puede darse entonces la producción de un protón y un antiprotón. En términos generales este proceso de producción de pares puede representarse por:

$$\gamma$$
 + (núcleo)  $\rightarrow e^- + e^+$  + (núcleo)

Para fotones de energías intermedias se encuentra que la sección de producción de pares puede expresarse como [Longair]:

$$\sigma_{p} = \alpha R_{e}^{2} Z_{e}^{2} \left[ \frac{28}{9} \log \left( \frac{2\hbar\omega}{m_{e}c^{2}} \right) - \frac{218}{27} \right]$$
(2.13)

donde a es la constante de estructura fina y Re es el radio clásico del electrón.

#### 2.4 Dispersión de Thomson.

En las tres secciones anteriores se explicaron los procesos en los cuales la radiación electromagnética al interaccionar c on la materia es considerada c omo u na partícula. En el c aso d e fotones d e baja e nergía la descripción de onda electromagnética es el modelo más adecuado para describir su dispersión. Cuando una onda electromagnética incide sobre un átomo o molécula, el campo eléctrico de la onda hace que los electrones entren en oscilación con el campo eléctrico y por lo tanto comiencen a radiar. El movimiento de los electrones debido al campo eléctrico de la onda incidente produce un momento dipolar eléctrico oscilante  $\mathbf{p}(t) = \mathbf{er}(t)$ . Así pues, la radiación incidente sufre una dispersión debido a la inducción de momentos dipolares oscilantes los cuales radian en todas direcciones y su principal contribución está dada por la radiación inducida de manera dipolar.

En este caso la sección eficaz de dispersión de ondas electromagnéticas se define como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{Energía radiada por unidad de tiempo y ángulo sólido}}{\text{Energía incidente por unidad de área y tiempo}}$$
(2.14)

La energía incidente por unidad de área y tiempo es igual a la magnitud del vector de Poynting  $S_0$  dado a partir de la ecuación (1.18) para la radiación incidente. La energía radiada por unidad de tiempo y ángulo sólido se obtendría a partir de la ecuación (1.20) como:

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{1}{S_0} \frac{d^2 W}{dt d\Omega} = r^2 S$$
(2.15)

donde S es la magnitud del vector de Poynting de la radiación inducida. De esta manera la sección eficaz es igual a:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{S_0} \frac{d^2 W}{d t d \Omega} = \frac{r^2 S}{S_0}$$
(2.16)

Si la onda incidente es plana entonces de acuerdo con la ecuación (1.24) se tiene que:

$$S_0 = \varepsilon_0 c E_0^2 = \varepsilon_0 c E_0^2 \cos^2 \omega_0 t \tag{2.17}$$

en tanto que de la ecuación (1.33) se tiene que en la aproximación dipolar eléctrica:

$$S = \left| \frac{\mathbf{\ddot{p}}^{2} \sec^{2} \theta}{16 \pi^{2} \varepsilon_{0} c^{3} r^{2}} \frac{\mathbf{r}}{r} \right| = \frac{\mathbf{\ddot{p}}^{2} \sec^{2} \theta}{16 \pi^{2} \varepsilon_{0} c^{3} r^{2}}$$
(2.18)

donde  $\theta$  es el ángulo entre **p** y **r**. Sustituyendo estas dos últimas ecuaciones en (2.16) se tiene que la sección de dispersión en la aproximación dipolar queda como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\mathbf{\ddot{p}}^2 \operatorname{sen}^2 \theta}{16\pi^2 \varepsilon_0^2 c^4 \mathbf{E}_0^2 \cos^2 \omega_0 t}$$
(2.19)

En el caso de que la onda electromagnética incida sobre un electrón libre a la dispersión producida se le conoce como dispersión Thomson. En la figura 2.1 se ilustra este proceso suponiendo que se tiene una onda plana polarizada en la dirección Z y que incide sobre un electrón en la dirección Y. Si el haz incidente tiene una longitud de onda pequeña puede permitir considerar a los electrones menos ligados del átomo como libres. Considere que el electrón bibre se encuentra inicialmente en el origen de coordenadas. En este caso la ecuación de movimiento del electrón bajo la acción del campo eléctrico de una onda semejante al utilizado en la sección anterior es:

$$m_e \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{E}_0 \cos \omega_0 t \tag{2.20}$$

de modo que:

$$\mathbf{r}(t) = \frac{e}{m_e \omega_0^2} \mathbf{E}_0 \cos \omega_0 t \tag{2.21}$$

Por lo anterior se inducirá un momento dipolar eléctrico tal que:

$$\mathbf{p}(t) = \frac{e^2}{m_e \omega_0^2} \mathbf{E}_0 \cos \omega_0 t \qquad \qquad \mathbf{y} \qquad \qquad \mathbf{p}^2(t) = \frac{e^4}{m_e^2} \mathbf{E}_0^2 \cos^2 \omega_0 t \qquad (2.22)$$

Sustituyendo en la ecuación (2.19) se tiene que la sección eficaz de dispersión Thomson queda como:

$$\frac{d\sigma_T}{d\Omega} = \frac{1}{16\pi^2 \varepsilon_0^2} \left(\frac{e^4}{m^2 c^4}\right) sen^2 \theta = R_*^2 sen^2 \theta \qquad (2.23)$$

2-5

donde

$$R_e = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_e c^2} = 2.81 \times 10^{-15} \,\mathrm{m.} \tag{2.24}$$

es el llamado radio clásico del electrón. Para fines prácticos resulta mucho más conveniente expresar la sección diferencial de dispersión de Thomson en términos del ángulo de dispersión  $\alpha$  definido como el ángulo existente entre la dirección del punto de observación y la dirección de la radiación incidente. Repitiendo el desarrollo anterior en términos del ángulo  $\alpha$  [Reitz] se tiene que:



Figura 2.1 Una onda plana polarizada en la dirección z incidente en la dirección y sobre un electrón.

Los cálculos anteriores se realizaron suponiendo radiación incidente polarizada. En el caso de que la radiación incidente no se encuentre polarizada entonces se toma el valor promedio del vector de poynting radiado, de tal manera que conduce a:

$$\frac{d\sigma_T}{d\Omega} = R_e \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \alpha). \tag{2.26}$$

La sección total de Thomson se obtiene integrando esta última ecuación sobre todo el ángulo sólido de tal manera que:

$$\sigma_{\tau} = \frac{8\pi}{3} R_{e}^{2} \quad . \tag{2.27}$$

Esta sección es proporcional al tamaño del radio clásico del electrón el cual es muy pequeño en comparación con el tamaño del átomo y es la razón de que los rayos X sean penetrantes.

#### 2.5 Dispersión de Rayleigh.

Cuando la radiación incide sobre electrones ligados a los átomos se tiene la llamada dispersión de Rayleigh, ésta se da por lo regular a longitudes de onda largas para las cuales su energía no permite considerar a los electrones ligados como libres.

Para tratar el efecto de la radiación sobre un electrón ligado se considera el modelo atómico de resortes, en el cual se supone que cada electrón dentro del átomo se mueve como un oscilador armónico con frecuencia natural  $\omega$ . La ecuación de movimiento de este electrón ligado bajo la acción de un campo eléctrico oscilante con una frecuencia  $\omega_a$ , amplitud  $E_a$  y polarizado en la dirección r es:

$$m_e \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} + \gamma \frac{d \mathbf{r}}{dt} + m_e \omega^2 \mathbf{r} = e \mathbf{E}_0 \cos \omega_0 t \qquad (2.28)$$

donde y es una constante de amortiguamiento del electrón dentro del átomo. De esta manera el electrón comenzará a oscilar de acuerdo con:

$$\mathbf{r}(t) = \frac{e}{m_e(\omega^2 - \omega_0^2 + \gamma/m_e)} \mathbf{E}_0 \cos \omega_0 t$$
(2.29)

Procediendo de manera a náloga a como se hizo en la sección anterior se llega a que la sección eficaz de dispersión de Rayleigh en la aproximación dipolar eléctrica debida a un electrón i-ésimo ligado a la molécula es:

$$\frac{d\sigma_{R}}{d\Omega} = \frac{1}{2} R_{e}^{2} \left(1 + \cos^{2}\alpha\right) \frac{1}{\left(\omega_{l}^{2} - \omega_{0}^{2} + \gamma_{l}/m_{e}\right)^{2}}$$
(2.30)

Como la dispersión debida a toda la molécula o átomo debe de contener las contribuciones de cada uno de sus N electrones, entonces la sección de dispersión de la molécula es igual a la suma de todas las dispersiones producidas por cada electrón, es decir:

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \sum_{i=1}^{N} \left( \frac{d\sigma_R}{d\Omega} \right)_i = \frac{1}{2} R_e^2 \left( 1 + \cos^2 \alpha \right) \sum_{i=1}^{N} \left( \omega_i^2 - \omega_0^2 + \frac{\gamma_i}{m_e} \right)^{-2}$$
(2.31)

De esta última expresión puede o bservarse que la radiación incidente es ampliamente dispersada si  $\omega_0$  es semejante a alguna de las  $\omega_i$ .

De una manera más general, el momento dipolar eléctrico inducido en todo un átomo o molécula está dado en términos de una función de forma  $F(\omega_0)$  que depende de los r(t) de cada uno de los electrones y su distribución dentro de la molécula. Con ayuda de este factor de forma el momento dipolar inducido en un átomo o molécula puede expresarse como:

$$\mathbf{p}(t) = e^2 \mathbf{F}(\omega_0) \cos \omega_0 t \tag{2.32}$$

2-7

de tal manera que:
$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{1}{2} \frac{R_e^2 \left(1 + \cos^2 \alpha\right) \mathbf{F}(\omega_0)^2}{\left(2.33\right)}$$

El factor de forma es característico de cada molécula en particular y debe de conocerse de antemano para calcular la sección de dispersión. En el caso del modelo atómico de resortes se tiene que:

$$\mathbf{F}(\omega_0)^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(\omega_i^2 - \omega_0^2 + \gamma_i / m_e\right)^{-2}$$
(2.34)

Una mejor estimación de estas secciones se obtiene incluyendo el comportamiento cuántico de las moléculas. De esta manera la sección eficaz de dispersión se puede expresar como [Brown]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} R_e^2 \left( 1 + \cos^2 \alpha \right) \left| F(k) \right|^2$$
(2.35)

donde F(k) es el factor atómico de forma dado como:

$$F(k) = \sum_{i=1}^{N} \left\langle \psi_{0} \right| \exp\left(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\right) \left| \psi_{0} \right\rangle$$
(2.36)

y considerando que hk es el momento transferido al electrón por la onda electromagnética dado por:

$$k = 4\pi \left( \sin \frac{\alpha}{2} \right) / \lambda \tag{2.37}$$

donde  $\lambda$  es la longitud de onda del fotón incidente. La exactitud y precisión de las secciones obtenidas de esta manera depende directamente de la calidad del factor de forma que a su vez depende de las funciones de onda émpleadas para cada electrón dentro del átomo. Las funciones de onda que mejores resultados dan son las obtenidas por medio de los métodos autoconsistentes de Hartree-Fock-Slater.

### 2.6 Atenuación.

Un haz paralelo de rayos X o gammas se define como un conjunto de estos fotones que se mueven en una misma dirección. Su intensidad l está dada como el flujo de fotones a través del área transversal del haz. Cuando un haz de fotones monoenergéticos atraviesa un material estos fotones van interaccionando con los átomos del material de acuerdo con alguno de los procesos descritos en las secciones anteriores. La dispersión producida por estas interacciones va reduciendo la intensidad del haz. Es decir, hay una atenuación en su intensidad original. Esto se ilustra en la figura 2.2 donde un haz de fotones con intensidad  $I_0$  incide sobre un material de espesor x. Después de atravesar el material el haz de fotones sale con una intensidad I tal que  $I < I_0$ .

La a tenuación de un haz es proporcional a la probabilidad de que o curra la dispersión de un fotón. Si el material está compuesto por un sólo elemento y distribuido uniformemente, entonces una medida de la probabilidad de ocurrencia de la dispersión de un fotón está dada por el coeficiente lineal de atenuación. Este coeficiente es la densidad N de átomos en el material multiplicada por la sección eficaz total de dispersión:

$$\mu = N \sigma_{TOT} = N (\sigma_R + \sigma_T + \sigma_F + \sigma_C + \sigma_P)$$
(2.38)

donde las  $\sigma_i$  corresponden, respectivamente, a las secciones totales de dispersión de Rayleigh, Thomson, fotoeléctrica, Compton y de producción de pares. A las secciones  $\sigma_R$  y  $\sigma_T$  se les conoce como de dispersión

elástica pues el fotón dispersado mantiene la misma energía, en tanto que a las otras secciones se les conoce como inelásticas. La dispersión Thomson y la dispersión Compton son debidas a electrones libres, pero como en la primera se conserva la frecuencia de la radiación incidente y en la segunda no, entonces se suele denotar a al dispersión Thomson como coherente y a la Compton como incoherente.



Figura 2.2 Efecto de la atenuación de un haz de fotones de intensidad  $I_0$  después de atravesar un medio material de espesor x.

La densidad atómica del medio se obtiene a partir de la densidad de masa p por medio de:

$$N = \frac{N_0}{A} \rho$$
 (2.39)

donde  $N_0 = 6.0225 \times 10^{23}$  átomos/mol es el número de Avogadro y A es la masa atómica del elemento que constituye al medio. La N se suele dar en unidades de átomo/cm<sup>3</sup> y  $\rho$  en g/cm<sup>3</sup>. Comúnmente suelen darse los coeficientes de atenuación másicos definidos como:

$$\frac{\mu}{\rho} = \frac{N_0}{A} \sigma_{TOT}$$
(2.40)

cuyas unidades son [  $cm^2/g$  ]. Los coeficientes másicos de atenuación son ampliamente utilizados porque lo que se mide experimentalmente son masas y no número de átomos. En este trabajo los coeficientes de atenuación se indicarán simplemente como  $\mu$  indistintamente de si son lineales o másicos.

En las figuras 2.3 a 2.5 se muestran respectivamente los coeficientes de atenuación para fotones con energías entre 1 keV y 10000 keV en los elementos silicio, germanio y oro para cada uno de los procesos de dispersión. A sí en estas figuras se muestran las contribuciones de la dispersión Thomson o coherente, la dispersión Compton, al efecto fotoeléctrico y a la producción de pares. Con la línea continua gruesa se muestra el resultado total de la suma de estos efectos.

Se tiene que la atenuación dI en la intensidad del haz I al atravesar una distancia dx dentro del material es directamente proporcional a su intensidad por la probabilidad de que sea dispersado. Esto es que:

$$\frac{dI}{dx} = -\mu I \tag{2.41}$$

De esta ecuación se tiene que la intensidad del haz transmitido después de atravesar una distancia x dentro del material es:

$$I = I_0 e^{-\mu x} = I_0 \exp\left\{-\sigma_{ror} \frac{N_0}{A}\rho x\right\}$$
(2.42)

donde  $I_{0}$  es la intensidad del haz inicialmente. Luego la cantidad de l'otones P que interaccionan con el material es aquella que no logró atravesar al material de espesor x, es decir:

$$P = I_0 - I = I_0 \left( 1 - e^{-\mu x} \right)$$
(2.43)

De la expresión a nterior s e encuentra que la cantidad de fotones que interaccionan con el material en un espesor dx a una profundidad x de la superficie es:

$$dP = I_0 \mu e^{-\mu x} dx$$
 (2.44)

Considerando que se tiene un absorbedor homogéneo compuesto por dos tipos de átomos A y B en moléculas químicas de la forma  $A_n B_m$  entonces la sección de eficaz de dispersión total por molécula  $\sigma_{TOT}^{A_n B_m}$  esta dada por medio de la ley de Bragg;

$$\sigma_{TOT}^{A_n B_m} = n \, \sigma_{TOT}^A + m \, \sigma_{TOT}^B \tag{2.45}$$

donde  $\sigma_{TOT}^A$  y  $\sigma_{TOT}^B$  son respectivamente las secciones totales para los átomos del tipo A y B. En este caso, el coeficiente de atenuación  $\mu$  se obtiene en forma semejante al caso de un solo elemento, ecuación (2.38), pero ahora N se tiene que considerar como la densidad molecular, es decir, moléculas/cm<sup>3</sup>. Como un ejemplo de lo anterior se puede s uponer que se tiene u n material compuesto por fluoruro de calcio cuya fórmula química es CaF<sub>2</sub>. En este caso la sección total de dispersión es de acuerdo con (2.45):

$$\sigma_{TOT}^{CaF_2} = \sigma_{TOT}^{Ca} + 2\sigma_{TOT}^F$$
(2.46)

Luego se tiene que:

$$\frac{\mu^{CaF_2}}{\rho_{CaF_2}} = \frac{N_0}{A_{CaF_2}} \sigma_{TOT}^{CaF_2}$$
(2.47)

donde  $\mu^{C_{aF_2}}$ ,  $\rho_{C_{aF_2}}$  y  $A_{C_{aF_2}}$  corresponden respectivamente al coeficiente de atenuación, la densidad másica y el peso molecular del fluoruro de calcio.

Como puede observarse de las figuras 2.3 a 2.5 se tiene que para fotones de rayos X y gammas de baja energía ( $E_x < 100$  keV) la sección fotoeléctrica domina ampliamente en el proceso de atenuación, por lo que en muchos casos (no en todos) para estos fotones puede aproximarse el coeficiente  $\mu$  tomando solamente la sección fotoeléctrica. De esta manera la ecuación (2.38) quedaría como:

$$\mu \approx N\sigma_F \tag{2.48}$$



Figura 2.3 Coeficientes de atenuación del silicio para cada uno de los diversos procesos de dispersión.

Tomando en cuenta a las contribuciones del efecto fotoeléctrico debidas a la interacción de los electrones de las diferentes capas atómicas K, L, M,... se tiene que la sección total de efecto fotoeléctrico puede escribirse como la suma de las secciones para cada capa, es decir:

$$\sigma_F = \sigma_F^K + \sigma_F^L + \sigma_F^M + \dots \tag{2.49}$$

Esto indica que el coeficiente de atenuación variará en este intervalo de energías de la misma manera que la sección fotoeléctrica y por lo tanto es muy importante tener en cuenta los efectos de los bordes de absorción indicados en la sección 2.1. En las figuras 2.3 a 2.5 se ha indicado respectivamente con las letras K, L y M a los saltos en el coeficiente de atenuación debidos a los bordes de absorción para cada capa atómica.





Figura 2.4 Coeficientes de atenuación del germanio para cada uno de los diversos procesos de dispersión.

Los coeficientes de atenuación por lo general se obtienen de tablas [Veigele, Theisen, Henke] o por medio de programas de computadora [Hubbell, Orlie], los cuales contienen valores experimentales o semiempíricos de los coeficientes de atenuación para varias energías de rayos X en diversos elementos y materiales. Tomando como modelo la expresión dada por la ecuación (2.5) para la sección fotoeléctrica se tiene que las expresiones semiempíricas ajustan a valores experimentales de cada elemento funciones de la forma:

$$\mu / \rho = C Z^{a} E^{-b} \tag{2.50}$$

donde C, a y b son constantes ajustadas a valores experimentales, Z es el número atómico del elemento atenuador y E la energía del fotón. Esta expresión es válida solamente para valores de E comprendidos entre dos bordes de absorción consecutivos y no toma en cuenta los e fectos de borde. El motivo de utilizar la función dada por la ecuación (2.50) es porque contiene las bases teóricas de la ecuación (2.5) haciendo las siguientes consideraciones :



$$E_j^2 = \left(\frac{R(Z-\sigma_j^*)^2}{n_j^2}\right)^2 \approx Z^a$$
(2.51)

$$\frac{4\pi\hbar e^2}{mc}(\hbar\omega)^{-3}Z_j = \frac{4\pi\hbar e^2}{mc}Z_j E^{-3} \approx CE^{-h}$$
(2.52)

donde la expresión para  $E_j$  corresponde a la energía de ligadura de un electrón en un átomo de tipo hidrogenoide, en la que R es la constante de Rydberg,  $n_j$  es el número cuántico principal de la subcapa j y  $\sigma_j^*$  es la constante de apantallamiento para los electrones de la subcapa j.



Figura 2.5 Coeficientes de atenuación del oro para cada uno de los diversos procesos de dispersión.



Volviendo de nuevo al hecho de que el coeficiente de atenuación para rayos X de baja energía, puede expresarse generalmente en términos de la sección fotoeléctrica de cada una de las capas atómicas, ecuaciones (2.48) y (2.49), se tiene que el coeficiente de atenuación también puede dividirse en las contribuciones debidas a la interacción con cada subcapa atómica:

$$\mu \approx N\sigma_F = N(\sigma_F^K + \sigma_F^L + \sigma_F^M + ...) = \mu_F^K + \mu_F^L + \mu_F^M + ...$$
(2.53)

Por ejemplo, el coeficiente de atenuación  $\mu_{SI}$  en el silicio para los rayos X incidentes puede dividirse en dos contribuciones: la atenuación  $\mu_{SI}^{L}$  debida a la interacción con la capa atómica K del silicio y otra  $\mu_{SI}^{LM}$  que involucra las interacciones con las capas L y M. De esta manera se puede escribir  $\mu_{SI} = \mu_{SI}^{L} + \mu_{SI}^{LM}$ .

La contribución de una determinada capa atómica al coeficiente de atenuación cerca de su borde de absorción se puede obtener experimentalmente a partir de la medida de la razón de salto en el coeficiente de absorción. La razón de salto en el borde de absorción de la capa *i* cuya energía de ligadura es  $E_i$  se define como :

$$r = \frac{\mu^+(E_i)}{\mu^-(E_i)}$$
(2.54)

donde  $\mu(E_i) \neq \mu^*(E_i)$  corresponden al coeficiente de atenuación evaluados respectivamente a una energía justamente menor y una mayor que  $E_i$ . A partir de esta razón de salto se tiene que la atenuación  $\mu_F^K$  debido al efecto fotoeléctrico en la capa K para fotones con energías un poco mayores que la del borde puede determinarse a partir de la atenuación total como:

$$\mu_F^{\kappa} = \mu_F \left( \frac{1-r}{r} \right) \tag{2.55}$$

Finalmente, si en la expresión (2.44) se sustituye (2.53) se tiene:

$$d P = I_0 \left( \mu^K + \mu^L + \mu^M + \dots \right) e^{-\mu x} dx = d P^K + d P^L + d P^M + \dots$$
(2.56)

de tal manera que la cantidad de fotones que se absorben en un espesor de material dx a una profundidad x de la superficie debido a su interacción con una capa atómica j es:

$$d P^{j} = I_{0} \mu^{j} e^{-\mu x} d x.$$
 (2.57)

Todas las expresiones expuestas en esta sección son de mucha utilidad para describir los efectos de la interacción de fotones dentro de los detectores de radiación de estado sólido que se verán en el capítulo 4.

# Referencias

[Alonso] M. Alonso y E. Finn, Fisica, volumen 3, Addison-Wesley Iberoamericana, México, D.F., 1986.

[Bransden] B.H. Bransden y C.J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, Longman Scientific & Technical, Inglaterra, 1983.

[Brown] R.T. Brown, Differential cross sections for coherent photons scattering by elements Z = 2 through Z = 26, At. Data Nucl. Data, 15 (1975) 111.

[Eisberg] R. Eisberg y R. Resnick, Física Cuántica, Editorial Limusa, Mexico 1978.

[Gasiorowicz] S. Gasiorowicz, Quantum Physics, John Wiley & Sons, N.Y. 1974.

[Mitchell] I.V. Mitchell y J.F. Ziegler, Ion Induced X-rays, en Ion Handbook for Material Analysis, Editado por J.W. Mayer y E. Rimini, Academic Press, N.Y. 1977.

[Longair] M.S. Longair, High Energy Astrophysics, volumen 1, segunda edición, Cambridge University Press, N.Y., 1992.

[Henke] B.L. Henke, E.M. Gullikson y J.C. Davis, At. Data Nucl. Data, 54 (1993) 181.

[Hubbell] M.J. Berger and J.H. Hubbell, National Bureau of Standars, Report NBSIR 87-3597, 1987.

[Orlic] 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.

[Reitz] J.R. Reitz, F.J. Milford y R.W. Christy, Fundamentos de teoría electromagnética, tercera edición, Addison-Wesley Iberoamericana, México, 1986.

[Veigele] Wm.J. Veigele, At. Data Nucl. Data, 5 (1973) 51.

[Theisen] R. Theisen y D. Vollath, Tables of X-ray Mass Attenuation Coefficients, Verlag Stahleisen M.B.H., Dusseldorf, 1967.

# **CAPÍTULO 3**

# DETECTORES DE RADIACIÓN

Los detectores son los instrumentos o dispositivos mediante los cuales se registra la radiación. Existen varios tipos de detectores y su capacidad para detectar ciertos tipos de radiación depende de las cualidades específicas de cada uno en particular. En este capítulo se indicarán las propiedades generales de los detectores cuya respuesta consiste en la producción o generación de un pulso eléctrico, por lo cual, películas fotográficas o dosímetros termoluminiscentes no son considerados en este capítulo. También se hace mayor énfasis en las propiedades de los detectores de estado sólido por lo que para los detectores de gas y de centelleo solamente se mencionan las características generales. Una explicación más detallada y completa sobre los detectores en general y sus dispositivos electrónicos asociados se encuentra en las referencias [Knoll y Ortec].

## 3.1 Modelo simplificado de operación.

En general, los detectores de radiación son dispositivos que consisten, entre otras cosas, de una región o volumen activo en medio de dos electrodos o contactos eléctricos. La radiación al interaccionar con el material de la región activa le transfiere parte o toda su energía. Así, por ejemplo, en el caso de los detectores de rayos X y gamma los procesos de interacción de esta radiación con la materia son los mismos que los señalados en el capítulo I. Cuando esta energía transferida o depositada llega a producir la ionización de los átomos entonces se liberan electrones e iones (o huecos) dentro de la región activa. El tiempo de interacción es tan pequeño (menor a unos cuantos nanosegundos) que prácticamente puede considerarse que es instantáneo. La particularidad de la región activa del detector es que la carga ahí generada por los electrones liberados puede ser colectada por medio de los dos electrodos que son conectados a una diferencia de potencial para producir un campo eléctrico que permita el movimiento de los electrones e iones en direcciones opuestas. En el caso de ausencia de campo eléctrico los electrones y los iones se recombinarían entre sí para formar átomos neutros.

De un modo simplificado, puede decirse que la respuesta del detector a la radiación consiste en la generación de u na c arga e léctrica Q d entro d el v olumen activo. E n p rimera i nstancia la c arga generada e stá d ada e n función de la energía de la radiación como:

$$Q = \frac{eE}{w}$$
(3.1)

donde E es la energía de la radiación, w la energía requerida para producir un par electrón-hueco y  $e = 1.602 \times 10^{-19}$  C es la carga fundamental del electrón. El intervalo de tiempo que se tarda en colectar toda la carga generada varía enormemente de un tipo de detector a otro. Se dirá que en un detector a ocurrido o se ha registrado un evento cuando la radiación ha producido la generación de una carga libre Q dentro de la región activa y que ha sido colectada.

Existen dos modos principales de operación de los detectores: modo de corriente y modo de pulso. En éste último la instrumentación asociada con el detector se encuentra diseñada para registrar partículas o cuantos de radiación de forma individual, en tanto que el modo de corriente se e mplea cuando se está i interesado en determinar solamente el conteo de eventos producidos en el detector. Debido a que el modo de pulso es el de uso más frecuente, éste es tratado con más detalle en la siguiente sección.

En el modo de corriente los electrodos del detector son conectados a un amperímetro o medidor de corriente eléctrica. La corriente promedio, I, generada al exponer el detector a la radiación está relacionada con la razón de conteo de eventos, r, como:

$$I = rQ = \frac{reE}{w}$$
(3.2)

El modo de corriente se utiliza cuando las razones de conteo de eventos son muy altas. Detectores utilizados en dosimetría y monitoreo de radiación usualmente operan de esta manera.

#### 3.2 Tratamiento de señales.

Como se mencionó antes, en el modo de pulso se trabaja con señales eléctricas de voltaje. En este modo de operación el detector se encuentra conectado a un circuito que permite convertir a la carga Q colectada por los electrodos del detector en u na señal eléctrica de voltaje V(t) dependiente del tiempo. E ste circuito por lo regular es el de entrada del preamplificador. Luego este voltaje se socia como el resultado de la interacción con una partícula o un cuanto de radiación de manera individual. Esta señal producida requiere de un procesamiento por medio de instrumentos electrónicos para poder extraer la información sobre la radiación que generó el pulso. El diagrama simplificado del circuito eléctrico con el que se realiza este modo de operación se representa en la Figura 3.1, donde V(t) representa el voltaje debido a la corriente eléctrica que es generada en la región activa, R es la resistencia del circuito eléctrico que registra el voltaje producido y C es la capacitancia equivalente tanto del detector en si mismo como la del circuito eléctrico.



Figura 3.1 Representación simplificada de un detector de radiación.

El tratamiento de las señales producidas se efectúa por medio de equipos electrónicos que realizan diferentes funciones las cuales pueden realizarse en módulos independientes o unidades individuales de procesamiento de pulsos. En la figura 3.2 se muestra un diagrama de los módulos utilizados típicamente en un sistema de detección sencillo que es utilizado en el modo de pulso. Estos módulos electrónicos son fabricados de acuerdo con normas o estándares internacionales. Los estándares clásicos o que mayor tiempo llevan en existencia son los conocidos como NIM (Nuclear Instrument Module) y CAMAC (Computed Automated Measurement and Control). Así pues, módulos hechos por diferentes fabricantes pueden conectarse entre sí por medio de bases con conectores conocidas como "bin". El estándar NIM es utilizado más ampliamente en las aplicaciones rutinarias de los detectores que requieren del tratamiento de pulsos a pequeña escala. Mientras que CAMAC es empleado en sistemas donde se efectúa el procesamiento de señales a gran escala y que involucran muchos detectores asociados a sistemas digitales e interfaces de computadora que requieren de operaciones lógicas. En la actualidad están apareciendo nuevos estándares para el procesamiento de señales los cuales recurren a la técnica digital DSP (Digital Signal Processors). En estos, los pulsos analógicos de salida del preamplificador son digitalizados y transferidos a computadoras donde se realiza su procesamiento con el software adecuado para cada aplicación. De esta manera se eliminan los amplificadores analógicos (ver sección 3.2.3) y los convertidores analógico a digital, ADC, (ver sección 3.2.5). Con los nuevos procesadores de las computadoras y los sistemas de transferencia de datos se puede aumentar el número de procesamiento de señales por segundo. Como ejemplo se tiene el desarrollo del Fast BUS que permite un mayor rendimiento en la transferencia de datos entre computadoras o dispositivos de almacenamiento de información. Estos sistemas tienen un muy alto rendimiento en situaciones que involucran altas tasas de conteo en experimentos multiparamétricos.

En la parte experimental de este trabajo se tiene que para el desarrollo de la espectroscopía de rayos X se utilizaron módulos electrónicos del estándar NIM. No es de interés en este trabajo entrar en el detalle sobre la comprensión exacta del funcionamiento de estos módulos electrónicos, por lo que solamente serán tratados como "cajas negras" que realizan un proceso determinado. Las funciones de los principales módulos electrónicos del estándar NIM utilizados en sistemas para espectroscopía de rayos X o partículas se muestran en las siguientes secciones.



Figura 3.2 Diagrama de bloques de los diversos módulos electrónicos para el procesamiento de señales generadas por un detector.

#### 3.2.1 Forma de pulsos.

La forma del pulso eléctrico producido en el detector V(t) que se observa entre los extremos de la resistencia R, ver figura 3.1, es el resultado de la combinación de los procesos físicos por los cuales la energía de la radiación se deposita en la región activa, y de las características inmediatas de los circuitos eléctricos asociados a los electrodos para la colección de la carga generada. Estas señales de salida son muy pequeñas, normalmente del orden de  $10^{-15}$  a  $10^{-10}$  C. En la figura 3.3a se muestra la corriente de salida producida en un detector hipotético, donde  $t_c$  es el tiempo de colección de toda la carga generada. Por lo regular  $t_c$  es del orden

de  $10^{-9}$  a  $10^{-5}$  s. De acuerdo con el análisis simple de circuitos RC [Resnick, Brophy] la forma de V(t) depende directamente de la constante de tiempo propia del circuito,  $\tau = RC$ , que indica el tiempo para el cual el capacitor C ha perdido el 63% de la carga máxima que alcanza.

Cuando  $\tau \le t_c$ , la forma del voltaje de salida tiene una forma análoga a la corriente eléctrica producida que circula a través de R tal como es colectada por los contactos eléctricos del detector. De esta manera, V(t) tiene prácticamente la misma forma que i(t). Ver figura 3.3b. Cuando  $\tau >> t_c$ , la corriente i(t) que fluye por la resistencia R es pequeña, por lo que V(t) reducirá su valor lentamente. Ver figura 3.3c. A esta parte del pulso que decae lentamente se le conoce como la cola de la señal. Al tiempo que tarda la cola de la señal en llegar a cero se le llama tiempo de decaimiento de la señal.

Las condiciones de operación con  $\tau >> t_c$  son utilizadas por los detectores empleados en a plicaciones de espectroscopía, en las cuales se requiere determinar con precisión la energía de la radiación. Es conveniente señalar que en este caso el tiempo requerido para que V(t) alcance su valor máximo es igual al tiempo de colección de carga  $t_c$  dentro del detector, lo cual no depende de los circuitos externos conectados a los contactos eléctricos. Por otro lado, el tiempo de decaimiento es determinado solamente por la constante de tiempo propia del circuito. El voltaje máximo  $V_{max}$  que alcanza V(t) está dado por:



Debido a que C es constante y por lo regular la carga Q generada depende de la energía de la radiación, las alturas de los pulsos V(t) reflejan la distribución de energías de la radiación detectada.

 $V_{max} = \frac{Q}{C}$ 



Figura 3.3 (a) Corriente generada por un detector en función del tiempo, (b) voltaje de salida en función del tiempo cuando  $\tau << t_c$ , (c) voltaje de salida en función del tiempo cuando  $\tau >> t_c$ .

# 3.2.2 Preamplificación.

Debido a lo pequeño de la cantidad de carga  $Q(10^{.15} a 10^{.10} C)$  generada en el detector y a la alta capacitancia (de 10 a 25 picofarads) del detector y su circuito asociado en modo de pulso (circuito de entrada del preamplificador), entonces se tiene que los voltajes  $V_{max}$  producidos, ecuación (3.3), son muy pequeños, del orden de milivolts. Esto resulta un inconveniente porque el "ruido electrónico" [Brophy, Malvino], que



3-4

consiste en corrientes y voltajes indeseados debidos a procesos físicos del propio circuito eléctrico y efectos externos, interfiere con la señal. Esto provoca una disminución de la razón señal-ruido y por consiguiente la pérdida de información. Por esta razón se requiere de una amplificación inicial de la señal antes de poder procesarla en los módulos electrónicos. Esto se consigue por medio de un preamplificador, cuya función primaria es extraer las señales del detector sin una degradación significativa de la razón señal-ruido, sirviendo como interfaz entre el detector y los módulos electrónicos de procesamiento de pulsos y análisis. También, una de sus funciones es servir como un transformador de impedancias para dar un buen ajuste entre el detector a los instrumentos conectados al detector. Para lograr esto, los preamplificadores deben de encontrarse localizados lo más cercano posible al detector y sus circuitos de entrada deben estar diseñados para que coincidan con las características de éste. De esta manera se reducen la capacitancia debida a cables, los efectos de señales de radiofrecuencia internas y externas, problemas de tierra (ground loops) y los efectos debidos al ruido generado por fonones y vibraciones (microphonics noise).

De acuerdo con el diagrama simplificado indicado en la figura 3.1, si el preamplificador se encuentra conectado al detector se tiene entonces que R es su resistencia de entrada y C la suma de la capacitancia del detector, la del cable que conecta al detector con el preamplificador y la capacitancia de entrada del propio preamplificador. Por lo regular el tiempo de decaimiento se busca lo más grande posible, del orden de 50 a 100 µs, de tal manera que la colección completa de carga en el detector ocurra antes de una caída significativa en el voltaje de la señal. Los voltajes de salida del preamplificador pueden calcularse a partir de la ecuación (3.3). Por ejemplo, el caso de detectores de silicio estos voltajes de salida son del orden de decenas de milivolts [Ortec].

Otra función llevada al cabo por los preamplificadores es la de proveer los medios para aplicar el voltaje de los electrodos del detector. Esto se hace así para tener el potencial de referencia de la fuente (o tierra) igual que el del preamplificador y así permitir que la señal producida por el detector vaya prácticamente en su totalidad hacia el circuito preamplificador. Esto ayuda a mejorar la razón señal-ruido del sistema de detección.

También algunos preamplificadores están provistos de una entrada señalada como "test pulse", la cual sirve para conectarse a un generador de pulsos que permita examinar al sistema electrónico de tratamiento de pulsos y utilizarla en la determinación de tiempos muertos de detección (ver sección 3.3.3).

#### 3.2.3 Amplificación.

Con la finalidad de optimizar el tratamiento de la señal analógica dada por el preamplificador se utilizan los amplificadores, cuya misión principal es proporcionar una amplificación y una forma a la señal. De esta manera se optimizan la resolución en la energía de la radiación detectada (ver sección 3.3.2) y se disminuye el riesgo de s obreponer dos pulsos sucesivos. Los amplificadores tienen g anancias ajustables, es d ecir, se pueden seleccionar factores de amplificación p ara la señal de e ntrada, transformando p ulsos del o rden de milivolts a señales de 0.1 a 10 volts.

Las señales producidas por el amplificador son por lo regular de una forma semigaussiana, la cual reduce el ancho y el tamaño de la cola de la señal, en comparación con la generada por el preamplificador. Para poder distinguir un pulso de otro se debe de procurar que el pulso se encuentre inicialmente en el voltaje de referencia para medir la amplitud de la señal (baseline o línea base) antes de que el siguiente pulso llegue al amplificador. Esto facilitará posteriormente la conversión de la señal analógica a digital (ver sección 3.2.5), permitiendo la determinación de la energía de la radiación de una manera más precisa. Así, un parámetro importante en el proceso de amplificación es el tiempo de formación de pulso (shaping time), que se define como el tiempo necesario para que la señal producida ascienda del 10% al 90% de la amplitud máxima. En la figura 3.4 se muestra esto. Este tiempo por lo general puede ser ajustado a un valor descado.

En el proceso de amplificación se suelen tener dos factores en conflicto: la conveniencia de una resolución óptima en energía y, la necesidad de poder manejar el registro de altas razones de conteo de eventos en el detector. Una buena resolución en energía se logra con anchos de pulso y tiempos de formación grandes (5 a  $12 \mu$ s), en tanto que para altas razones de conteo los anchos de pulso pequeños son mejores. De esta manera, debe de buscarse la combinación de parámetros más convenientes para que el compromiso entre estos dos factores permita una buena calidad en la información obtenida durante la detección de la radiación. Comúnmente, cuando se tiene cierto control sobre las razones de conteo del detector, estas condiciones del amplificador deben de ser restringidas.



Figura 3.4 Voltaje de salida de un amplificador. Aquí se muestra un caso en el que el tiempo de formación de pulso o "shaping time" es de 10 μs.

## 3.2.4 Discriminación de pulsos y contadores.

En muchas aplicaciones suele requerirse del análisis de radiación cuya energía es mayor que un cierto valor determinado. Para hacer esto se recurre a los discriminadores, los cuales son circuitos cuya función es permitir el paso de las señales que tengan una amplitud mayor a un limite determinado y evitar su paso si la amplitud es menor. Esto puede hacerse debido al que típicamente la amplitud de la señal generada por el amplificador es proporcional a la energía de la radiación. Usualmente, el nivel de discriminación (threshold) se escoge arriba del nivel de ruido del sistema de detección para así eliminar todas las señales indeseables.

En los casos en que se está interesado en contar solamente el número de pulsos que se presentan dentro de un intervalo de amplitudes determinado a altas razones de conteo, o bien, simplemente determinar el momento de llegada de una señal, se emplean los discriminadores reguladores (timing discriminators). En estos instrumentos las señales que tienen mayor altura que el nivel de discriminación son procesadas y convertidas a pulsos lógicos estándar a la salida del discriminador. Otro tipo de módulo electrónico muy utilizado es el analizador monocanal, SCA (single channel analyzer), el cual produce un pulso lógicos i la amplitud de la señal de entrada está dentro del intervalo acotado entre dos niveles de discriminación: uno de nivel inferior y uno superior. Al intervalo de amplitudes que permite la generación de los pulsos lógicos también se le suele llamar canal. Los niveles de discriminación se ajustan dependiendo del intervalo de energías que se quiera considerar.

Para poder llevar el registro del número de eventos seleccionados que han ocurrido en el detector durante un tiempo dado se recurre a los contadores. Éstos son dispositivos que reciben los pulsos emitidos por los discriminadores o analizadores monocanal y los van contando durante el tiempo que se encuentren en

)È ORIGEN

3-6

operación. El tiempo que dura el conteo puede seleccionarse de varios modos, ya sea fijando un tiempo determinado o que el sistema cuente hasta que se haya concluido alguna condición particular. Después de un periodo de conteo la cuenta final expresada por el contador puede ser impresa, almacenada o borrada para comenzar a contar de nuevo.

### 3.2.5 Conversión de pulsos analógicos a digitales.

La conversión de señales o pulsos analógicos a formas digitales se lleva al cabo por medio de dispositivos comúnmente llamados ADC, (Analog-Digital Converter). El modo de operación de los ADC consiste en medir la amplitud máxima de un pulso analógico y, dependiendo del intervalo de valores entre los que se encuentre la medida, ésta es convertida a un número digital. Así, la salida de este valor digital es proporcional a la amplitud de la señal analógica y los resultados del ADC pueden ser enviados para alimentar dispositivos electrónicos de memoria o computadoras. A cada uno de estos intervalos de amplitudes a los que se les asocia una señal digital se les llama también "canales" en forma análoga con el SCA.

Existen tres tipos de procedimientos para efectuar la conversión analógica a digital [Ortec]: el de "flash", el de Wilkinson y el de aproximación sucesiva. Los dos últimos son los utilizados para sistemas de espectroscopía de alta resolución en modo de pulso. El proceso de Wilkinson es el más utilizado para los ADC dentro del estándar NIM y será al que se le pondrá más atención.

En general, la forma de operación de un ADC en el modo de Wilkinson se describe de la siguiente manera: Inicialmente la puerta de entrada del ADC se encuentra abierta permitiendo el paso de una señal desde el momento que é sta comienza a l legar. Cuando la señal de entrada ha a lcanzado su máximo y comienza a disminuir, entonces la puerta se cierra. Así, la puerta permanece abierta solamente durante el tiempo de levantamiento del pulso  $T_p$ , durante este tiempo se va cargando un capacitor cuyo voltaje final es igual a la amplitud máxima de la señal. Una vez cerrada la puerta de entrada se descarga el capacitor. Un sistema de reloj o de medición de tiempo cuenta el tiempo de descarga del capacitor. Este reloj opera contando el número de pulsos de duración fija  $\tau_0$  y de frecuencia  $f_c$  producidos por un generador mientras se va descargando el capacitor. Una vez descargado el capacitor el numero total  $n_c$  de pulsos de duración  $\tau_0$  que haya contado el reloj es directamente proporcional al tiempo de descarga  $T_w$ , el cual a su vez es proporcional al voltaje de la señal de entrada. De esta manera, al final se le asocia a la señal analógica de entrada el valor digital del número  $n_c$ . Al número  $n_c$  se le suele llamar "número de canal".

Una vez que el capacitor del ADC se ha descargado y ha transcurrido el tiempo de conversión  $T_{CONV} = n_c / f_c$ , entonces la puerta de entrada se vuelve a abrir para permitir el paso de la siguiente señal que va llegando. Durante el tiempo que la puerta permanece cerrada se pierden las señales que van llegando, pues estas no van a ser procesadas. Para evitar que el ADC se encuentre desperdiciando tiempo analizando señales debidas a ruido electrónico, las señales antes de llegar a la puerta de entrada pasan por un discriminador cuyo nivel de discriminación se ajusta a un valor mayor que el del ruido. Los fabricantes por su parte han estado produciendo nuevos circuitos en los ADC que permiten reducir el tiempo de procesamiento de las señales.

La ganancia de conversión de un ADC es el parámetro que especifica el número de canales sobre los cuales se van a repartir las diferentes amplitudes de voltaje de las señales análogas. Esto se puede entender mejor a partir del siguiente ejemplo: En el caso del estándar NIM, el voltaje más grande que se puede obtener con un amplificador es de 10 V. Si la ganancia de conversión del ADC es de 2048 canales, entonces al pulso de 10 V le corresponderá el canal 2048. Es decir, el ADC le asociará un canal a cada pulso análogo en intervalos enteros de 4.88 mV.

3-7

## 3.2.6 Analizador multicanal.

El analizador multicanal o MCA (multichannel analyzer) es el instrumento empleado para la clasificación y conteo de la información digital producida en el ADC. De una manera sencilla, el MCA puede describirse como un dispositivo que consiste en una pantalla donde se muestra un histograma del proceso de conteo. Esto es, en el eje X de un espacio cartesiano se grafican las energías posibles de la radiación contra el número de veces que cada energía es registrada por el detector en el eje Y. De esta manera puede determinarse la distribución en energías de los cuantos de radiación emitidos por una fuente que son registrados en el detector. A este histograma que se obtiene con el MCA se le conoce como el espectro de radiación de la fuente.

El funcionamiento del MCA involucra a l A DC y u na u nidad de memoria. El dispositivo de memoria del MCA se divide en un número entero de direcciones o localidades de memoria, cuyo número total es una potencia de 2 con los valores más comunes entre 512 y 8192. A cada una de estas localidades de memoria se le da el nombre de canal y se le asocia en orden con cada uno de los posibles pulsos digitales o número de canales n<sub>c</sub> producidos por el ADC. En cada canal es en donde se almacena el número de veces que ha sido generado un pulso digital de valor igual al que se tiene asociado. Una vez que el ADC envía la amplitud digital de un pulso, los microcircuitos del MCA buscan la localidad de memoria o canal asociado con el valor de esta amplitud. Una vez encontrado el canal, al contenido de esta localidad se le incrementa en una cuenta.

En la actualidad, prácticamente todos los MCA consisten en tarjetas electrónicas que se conectan en los puertos de una computadora. La comunicación entre la tarjeta y la computadora se lleva a cabo por medio de programas que emulan un MCA.

# 3.2.7 Estadística de conteo.

Para concluir con la parte referida al tratamiento de señales es conveniente hacer mención al aspecto estadístico de la generación de carga en la región activa del detector y su colección por los electrodos, el cual no ha sido considerado hasta el momento. Este aspecto resulta ser muy importante en cuanto a los aspectos de eficiencia y resolución en energía del detector.

Considerando que se tiene un tipo de radiación con un valor de energía E único, es decir, radiación monoenergética. En todos los detectores la formación de electrones e iones por esta radiación monoenergética es un proceso aleatorio. Esto es debido a que su interacción con el material de la región activa está dado con base en la se secciones eficaces, las cuales como se ha mencionado en el capítulo anterior son de carácter probabilístico. También, la colección de la carga generada resulta ser un proceso aleatorio debido a los efectos de recombinación de carga posibles. Estos efectos de recombinación consisten en que algunos de los electrones libres formados sean atrapados por otro ion, dando como resultado un átomo neutro que no contribuye en la formación del pulso eléctrico. Todo lo anterior da como resultado que existan fluctuaciones en el número de portadores de carga libre generados y que son colectados por los electrodos del detector. De esta manera, la generación y colección de carga se debe de describir en términos de una función de distribución [Kreyszig, Bevington]. Esta función de distribución indica la frecuencia relativa o probabilidad de generar y colectar una cantidad determinada de carga en la región activa del detector con un cierto tipo de radiación de energía E. La función de distribución dependerá del tipo de detector y de la clase de radiación que se este registrando. Es de esperarse que la generación de una carga igual a la dada por la ecuación (3.1) sea la más probable para esta distribución.

Finalmente, estas fluctuaciones en la carga generada y colectada producirán pulsos de diferentes tamaños, para un mismo tipo de radiación monoenergética. Después del procesamiento electrónico de la señal las fluctuaciones en la altura de los pulsos se verán entonces reflejadas en la forma de los espectros de radiación que se obtengan en un MCA.

## 3.2.8 Transmisión de señales.

Un aspecto importante que hay que mencionar es el de la transmisión de las señales de un módulo electrónico a otro. Esto se logra por medio del uso de cables cilíndricos de tipo coaxial. Estos cables consisten en un alambre conductor rodeado de un material aislante (polipropileno o teflón) el cual a su vez esta recubierto por una malla metálica. Todo lo anterior se encuentra protegido por una cubierta de material plástico. La malla metálica sirve como retorno a tierra y además escuda de una manera eficiente al alambre central de campos electromagnéticos externos menores a 100 kHz.

Las conexiones de los cables pueden ser de varios tipos pero las más usuales en el estándar NIM son la BNC para transmisión de señales y la SHV para la aplicación de altos voltajes. Está también la conexión microdot mucho más pequeña que la BNC y se utiliza ampliamente para extraer la señal de detectores de partículas.

La nomenclatura para designar a los diversos tipos de cables empleados no sigue una norma clara por lo que los nombres utilizados para nombrar a cada uno de ellos no guardan ninguna relación de orden.

Los cables comúnmente más utilizados son el RG-58C/U de 50  $\Omega$  para la transmisión de señales en distancias pequeñas (del orden de 3 m) y el RG-58/U de 93  $\Omega$  para distancias mayores. El cable miniatura para conectores microdot es el RG-174/U el cual tiene la ventaja de que ocupa un menor espacio en comparación con los dos anteriores. Este último es muy útil para el montaje de detectores y dispositivos dentro de espacios reducidos. El inconveniente que presenta es que el montaje de los conectores en sus extremos resulta ser más complicado que con los otros cables. El cable RG59/U de 75  $\Omega$  es el más utilizado para la transmisión de altos voltajes.

Con la finalidad de tratar de evitar en lo posible problemas de distorsión en las señales y los efectos de reflexión en señales debidos al acoplamiento de los cables con los módulos electrónicos en el estándar NIM los módulos electrónicos utilizan siempre conectores de entrada y salida de 50  $\Omega$  y de 93  $\Omega$  en algunos casos.

### 3.3 Propiedades generales de los sistemas de detección.

Una vez que ha sido mencionada la forma general de la detección de radiación y el procesamiento de los pulsos, por medio de los equipos electrónicos asociados con el sistema de detección, es posible mencionar de una manera más sencilla las propiedades generales que son características de todo detector operado en el modo de pulso.

#### 3.3.1 Eficiencia de detección.

La propiedad más importante de los detectores es su eficiencia. Esta propiedad indica cual es la probabilidad de que la radiación incidente sobre el detector pueda ser registrada. Como se ha indicado, el pulso de salida de un detector depende de la interacción de la radiación con la materia de la que esta hecha su región activa. Si la radiación interacciona poco con el detector, entonces la probabilidad de que un cuanto le transfiera energía es pequeña, y por tanto, la posibilidad de registrar al cuanto también es pequeña. En este caso se puede decir que el detector no es muy eficiente para registrar este tipo de radiación. En cambio, si la radiación interactúa mucho con el detector, la probabilidad de registrarla es grande y por tanto se dirá que éste tiene una eficiencia de detección grande para ese tipo de cuantos de radiación. La eficiencia indicará que tan capaz es un detector de registrar cierto tipo de radiación de energía E. Así pues, un detector con eficiencia del 100% puede registrar á sólo la mitad.

Con base en lo anterior resulta conveniente definir la eficiencia de un detector de dos maneras. Una es la eficiencia absoluta  $\varepsilon_{abs}$  definida como el cociente del número de pulsos registrados  $N_r$  y el número de cuantos de radiación emitidos por la fuente  $N_f$ , es decir,

$$\varepsilon_{abs} = \frac{N_r}{N_f} = \frac{n \text{ úmero de pulsos registrados}}{n \text{ úmero de cuantos emitidos por la fuente}}$$
(3.4)

La otra manera es la eficiencia intrínseca dada como el cociente de  $N_r$  entre el número de cuantos de radiación que inciden sobre el detector  $N_{inc}$ , es decir,

$$\varepsilon_{\text{int}} = \frac{N_{\text{r}}}{N_{\text{inc}}} = \frac{\text{número de pulsos registrados}}{\text{número de cuantos incidentes sobre el detector}}$$
(3.5)

Como se ve, la eficiencia absoluta involucra los aspectos geométricos del arreglo espacial que existe entre la posición del detector y la fuente de radiación, Si la fuente de radiación es pequeña, de tal manera que pueda ser considerada como puntual, entonces la dependencia con el arreglo geométrico estará dada por medio del ángulo sólido  $\Omega$  que subtiende el área frontal *A* con respecto a la fuente de la superficie de la región activa del detector . El ángulo sólido por:

$$\Omega = \int_{\mathcal{A}} \frac{\cos \alpha}{r^2} dS \tag{3.6}$$

donde la integral se efectúa sobre el área A, r es la distancia entre la fuente y un elemento de área dS en la superficie del detector,  $\alpha$  es el ángulo entre la normal de dS y la dirección del haz incidente.

Por otro lado la eficiencia intrínseca depende únicamente del detector en sí, y no de su posición con respecto de la fuente. Estas dos definiciones s on ú tiles y se aplicarán dependiendo de la situación para la cual se empleé el sistema de detección. Si una fuente puede ser considerada como puntual y la distribución de su radiación emitida es isotrópica, entonces la relación entre  $\varepsilon_{abs}$  y  $\varepsilon_{int}$  está dada por:

$$\varepsilon_{\rm abs} = \frac{\Omega}{4\pi} \varepsilon_{\rm int} \,. \tag{3.7}$$

Finalmente, el conocimiento de la eficiencia de los detectores con respecto a diversos tipos de radiación permite seleccionar cual es el más conveniente utilizar dependiendo de la situación o aplicación que se requiera realizar.

#### 3.3.2 Resolución en energía.

Otra propiedad importante de los detectores es su respuesta a la radiación monoenergética. Como se ha mencionado en la sección 3.2.7, la generación de pulsos es un proceso aleatorio (estadístico) que produce como respuesta señales de diferentes alturas para un mismo tipo de radiación monoenergética. Si además se incluyen las fluctuaciones debidas a los mismos equipos del sistema electrónico de tratamiento de señales se tiene como resultado una distribución de diferentes alturas de pulsos producida por todo el sistema de detección. A esta distribución de altura de pulsos se le conoce como la función de respuesta del sistema de detección. Así, la forma del espectro de radiación que se obtiene con un determinado sistema de detección dependerá directamente de la forma de su función de respuesta, la cual, a su vez, depende del tipo de radiación y de su energía.

El espectro de radiación monoenergética  $E_0$  que se obtiene en un MCA, de manera general, consiste en una distribución con un máximo y dos funciones decrecientes a sus lados, semejante al mostrado en la figura 3.5. El centro de la distribución o su punto máximo se encuentra localizado en la energía  $E_0$ . Luego, el ancho de la

distribución indica la resolución del sistema de detección. Si la distribución es ancha entonces la resolución es pobre, en tanto que si es estrecha la resolución es buena.



Figura 3.5 Esquema de la resolución de un pico de energía  $E_0$ .

La resolución de un detector se da en términos del ancho de la distribución a la mitad del máximo o FWHM (Full Width at Half Maximum), como se indica en la figura 3.5. Por ejemplo, si se considera que la función de respuesta del detector es semejante a una gaussiana:

$$G(E_0) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(E-E_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$
(3.8)

donde  $\sigma$  es la desviación estándar y A es el área de la Gaussiana. Se tiene que el FWHM está dado por 2.35 $\sigma$ . A partir de la resolución se puede indicar que intervalos de separación en energía de los cuantos de radiación es posible distinguir con el detector. De manera aproximada, sin ser una regla estricta, puede decirse que un detector es capaz de distinguir o resolver radiación de dos energías diferentes si estas se encuentran separadas en más de una diferencia igual al FWHM.

En una primera aproximación, considerando sólo fluctuaciones en la generación y colección de carga, la respuesta de un detector se puede suponer inicialmente como un proceso de Poisson, es decir, que sigue una función de distribución de Poisson. Bajo esta suposición el número de portadores de carga libre promedio N que son generados por radiación monoenergética tienen una desviación estándar de  $\sigma = N^{1/2}$ . Debido a que N es por lo regular un número muy grande, entonces la función de respuesta tiene la forma gaussiana dada por la ecuación (3.8). Como la generación de portadores de carga en los detectores es aproximadamente lineal, la amplitud promedio de los pulsos producidos es  $E_o = k N$ , donde k es una constante de proporcionalidad. Luego de la ecuación (3.1) se tiene que N =  $Q/e = E_0/\xi$  en donde  $\xi$  es la energía de ionización del material de la zona activa, se tiene entonces que  $k = \xi$ . Así la desviación estándar del pico es  $\sigma = N^{1/2} = (\xi E_0)^{1/2}$  y por tanto su FWHM =  $2.35(\xi E_0)^{1/2}$ . Pero por otro lado, algunas medidas de la resolución de un detector muestran ciertas discrepancias con el resultado anterior. Esto conduce a tener en cuenta que los procesos que pueden



generar a un portador de carga no son independientes, y por lo tanto el número de portadores de carga generados no puede ser descrito por una distribución de Poisson. Con la finalidad de corregir este problema se introduce el llamado factor de Fano, como un intento a primera aproximación de describir la diferencia entre la estadística de Poisson y las fluctuaciones observadas. El factor de Fano se define como:

$$F = \frac{\text{variancia observada en el número de portadores de carga}}{\text{Variancia predicha por la distribución de Poisson (=N)}}$$
(3.9)

De esta manera, la resolución del sistema de detección se puede expresar como:

$$FWHM = 2.35\sigma F^{1/2} = 2.35\sqrt{\xi E_0 F}$$
(3.10)

El factor de F ano e s mucho menor que la unidad para detectores semiconductores ( < 0.2 ) y contadores proporcionales. Para detectores de centelleo F es prácticamente igual a la unidad.

Luego, si los otros efectos que producen fluctuaciones en la altura de los pulsos generados (ruido electrónico, corrientes de fuga en el detector, etc.) son tomados en cuenta y si se consideran como procesos independientes al de la formación de carga por la radiación, se tiene como resultado que la contribución de todos ellos estará expresada como una suma de cuadrados dada por:

$$(FWHM)_{total} = (FWHM)_{estadistico}^{2} + (FWHM)_{electrónico}^{2} + (FWHM)_{fuga}^{2} + \dots$$
(3.11)

Cada término al cuadrado en el lado derecho de esta última ecuación es el FWHM que se observa si las demás causas de fluctuaciones son cero.

#### 3.3.3 Tiempo muerto.

Cada vez que la radiación interactúa con el detector se genera un pulso el cual es posteriormente procesado por los equipos electrónicos asociados al sistema (amplificador, ADC y MCA). Durante el tiempo en que están ocupados los equipos electrónicos procesando una señal, los pulsos producidos en el detector de manera subsecuente no pueden ser registrados sino hasta que el sistema se h aya desocupado. Se le llama tiempo muerto  $T_m$  del sistema de detección al intervalo durante el cual los cuantos de radiación que lleguen al detector no son registrados.

Son varios procesos los que contribuyen a la duración del tiempo muerto. Entre estos se tiene el debido al tiempo de conversión analógica a digital,  $T_{CONV} = n_c / f_c$ , durante el cual el sistema de detección no registra las señales que están llegando al ADC, (ver sección 3.2.5). Este también es el caso del tiempo  $T_{mca}$  que le toma al MCA transferir información a su memoria. A sí, para tener u na cuenta nueva en el multicanal, el tiempo muerto  $T_m$  será:  $T_m = T_{CONV} + T_{mca}$ . Por lo regular las frecuencias  $f_c$  del reloj del ADC se encuentran típicamente en el intervalo de 50 a 400 MHz. El ciclo de almacenamiento en la memoria del MCA es del orden de 0.5 a 2 µs. De esta manera, se tiene que para un multicanal de 8192 canales (n<sub>c</sub>), los tiempos muertos generados son de 20 a 165 µs.

Otros intervalos de tiempo que deben de ser agregados al tiempo muerto total dependen de las características particulares del amplificador, como pueden ser el debido al circuito de rechazo de efectos de apilamiento (pile-up rejection), que se detalla más adelante. También, algunos tipos de detectores, como los contadores Geiger-Müller, después de que han registrado un cuanto de radiación requieren de un tiempo de recuperación antes de volver a poder generar otro pulso en condiciones óptimas.

Con base en lo anterior se puede comprender que el manejar altas tasas de conteo conduce a tener un tiempo muerto grande en el sistema de detección. La presencia del tiempo muerto en el sistema de detección no es conveniente pues se pierde información sobre los cuantos de radiación emitidos por una fuente. La manera más simple y conveniente para determinar el tiempo muerto del sistema de detección es emplear un generador de pulsos. Por lo regular el generador emite pulsos con frecuencias de 50 ó 60 Hz. y se conecta al preamplificador por medio de la entrada indicada como Test. Este generador va a alimentar el preamplificador durante todo el tiempo que dure la detección de radiación de una fuente y ambos pulsos son registrados simultáneamente en el espectro que se obtenga en el MCA. En el espectro de radiación de bulsos producidos por el generador durante el tiempo real que dura el conteo y los que fueron registrados en el espectro, se puede determinar cuanto tiempo estuvo el sistema contando (tiempo vivo). De esta diferencia es posible hacer correcciones entre la razón de conteo del sistema y la cantidad de cuantos de radiación que llegó al detector.

# 3.3.4 Efecto de apilamiento.

En el caso de detectores cuyo tiempo de colección de carga  $t_c$  es mucho menor que el tiempo de formación de la señal puede ocurrir el efecto de apilamiento o Pile-up. Este se presenta cuando dos cuantos de radiación llegan al detector con una separación de tiempo pequeña, que es menor al de formación de la señal. Bajo esta situación, se tiene que dos eventos diferentes son registrados como un solo evento. Por ejemplo, en el caso de que los dos cuantos de radiación con energías  $E_1$  y  $E_2$  lleguen simultáneamente al detector, estos son registrados como un solo pulso de energía  $E_1 + E_2$ . El efecto neto en el espectro de radiación de una fuente monoenergética debido al apilamiento se presenta como un ensanchamiento de la distribución en el lado de alta energía y la aparición de una distribución centrada en la energía 2E.

Al igual que el tiempo muerto, el apilamiento es un efecto no deseado pues reduce la información real que se puede obtener sobre la fuente de radiación, este efecto también está asociado con altas tasas de conteo. Por otro lado, muchos amplificadores tienen integrado un circuito de rechazo de apilamiento. Este circuito analiza la forma de la señal cuando ésta va levantando y en el momento en que se observa un cambio que no sea suave la señal no es enviada al ADC y reestablecen las condiciones iniciales de operación del amplificador. Por otro lado, el inconveniente de estos circuitos es que incrementan el tiempo muerto del sistema de detección, por lo que puede decirse que la mejor manera de eliminar el apilamiento es reduciendo la razón de conteo en el detector. Claro que esto no siempre es posible, por lo que se debe buscar una condición óptima de equilibrio que mantenga un compromiso razonable entre la reducción del apilamiento.

# 3.3.5 Consideraciones para sistemas de alta resolución.

Como se ha mostrado hasta este momento los sistemas de detección utilizados para efectuar espectroscopía de alta resolución involucran una serie de módulos electrónicos que utilizados apropiadamente no deben de presentar ningún problema. Sin embargo bajo ciertas circunstancias pueden ocurrir problemas o efectos que degraden la razón señal a ruido. En muchas de estas circunstancias los problemas surgen por el hecho de que el sistema es susceptible a oscilaciones o ruido debidos a problemas de inestabilidad en el potencial de referencia o "tierra", así como a interferencia electromagnética, IEM, de fuentes tales como pantallas, fuentes de voltaje, computadoras, etc. Estas interferencias degradan la resolución del sistema de detección. A continuación se presentan una serie de consejos para disminuir estos efectos.

En primer lugar el cable que conecta al preamplificador con el amplificador no debe de exceder de unos 3 m de longitud. Si el cable es mayor las oscilaciones pueden ocurrir en él. En algunos módulos NIM además de los conectores estándar de 50  $\Omega$  se tienen conectores con una resistencia de 93  $\Omega$  que permiten reducir estos efectos cuando se utilizan cables de más de 3 m.

Hay que e vitar las vibraciones mecánicas en todos los módulos e lectrónicos que se u tilicen. A sí pues los detectores y sus crióstatos deben de montarse con aislantes que absorban vibraciones y ruido sonoro. También es útil reducir el tiempo de formación de pulso en los amplificadores cuando el sistema de detección se encuentre en un lugar ruidoso. Esto último es especialmente importante en laboratorios donde se cuente con

aceleradores de partículas pues se suele presentar mucho ruido debido a las bombas de vacío, a las fuentes de iones y al propio acelerador si este utiliza para su funcionamiento cadenas (tipo peletrón) o bandas (tipo Van de Graff). En aceleradores de tipo tandetrón esta fuente de ruido se reduce significativamente.

En la proximidad a estaciones de radio los detectores pueden entrar en sintonía con la señal de la emisora. En estos casos conviene aterrizar el amplificador y el crióstato del detector, aunque bajo esta condición ahora se puedan presentar problemas con la tierra.

Para evitar los problemas de interferencia electromagnética los cables deben de evitar pasar cerca de pantallas de televisión (especialmente por la parte de enfrente), computadoras, balastras de lámparas de luz, materiales que produzcan campos magnéticos. También es conveniente que el analizador multicanal se encuentre a un poco más de un metro y medio del detector que se esté empleando.

Los problemas de tierras se presentan cuando ocurren oscilaciones de 50 o 60 Hz en el potencial de tierra. Estos se suelen reducir cuando el amplificador, el ADC y la fuente de voltaje se encuentran instalados en el mismo rack o bin. Pero por otro lado el amplificador debe de estar separado del ADC y la fuente de voltaje por unas cuantas ranuras. En el caso de que no sea posible tener todo en el mismo bin se recomienda aterrizar correctamente al ADC y posteriormente "flotar" el amplificador y la fuente de voltaje al ADC.

### 3.4 Detectores de gas y centelleadores.

Históricamente, los métodos más antiguos para el registro de la radiación fueron los detectores de gas y los centelleadores. Los detectores de gas fueron los primeros en ser utilizados en modo de pulso y aun son ampliamente utilizados, especialmente en dosimetría de radiación. Los centelleadores en un inicio fueron muy utilizados, pero no fue sino hasta el surgimiento de los tubos fotomulitiplicadores que pudieron ser utilizados como detectores en modo de pulso. En las dos secciones siguientes se muestra una descripción básica de estos detectores.

### 3.4.1 Detectores de gas.

Los detectores de gas son aquellos en los cuales la región activa consiste de una sustancia en estado gaseoso, por lo general, estos detectores consisten en una cámara metálica de forma cilíndrica en cuyo interior se encuentra contenido el gas. En la parte central del cilindro a lo largo de su eje pasa un alambre delgado, este alambre sirve de electrodo positivo o ánodo al conectarse a una fuente de voltaje, en tanto que el cilindro servirá de cátodo. En este arreglo geométrico el campo eléctrico producido por la fuente es más intenso cerca del alambre que del cilindro. Una vez aplicado un voltaje adecuado, la radiación que pase por el gas producirá ionización y los electrones generados, debido a su mayor movilidad, son colectadas por el ánodo.

Estos detectores están comúnmente llenos de gas argón, se les añade una pequeña concentración de una sustancia orgánica, a menudo un alcohol o metano, para minimizar la producción de electrones secundarios, cuando los cationes chocan contra las paredes de la cámara. Con los detectores de gas es posible registrar fotones, electrones y partículas alfa, entre otros.

Dependiendo del voltaje que se aplica a los electrodos y a la señal electrónica de salida que producen, estos detectores se clasifican en cámaras de ionización, contadores proporcionales y geigers. En la figura 3.6 se muestra esquemáticamente la gráfica de la amplitud del pulso de salida del detector al registrar cuantos de radiación monoenergética contra el voltaje aplicado a los electrodos. En esta figura se muestran también las diferentes regiones de operación de los detectores de gas.

Las cámaras de ionización operan en el intervalo de  $V_1$  a  $V_2$  en donde los pulsos producidos son pequeños y relativamente independientes del potencial aplicado. Las corrientes que se producen entre los electrodos son del orden de  $10^{-13}$  a  $10^{-16}$  A, lo que ocasiona que éstos no sean empleados para espectroscopía debido a su baja sensibilidad.

El contador proporcional opera en la región de potencial entre  $V_3$  y  $V_4$ . En este caso, los pulsos emitidos por el detector son proporcionales a la energía de la radiación que llega. Los pulsos así producidos pueden ser procesados electrónicamente, permitiendo que estos contadores sean utilizados en espectroscopía de la radiación.

El contador Geiger-Müller opera en al región de potencial entre  $V_5$  y  $V_6$ . Los voltajes de los pulsos generados en este caso son del orden de volts, por lo que no requieren de preamplificadores, ni de amplificadores. El inconveniente de estos detectores es que los pulsos producidos no son proporcionales a la energía de la radiación por lo cual no son utilizados para aplicaciones espectroscópicas

Cuando se alcanzan voltajes mayores que  $V_6$  se produce la ruptura dieléctrica del gas y entonces se encuentra el interior de la cámara en un proceso de descarga continua.



Figura 3.6 Regiones de operación de un detector de gas.



3-15

# 3.4.2 Centelleadores

Los detectores centelleadores operan a partir del fenómeno de luminiscencia que presentan algunos materiales cuando interaccionan con la radiación. Los materiales utilizados para la fabricación de detectores centelladores pueden ser de tipo orgánico o inorgánico donde sus propiedades ideales deben de ser:

a) Convertir la energía cinética de una partícula o fotón en "luz" detectable.

b) La conversión de energía en "luz" debe de ser lineal cuando menos en el intervalo de energías de la radiación que se esté observando.

c) El material debe de ser un medio transparente para la longitud de onda de la "luz" que produzca.

d) El tiempo de decaimiento de la "luz" inducida debe de ser corto para permitir distinguir el registro de partículas que lleguen al detector a intervalos pequeños.

e) El material debe de tener propiedades que permitan su maquinado para darle la forma que se requiera dependiendo del experimento que se quiera realizar.

f) Su índice de refracción debe de ser parecido al del material que se utilice para acoplarlo al tubo fotomultiplicador.

Para describir del proceso de operación de un centellador consideramos como ejemplo el caso del material inorgánico luminiscente más empleado en la fabricación de estos detectores consistente en un cristal de ioduro de sodio que ha sido activado con la introducción de aproximadamente un 0.2% de ioduro de talio. La forma típica del cristal consiste en un cilindro en el intervalo de unos 7.5 a 10 cm en ambas direcciones, tanto de diámetro como de largo. Una de las caras planas del cristal se orienta al cátodo de un tubo fotomultiplicador. Cuando la radiación interacciona con este cristal se produce, entre otros fenómenos, la emisión fluorescente de fotones de luz visible a ultravioleta en un intervalo de tiempo de 0.25 µs. Los fotones producidos pueden transmitirse a través d el c ristal y los que a lcancen a l fotocátodo de un be fotomultiplicador provocarán l a emisión de electrones. Estos electrones son dirigidos por medio de un electrodo de enfoque hacia un dínodo en donde producen la emisión de más electrones. Este proceso se repite unas diez veces hasta que el fotomultiplicador puede emitir un pulso de voltaje que es posible procesar electrónicamente.

Además de los cristales de ioduro de sodio, se han utilizado un cierto número de centelleadores orgánicos como el estilbeno, el antraceno y el terfenilo. En forma cristalina, estos compuestos emiten fotones en tiempos de 0.01 a 0.1 µs. Se han desarrollado también centelleadores orgánicos líquidos, como por ejemplo, de una solución de p-terfenilo de tolueno (skoog).

Otra característica importante de los centelleadores es que el número de fotones producidos es aproximadamente proporcional a la energía de la radiación incidente, con lo cual pueden ser utilizados para la espectroscopía de la radiación. Los detectores centelleadores de materiales inorgánicos como el ioduro de sodio se utilizan principalmente en la detección de electrones y rayos gamma. Centelladores de materiales orgánicos se emplean también para el registro de jones pesados.

En el detector de centelleo el proceso físico no es el mencionado a lo largo de este capítulo, pero el cristal centellador junto con su fotomultiplicador se comporta de manera análoga a la región activa de cualquier otro tipo de detector. Así, lo expuesto anteriormente en este capítulo para los detectores que operan en modo de pulso es aplicable a los centelleadores.

#### 3.5 Detectores semiconductores

Los detectores semiconductores son ampliamente utilizados debido a que su resolución en energía es superior a la de otros detectores y su tamaño es mucho más reducido. Su funcionamiento es análogo al de los detectores de gas, donde ahora el proceso de ionización se produce dentro de un material semiconductor y los pares electrón-hueco generados son colectados para producir la señal de salida.

#### 3.5.1 Propiedades de los semiconductores

De acuerdo con el modelo de bandas de un sólido, los electrones se encuentran confinados exclusivamente a una serie de bandas de energía permitidas. Estas bandas permitidas, donde pueden encontrarse los electrones, se establecen a partir de la estructura cristalina del sólido. A su vez, las bandas se encuentran separadas por intervalos o "gaps" de energías prohibidas correspondientes a intervalos de energía que los electrones no pueden tener dentro del sólido. Dos de las bandas más importantes en un material son las llamadas de valencia y de conducción. La banda de valencia corresponde a la de los electrones que producen los enlaces químicos entre los átomos del sólido, en tanto que la banda de conducción es en la que los electrones pueden moverse o migrar a través del cristal de un átomo a otro. Los electrones en la banda de conducción contribuyen a las propiedades de conducción eléctrica del material.

Por medio del modelo de bandas se puede clasificar a los materiales sólidos como dieléctricos, conductores, y semiconductores. Los materiales dieléctricos son aquellos en que el salto entre la banda de conducción y de valencia es grande, usualmente de 5 eV o más. Los electrones de valencia, que se encuentran en la parte más externa del átomo, al no poder alcanzar la banda de conducción permanecen en el mismo lugar dentro del cristal y actuando en el enlace atómico. Por este motivo la conductividad eléctrica de los dieléctricos es muy pequeña. Por el contrario, en los conductores las bandas de valencia y conducción se traslapan entre sí, permitiendo mayor movilidad a los electrones. Bajo esta situación se aumenta mucho la conductividad eléctrica. En los semiconductores las dos bandas no se traslapan, pero ambas se encuentran próximas entre sí y el salto entre ellas es del orden de 1 eV, en comparación con los dieléctricos. En este caso los electrones requieren de un poco de energía para poder pasar de la banda de valencia a la de conducción.

El proceso en el que algún electrón adquiere suficiente energía para pasar de la banda de valencia a la de conducción dejando sin aparear un enlace covalente puede verse como la creación de un electrón en la banda de conducción y un hueco en la banda de valencia. A esto se le conoce como la creación de un par electrónhueco. Tanto los electrones en la banda de conducción como los huecos en la de valencia pueden moverse dentro del sólido bajo la acción de un campo eléctrico externo, por lo que estos pares se comportan como portadores de carga. En un material semiconductor la creación de pares electrón-hueco puede producirse por medio d e procesos t érmicos. La probabilidad por u nidad de t iempo d e que s e c ree un p ar e lectrón-hueco térmicamente está dada por:

$$p(T) = CT^{3/2} \exp\left(-\frac{E_s}{2kT}\right)$$
(3.12)

donde T es la temperatura del material en grados Kelvin,  $E_g$  es la energía del salto entre las dos bandas, k es la constante de Boltzmann y C es una constante de proporcionalidad característica del material. De esta ecuación se observa que los efectos de creación de pares pueden reducirse ampliamente bajando la temperatura del material.

A su vez, los semiconductores se dividen en tres tipos diferentes dependiendo de la concentración n de electrones en la banda de conducción y de la concentración p de huecos en la de valencia. Los llamados semiconductores intrínsecos son aquellos en los cuales el número de electrones en la banda de conducción es exactamente igual al de huecos en la banda de valencia, es decir, n = p. Cuando en un material semiconductor se agregan impurezas o dopantes, es decir, átomos con diferente número de valencia, se pueden modificar las concentraciones n y p y se obtienen, dependiendo del caso, los semiconductores conocidos como tipo-n y tipo-p. En los semiconductores tipo-n los dopantes tienen una valencia más grande que los átomos del

material. Esto produce un exceso de electrones que no se realizan ninguna función dentro de los enlaces covalentes, por lo que éstos requieren de menor energía para pasar a la banda de conducción, con lo cual n > p. En los del tipo-p se introducen dopantes con valencia menor a la del material, por lo que faltan electrones de valencia en el sólido para poder tener todos los enlaces covalentes completos. Así, esto puede verse como una mayor presencia de huecos en el sólido que de electrones, es decir p > n.

Todo lo anterior puede entenderse más simplemente aplicándolo directamente al caso del silicio y germanio que son los materiales semiconductores más empleados en la fabricación de detectores. Estos elementos tienen valencia cuatro y en un cristal puro presentan una estructura en la cual cada átomo está enlazado con otros cuatro vecinos por medio de enlaces covalentes. Ver figura 3.7. Al introducir cantidades determinadas de elementos con valencia cinco, como fósforo o antimonio, éstos actúan como impurezas ya que toman el lugar de un átomo de silicio en la red cristalina del sólido. En la nueva estructura cristalina hay un exceso de electrones de valencia que quedan sin aparearse en los enlaces covalentes posibles y fácilmente pueden pasar a la banda de conducción sin producir un hueco en la banda de valencia, dando como consecuencia un aumento en la concentración n. Ver figura 3.8. A estas impurezas se les conoce como donadores pues aumenta el valor de n y al nuevo material semiconductor se le llama de tipo-n. De manera análoga, si se introducen átomos de valencia tres en el cristal de silicio o germanio se presentan enlaces covalentes sin aparear, lo que da como resultado un aumento en el número de huecos en la banda de valencia dentro del cristal. Al nuevo material formado se le llama de tipo-pues aumenta la concentración de huecos p en su interior. Ver figura 3.9. En este caso a las impurezas se les llama aceptores porque aceptan fácilmente un electrón libre o débilmente enlazado para poder aparear los enlaces covalentes incompletos.



Figura 3.7 Representación de los enlaces covalentes de un cristal de Si.





Figura 3.8 Representación de los enlaces covalentes de átomos de Si con uno de P en donde queda un electrón de valencia débilmente enlazado.



Figura 3.9 Representación de los enlaces covalentes de átomos de Si con uno de B en donde queda un hueco.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

# 3.5.2 Efectos de la radiación en un semiconductor.

Cuando una partícula pasa a través de un semiconductor se producen pares electrón-hueco a lo largo de su trayectoria. La energía de la radiación requerida para este proceso debe ser mayor que la energía de ionización  $E_i$  del semiconductor. La ionización puede ser producida directamente por la interacción de la radiación con

el semiconductor o ser generada indirectamente a partir de los mismos pares creados al interaccionar con el medio. El proceso de creación de pares electrón-hueco es proporcional a la energía de la radiación que atraviesa el material. La ventaja de los detectores semiconductores sobre los de gas radica en su baja energía de ionización, de aproximadamente 3 eV para silicio y germanio, contra la de los gases de alrededor de 30 eV. Incluso, la cantidad de portadores de carga producidos es diez veces mayor que en los gases.

Los pares, después de un tiempo de haber sido creados se recombinan nuevamente dentro del mismo semiconductor, es decir, el electrón libre vuelve a ocupar el lugar dejado vacante en la banda de valencia. El tiempo promedio de vida de estos portadores de carga puede llegar a ser de hasta 0.5 s. Durante este tiempo si se aplica un campo eléctrico externo al semiconductor los portadores de carga pueden migrar y ser colectados por electrodos antes de que ocurra su recombinación. En los materiales semiconductores suele haber la existencia de impurezas como oro, zinc, cadmio u otros elementos metálicos las cuales son diferentes a los dopantes mencionados con anterioridad. Estos átomos, clasificados como "deep impurities", actúan a manera de trampas en donde un hueco o electrón es capturado e inmovilizado durante un tiempo largo que permite la aniquilación del par. También, la presencia de defectos en el cristal puede actuar como centros de recombinación. Estas trampas y centros de recombinación contribuyen a la pérdida de portadores de carga dentro del semiconductor pues reducen su tiempo promedio de vida en el cristal.

En cuanto al factor de Fano para los detectores de estado sólido, se tiene que en el caso del silicio se han reportado valores para F de 0.085 a 0.16, en tanto que para el germanio han sido de 0.05 a 0.1.

### 3.5.3 Los contactos eléctricos.

Como se h a mencionado, l a colección de los portadores d e c arga, p ares e lectrón-hueco, g enerados p or l a radiación en el cristal semiconductor se realiza a través de dos contactos eléctricos conectados al circuito de detección. Estos contactos se encuentran localizados en dos caras opuestas de una parte del cristal. Para hacer más eficiente el proceso de la medida de la carga por medio de los electrodos se encuentran bajo una diferencia d e p otencial q ue o rigina u n campo eléctrico a lo largo d el volumen a ctivo, que v a desde u nas decenas hasta miles de volts. Esta diferencia de potencial produce una corriente de fuga en el detector que actúa durante todo el tiempo. Fluctuaciones en la corriente de fuga originan un deterioro en las señales producidas por la radiación, haciendo necesario reducir esta corriente. Para conseguir esto es necesario el uso de electrodos comocidos como "no inyectores" o "de bloqueo", a diferencia de los de tipo ohmicos que poseen baja resistencia. Los contactos de bloqueo más apropiados consisten en dos lados de juntas semiconductoras p-n, pues permiten reducir las corrientes de fuga a valores aceptables para la detección de partículas. Esto es debido a que resulta ser menos probable inyectar electrones del lado p porque los huecos son mayoría y los electrones minoría. En tanto que por el otro lado los electrones son mayoría provocando lo que los huecos sean difíciles de inyectar.

#### 3.5.4 Configuraciones de los detectores semiconductores.

Con base en la discusión anterior sobre los electrodos del detector se tiene que existen dos tipos de configuraciones principales para los detectores semiconductores en los que es posible tener contactos de bloqueo con base en juntas semiconductoras. Estas configuraciones son: la de junta semiconductora y la de tipo p-i-n, las cuales se detallan en las dos secciones siguientes.

#### 3.5.4.1 Detectores de junta semiconductora.

A manera esquemática, estos detectores se forman a partir de la unión de dos semiconductores del tipo-n y tipo-p. Al ser puestos directamente en contacto provocan que los electrones del lado n comiencen a migrar hacia el lado p, debido a que los electrones comienzan a ocupar los huecos en los enlaces covalentes no apareados del material tipo-p. A su vez, los electrones al migrar van dejando al lado n con las impurzas donadoras en estado ionizado, que puede verse como el movimiento de huecos provenientes del lado p. Durante esta difusión va creándose un campo eléctrico opuesto al movimiento de los portadores de carga que tiende a disminuir la migración hasta llegar a un estado de equilibrio. Esto genera entre los dos semiconductores una zona donde la carga no se encuentra neutralizada. A esta zona se le llama de agotamiento o depleción. Se le nombra región de agotamiento porque la difusión de pares a través de la junta produce en las zonas n y p una reducción en su tipo de carga inicial.

El campo eléctrico generado en esta zona de depleción hace que cualquier electrón producido en ella sea inmediatamente empujado hacia el lado de tipo-n y los huecos de manera similar hacia el lado tipo-p. Cuando la radiación interactúa con la región de depleción del detector entonces todos los portadores de carga creados son retirados de esta zona hasta que vuelvan a quedar las mismas cargas no neutralizadas que había inicialmente. De esta manera la región activa del detector de junta es la zona de depleción. El potencial generado en este tipo de juntas es de aproximadamente 1 V lo cual es muy pequeño para generar un campo eléctrico suficiente y adecuado que permita la colección de carga generada por radiación. Al ser pequeña esta diferencia de potencial las cargas creadas se moverán muy lentamente dando lugar a que ocurra su recombinación antes de poder ser colectadas.

Se dice que a la junta semiconductora n-p se le aplica un voltaje de manera inversa (reverse biasing) cuando la parte de tipo-p se conecta al polo negativo de una fuente de voltaje en tanto que el lado tipo-n se conecta al polo positivo. Esta conexión ocasiona un incremento de potencial a ambos lados de la junta lo que trae como consecuencia un aumento en el tamaño de la zona de depleción. Para un detector la aplicación de un voltaje inverso es muy conveniente pues trae como consecuencia un incremento en el tamaño de la región donde la radiación puede ser detectada y un aumento en la eficiencia de colección de carga al tener un campo eléctrico más intenso, la aplicación del voltaje inverso incrementa notoriamente la resistencia a las corrientes de fuga a través de la zona de depleción. El largo de la zona de depleción d producido al aplicar un voltaje V de manera inversa es aproximadamente [Knoll]:

$$d = \left(\frac{2E_i V}{eN}\right)^{1/2} \tag{3.13}$$

donde N es la concentración del dopante (donador o aceptor) presente en menor cantidad en alguno de los lados de la junta y e es la carga del electrón. Si la resistividad del semiconductor dopado está dada por  $\rho_d = 1/e\mu N$ , donde  $\mu$  es la movilidad del portador mayoritario entonces se tiene que d puede expresarse como:

$$d \cong \left(2E_i V \mu \rho_d\right)^{1/2} \tag{3.14}$$

El espesor d de la región de depleción está restringido al tamaño del cristal. Siempre, al menos una pequeña zona muy delgada fuera de la región de depleción y en la superficie debe tenerse sirviendo como contacto de bloqueo para colectar la carga que sea generada. Esta pequeña capa recibe el nombre de capa muerta y debe de ser atravesada por la radiación para poder llegar a la zona activa o de depleción del detector. Esto es una desventaja, especialmente para la detección de partículas, pues la radiación incidente puede disminuir su energía o su intensidad al atravesar la capa muerta.

Un inconveniente de los detectores de junta n-p es la limitante que existe en el valor del espesor de la zona de depleción que se puede alcanzar. Espesores mayores que 2 mm son difíciles de alcanzar sin tener que recurrir a voltajes cercanos al de ruptura del diodo. Cuando el voltaje inverso aplicado es muy grande se puede alcanzar el nivel de ruptura, en el cual aparece una corriente eléctrica intensa en la zona de depleción. Esta corriente de ruptura produce daños en el cristal. En la práctica estos detectores se forman a partir de un sólo cristal en donde se difunden las impurezas de tal manera que exista una diferencia de dopantes de un lado y otro de la junta.

Este tipo de detectores tiene una amplia aplicación en la detección de partículas como protones, alfas y otras de poca penetración. Dentro de este tipo de detectores se encuentran los llamados de barrera superficial.

#### 3.5.4.2 Detectores p-i-n.

Como se ha visto, los detectores de junta no son los más apropiados para detectar radiación más penetrante (rayos X y gamma) pues para ésta presentan una baja eficiencia. Para detectar las radiaciones penetrantes se requiere de espesores mayores para la zona de depleción que permitan aumentar la probabilidad de interacción con el detector. La manera de resolver el problema es incrementando el ancho de la región de depleción sin tener que llegar a los voltajes de ruptura. A partir de la ec. (3.13) se pueden tomar dos consideraciones para aumentar el espesor de depleción. La primera consiste en la reducción de impurezas en el material semiconductor de tal manera que su concentración sea aproximadamente de  $10^{10}$  átomos/cm<sup>3</sup>. Los detectores que cumplen con esta condición son los de germanio o silicio de alta pureza, denotados como HPGe y HPSi respectivamente. Actualmente los detectores de HPGe son más comunes que los de HPSi. La razón de esto es que el punto de fusión del silicio (1410 °C) es mucho más grande que el de germanio (959 °C) por lo que la exclusión de impurezas en el proceso de refinado es mucho más difícil.

La segunda consideración para aumentar el espesor d sería compensar el material con otras impurezas de tipo opuesto al dopante original, de tal manera que se de una compensación que reduzca el efecto de la concentración neta de impurezas. Para esto, el proceso de difusión de litio en silicio o germanio es el más utilizado para compensar el material una vez que el cristal ha sido crecido pues hasta el momento ha resultado ser el proceso que permite obtener las propiedades más cercanas a las de un semiconductor intrínseco. A este tipo de detectores de germanio o silicio se les denota como Ge(Li) o Si(Li) respectivamente.

De esta manera, el detector obtenido tomando alguna de las dos consideraciones anteriores consiste en un cristal intrínseco, denotado como tipo i, entre dos contactos eléctricos de baja emisión del tipo n y p. A esta configuración se le conoce como p-i-n. Bajo estas condiciones todo par electrón-hueco generado en la región *i* del detector podrá ser colectado aplicando una diferencia de potencial en los electrodos. Este tipo de detectores es operado a voltajes que permitan generar un campo eléctrico colector lo suficientemente uniforme a lo largo de todo el cristal para p oder reducir el tiempo d e colección d e carga y disminuir las pérdidas por recombinación. Las limitantes al voltaje aplicado es no exceder el voltaje de ruptura o aumentar la corriente d e fuga, p ara reducir las corrientes de fuga debidas a e fectos de generación térmica d e pares electrón-hueco se reduce la temperatura del detector a la del nitrógeno líquido a 77 °K. Esto se logra poniendo en contacto al detector y su preamplificador con uno de los extremos de un dedo frío el cual consistente en una barra de cobre, el otro extremo de la barra de cobre se pone en el interior de un "termo" o "dewar" con nitrógeno líquido en su interior, es conveniente que al dewar de los detectores de este tipo se le ponga nitrógeno unas cuatro horas antes de su operación para permitir la estabilización de temperaturas.

#### 3.5.5 Efectos generales durante la operación de detectores semiconductores.

La respuesta de un detector depende de varios efectos asociados con las propiedades de los semiconductores bajo voltaje inverso, así como del daño que produce la radiación en el cristal. Estos se detallan a continuación.

#### 3.5.5.1 Corrientes de fuga

En los detectores semiconductores siempre se presenta una corriente de fuga de hasta el orden de microamperes. El origen de estas corrientes de fuga se encuentra en el voltaje inverso aplicado y en la generación térmica de pares electrón-hueco. En los detectores semiconductores se trata de tener niveles aceptables para las corrientes de fuga con la finalidad de que no degraden a las señales producidas por la radiación. Las corrientes de fuga aparecen en el detector al incrementar el voltaje inverso aplicado mientras la capa de depleción se ajusta a su nuevo ancho. Esta corriente es debida a los electrones y huecos que fluyen hacia las terminales de la fuente de voltaje. El aumento en el voltaje del detector se debe hacer lentamente para evitar que la corriente sea grande y pueda producir daños en el cristal.

## 3.5.5.2 Fuentes de ruido y resolución.

Las fuentes de ruido que producen una degradación en la resolución del detector son: a) fluctuaciones en la corriente de fuga, b) problemas de mala conducción eléctrica en algunas partes de los contactos eléctricos, c) imperfecciones en el cristal del detector, y finalmente, d) todos los circuitos electrónicos asociados con el procesamiento de las señales del detector.

A partir de la ecuación (3,11) se tiene que la resolución total Wt de los detectores semiconductores dada en términos del FWHM puede expresarse como:

$$W_t^2 = W_{est}^2 + W_{poor}^2 + W_{fuga}^2 + W_{elec}^2$$
(3.15)

donde  $W_{est}$  representa las fluctuaciones estadísticas inherentes en el proceso de ionización y la generación de portadores de carga,  $W_{poor}$  son las fluctuaciones debidas a los efectos de mala colección de carga en el cristal,  $W_{fuga}$  son las fluctuaciones debidas a cambios en las corrientes de fuga y  $W_{elec}$  son las fluctuaciones debidas a los componentes electrónicos de todo el sistema de detección. Suponiendo que la generación de pares electrón-hueco es un proceso estadístico de Poisson entonces  $W_{est}$  se puede expresar como:

$$W_{ev}^2 = (2.35)^2 F \xi E \tag{3.16}$$

donde F es el factor de Fano y W es la energía mínima para producir un par electrón-hueco. La  $W_{poor}$  depende del voltaje aplicado al detector. A mayor voltaje se tienen mejores condiciones de colección de carga y por lo tanto se reducen estas fluctuaciones. Una forma para determinar estas fluctuaciones es observando las colas en el lado de baja energía cuando se está detectando radiación monoenergética, ya sean iones, electrones o fotones. El efecto de las corrientes de fuga puede estimarse monitoreando estas corrientes por medio de un amperímetro a través de la fuente de voltaje. Durante la operación del detector la corriente de fuga debe de mantenerse lo más estable posible. Cambios bruscos o incremento de la corriente de fuga indican cambios en la respuesta del detector. Por último, la determinación de las fluctuaciones electrónicas  $W_{elec}$  se

pueden efectuar por medio de un generador de pulsos conectado al preamplificador del detector. Si las señales del generador son lo suficientemente precisas y de amplitud estable la resolución del pico que se obtenga en el espectro del MCA es lo más próxima al  $W_{olec}$ .

## 3.5.5.3 Daño por la radiación.

La manera óptima de operación de un detector semiconductor depende de la perfección de su latiz o estructura cristalina. La presencia de defectos puede producir trampas para los portadores de carga dando como resultado efectos de recombinación y una incompleta colección de carga. La interacción constante de la radiación con el detector va produciendo defectos en el cristal y consecuentemente una disminución de la resolución del detector con el tiempo, también, se incrementan las corrientes de fuga. Este daño por radiación es lento en detectores de rayos gamma y beta en tanto que es mucho más rápido en detectores usados para registrar partículas e iones pesados.

# **Referencias:**

[Bevington] P.R. Bevington y D.K. Robinson, Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences, segunda edición, McGraw-Hill, N.Y., 1992.

[Brophy] J.J. Brophy, Basic Electronics for Scientists, cuarta edición, McGraw-Hill, 1983.

[Knoll] G.F. Knoll, Radiation Detection and Measurement, segunda edición, John Wiley & Sons, N.Y. 1989.

[Kreyszing] E. Kreyszig, Introducción a la Estadística Matemática, Principios, y Métodos, Ed. Limusa, México, 1983.

[Malvino] A.P. Malvino, Principios de Electrónica, Segunda edición, McGraw-Hill, México1985.

[Mann] W.B. Mann y S. B. Garfinkel, Radiactividad y su medida, Editorial Reverté Mexicana, México, 1968.

[Ortec] Catálogo 97/98 de EG&G Ortec, Modular Pulse-Processing Electronics and Semiconductor Radiation Detectors, Oak Ridge, 1997.

[Price] W.J. Price, Nuclear Radiation Detection, segunda edición, McGraw-Hill, N.Y., 1964.

[Resnick] Halliday y R. Resnick. Fisica, vol II, Editorial CECSA, México 1980.

[Skoog] D.A. Skoog y J.J. Leary, Análisis Instrumental, cuarta edición, McGraw-Hill, Madrid, 1996.

# **CAPÍTULO 4**

# DETECTORES DE RAYOS X Y SUS PRINCIPALES CARACTERÍSTICAS

# 4.1 Generalidades

Los detectores de estado sólido especiales para el registro de rayos X consisten en cristales semiconductores con una configuración pin. Estos cristales son por lo regular de silicio o germanio en estado puro o con átomos de litio difundidos. También se emplean con mucho menor frecuencia cristales como ioduro de mercurio (HgI<sub>2</sub>), ioduro de plomo (PbI<sub>2</sub>), teluro de cadmio (CdTe) y arseniuro de galio (GaAs).

Para amplificar la señal producida por la interacción de los rayos X con la parte intrínseca del cristal se utiliza un transistor FET. Este transistor se encuentra tan próximo al detector como sea posible y, se encuentra integrado un sistema de enfriamiento para reducir el ruido electrónico tanto del FET como del cristal detector. El sistema de enfriamiento puede consistir en un dedo frío o en un dispositivo termoeléctrico. El dedo frío es una barra de cobre con uno de sus extremos en contacto con el FET, mientras que el otro extremo se encuentra sumergido dentro de nitrógeno líquido. La temperatura del nitrógeno líquido es de 77 °K (-196 °C) y por conducción térmica de la barra de cobre baja la temperatura del cristal detector. El nitrógeno líquido se mantiene dentro de un "dewar" o termo para reducir su velocidad de evaporación. En el caso del enfriado termoeléctrico se utiliza el efecto Peltier descubierto por el francés Charles A. Peltier, en 1834, y consiste en poner en contacto dos superficies metálicas diferentes, como hierro y cobre, las cuales al pasar una corriente eléctrica, una de las superficies se enfría y la otra se calienta. Con este procedimiento se logra enfriar el cristal y el FET hasta temperaturas semejantes a las del nitrógeno líquido. En la Figura 4.1 se muestra un diagrama de un detector para rayos X.



Figura 4.1 Diagrama de un detector de rayos X con Li difundido para generar la región intrínseca.

Los cristales detectores y el FET se encuentran dentro de un crióstato al vacío para evitar que la humedad del ambiente se condense sobre la superficie del cristal aumentando las corrientes de fuga del detector y reduciendo la eficiencia para la detección de rayos X.

En un principio e l procedimiento de fabricación de estos detectores era purificando un cristal de silicio o germanio y luego para obtener la configuración pin se difundían átomos de litio denotándose como Si(Li) y Ge(Li) respectivamente. En la actualidad los procesos de purificación de cristales han avanzado y ya se cuenta con cristales con una muy pequeña cantidad de impurezas que ya pueden catalogarse como semiconductores intrínsecos. A estos se les conoce como detectores de alta pureza de silicio y germanio denotados como HPSi y HPGe. Como la gran mayoría de detectores de HPGe se utilizan para el registro de rayos g amma, los

FALLA DE ORIGEN

4-1

utilizados para rayos X son mucho más pequeños en tamaño y se denotan como LEGe (Low Energy Germanium).

Aunque los procesos de fabricación de estos detectores están muy avanzados, las características de cada detector provienen de la forma particular en como se formó y purificó cada cristal, por lo que la respuesta de cada detector es única. Además las propiedades del cristal pueden ir cambiando con el tiempo (difusión del litio, daño o modificaciones en la red del cristal) con lo cual cambia también su respuesta. Para las aplicaciones donde el conocimiento de la respuesta de detector es muy importante se requiere de una caracterización profunda de ésta, y no debe descartarse la posibilidad de que alguna de sus propiedades difiera a la especificada inicialmente por el fabricante. Los voltajes de operación de estos detectores son de unos cuantos cientos de volts (-200V a -800V).

#### 4.2 Proceso de Fabricación.

El proceso de fabricación [Knoll, Ortec] es importante porque es ahí donde se le dan las características propias de cada detector de estado sólido para rayos X.

El proceso de manufactura de estos detectores comienza purificando el silicio o germanio que es utilizado en su construcción, para esto, polvo de silicio o germanio policristalino se coloca en un crisol rectangular alargado, este crisol se introduce lentamente en el centro de una bobina calefactora de radiofrecuencia y, a medida que el crisol se mueve, la parte del material que está adentro de la bobina se calienta a muy alta temperatura consiguiendo de esta manera que el material se vaya fundiendo por partes. La bobina se va recorriendo lentamente a lo largo del crisol haciendo que las impurezas que hay en el silicio o germanio se vayan moviendo junto con la parte del material fundido. Así al final lo que se obtiene es un lingote de están las impurezas se corta y el material restante se vuelve a someter al mismo proceso de purificación. Este proceso de purificación se repite las veces necesarias para tener el material de alta pureza. Aun así, el silicio es muy dificil de purificar y siempre quedan impurezas en su interior. Por lo regular en este estado de pureza el silicio de silicio de muy alta pureza ha sido posible a un precio competitivo permitiendo la fabricación de cristales de silicio intrínseco para su utilización como detector.

Una vez conseguido el silicio o germanio de esta pureza se hace crecer un cristal por el método tradicional de Czochralski [Mckelvey] que consiste en colocar la superficie de un cristal de silicio o germanio como semilla sobre silicio fundido en el interior de un crisol. Posteriormente se da vuelta al cristal y se extrae lentamente y de manera simultánea el cristal semilla. De esta manera, al final se obtiene un cristal con forma cilíndrica. Posteriormente, el cristal se corta de las dimensiones del detector. Así pues el detector tiene una forma cilíndrica. Comúnmente el área frontal es desde 10 mm<sup>2</sup> hasta 200 mm<sup>2</sup> y su grosor de hasta 10 mm para los detectores de rayos X.

Cuando el cristal producido es del tipo-p, para compensar el material se le difunden átomos de litio, esto se hace calentando el cristal a 40 °C en una atmósfera con vapores de litio y aplicándole altos votajes inversos dando como resultado la formación de una junta p-n. Después de varios días llega a compensarse todo el material quedando de tipo intrínseco. Este proceso de compensación se aplica sobre cristales desde un espesor de 3 mm hasta 10 mm.

Una vez conseguido un semiconductor intrínseco ya sea por su alta pureza o la difusión de litio se crean los electrodos de bloqueo en los extremos del cristal (ver sección 3.5.3). En la parte frontal, por donde va a incidir la radiación que se quiera detectar, se forma un contacto del tipo-p y en la parte posterior uno de tipo-n dopando altamente estas superficies. De esta manera se obtiene un cristal semiconductor con una configuración del tipo pi-n. El contacto de bloqueo del tipo-p en la parte frontal es lo que forma la llamada capa muerta del detector. El nombre de capa muerta viene del hecho de que la radiación es atenuada al pasar por este contacto pero no se podrá registrar.

Posteriormente, a las caras frontal y posterior donde se encuentran los electrodos, se les ponen dos contactos óhmicos. E sto se hace e vaporando d os películas delgadas d e oro sobre a mbas superficies. S on d e o ro los contactos porque de este material se pueden tener películas muy delgadas con buenas propiedades conductoras. A veces, como el contacto posterior no es tan importante, en lugar de ponerle un contacto de oro lo hacen de otro material más económico. En la figura 4.2 se muestra la forma final del cristal de silicio con litio difundido. Los rayos X inciden por la cara de la parte inferior.



Figura 4.2 Dibujo del cristal de un detector de rayos X con Li difundido.

Luego el contacto posterior se conecta a un transistor de tipo FET que sirve como preamplificador para las señales que se generen en el cristal. Para reducir los efectos del ruido generado térmicamente el detector y el FET se ponen a temperatura del nitrógeno líquido utilizando un dedo frío o por enfriamiento termoeléctrico. Esta temperatura también ayuda a evitar la difusión del litio dentro del cristal haciendo que se pueda perder la compensación obtenida. Antes de bajar al temperatura del cristal, éste se coloca en el interior de un crióstato al vacío. El crióstato es una caja de forma cilíndrica con una ventana de berilio colocada en la parte frontal del detector por donde entra la radiación al detector. De esta manera se evita que por la baja temperatura a la que se encuentra el detector se condense en el la humedad del ambiente.



#### 4.3 Eficiencia y respuesta.

De acuerdo con la definición de eficiencia absoluta dada en el capítulo 3 por medio de la ecuación (3.4), ésta es la razón entre el número de pulsos registrados por un detector entre el número de cuantos emitidos por una fuente de radiación. Para detallar mejor el concepto de eficiencia de un detector, inicialmente se considera que se tiene una fuente de radiación puntual la cual emite radiación monoenergética  $E_x$  de manera isotrópica con una intensidad  $Y_{o}$ . Por fuente puntual se está entendiendo que el origen de la radiación se encuentra localizado en una región muy pequeña del espacio, esto, además, no hace referencia a una fuente radiaciva pequeña solamente, sino que se puede referir a cualquier otra causa, como la incidencia de un haz colimado de electrones sobre un material, siempre y cuando este haz sea pequeño. Luego, si el espacio que existe entre la fuente y el detector se encuentra en vacío, entonces la intensidad de radiación emitida por la fuente que puede

alcanzar al detector es  $\frac{\Omega}{4\pi}Y_0$ . De la cantidad de radiación emitida, solamente llegará a registrase aquella que

logre atravesar la ventana de berilio, el contacto de oro, la capa muerta y una posible capa de hielo (debida a un mal vacío en el crióstato), de esta manera se puede alcanzar la región activa del detector y se logra interaccionar con ella.

De acuerdo con lo anterior se tiene que la eficiencia absoluta del detector se puede expresar como:

$$\varepsilon_0(E_x) = \frac{\Omega}{4\pi} \left[ \exp\left(-\sum_j \mu_j(E_x) x_j\right) \right] f_{esc}(E_x) \left(1 - \exp\left(-\mu_{Sl}(E_x) D\right)\right)$$
(4.1)

donde  $\Omega$  es el ángulo sólido que subtiende el detector con respecto al punto donde se genera la radiación, las  $x_J$  son los espesores de los diferentes componentes del detector que los fotones deben de atravesar antes de llegar a la región activa del detector que son: la ventana de berlio  $x_{Be}$ , el contacto de oro  $x_{Au}$ , la zona o capa muerta  $x_0$  y una posible capa de hielo  $x_{hie}$ . Los  $\mu_J(E_x)$  son los coeficientes de atenuación en los componentes de espesor  $x_J$  para los fotones de energía  $E_x$  que emite la fuente de radiación, D es el espesor del detector y  $f_{exc}(E_x)$  es un factor de corrección debido a los rayos X K  $\alpha$  de si licio o germanio que logran e scapar del volumen activo del detector de silicio o germanio respectivamente. El origen de este factor se explica más adelante en este mismo capítulo. En la sección 4.5 se muestran los procedimientos o consideraciones que se efectúan para la determinación de los valores de estos componentes y factores del detector. La interpretación que se tiene para esta ecuación (4.1) es que el término entre corchetes cuadrados indica la fracción de fotones que alcanzan la región activa del detector, en tanto que el último término entre paréntesis indica la fracción de fotones que interaccionan con la región activa del detector. En la figura 4.3 se muestra la gráfica de la eficiencia absoluta teórica de un detector de silicio con litio difundido.

Si además se colocan filtros enfrente del detector la eficiencia total del sistema está dada por:

$$\varepsilon(E_x) = T(E_x) \varepsilon_0(E_x) \tag{4.2}$$

donde  $T(E_x)$  es la transmisión de los fotones de energía  $E_x$  a través de los diversos filtros, de tal manera que puede expresarse también como:

$$T(E_x) = \exp\left(-\sum_i \mu_i(E_x)t_i\right)$$
(4.3)

donde los  $\mu_i(E_x)$  son los coeficientes de atenuación para los fotones de energía  $E_x$  en los filtros de espesor  $t_i$ .


Figura 4.3 Eficiencia de un detector de estado sólido para rayos X.

De las expresiones anteriores se deduce que los fotones que scan ampliamente absorbidos en los filtros y capas frontales del detector no son observados pues no alcanzan la región activa donde pueden ser registrados. Esto es lo que ocurre con los fotones de baja energía. En el caso de los rayos X característicos sus energías son proporcionales al valor del número atómico del elemento que los emite. Así pues, para elementos pesados con mayor número atómico la energía de sus fotones característicos es entonces más grande que la de elementos más ligeros. En detectores convencionales por lo regular sólo se detectan rayos X de sodio cuando su intensidad es muy grande. Los detectores no pueden registrar rayos X de elementos ligeros como el carbón u oxígeno.

Existen algunos sistemas en donde el cristal del detector se encuentra en el interior de un crióstato con ventana removible, el detector, junto con la fuente de rayos X, se encuentra en una cámara a la cual se le hace vacío, una vez que se alcanza una presión baja se retira la ventana dejando totalmente descubierta la cara frontal del detector. Con este sistema es posible detectar rayos X del Boro (Z=5). Estos s istemas no son comunes y presentan el inconveniente de que el cristal debe ser tratado frecuentemente para eliminar los depósitos de hielo y contaminantes que se condensan en su superficie pero, estos tratamientos son costosos y van degradando las propiedades originales del cristal.



Los fotones más energéticos no presentan estos problemas con los absorbedores frontales pues prácticamente no son atenuados en ellos. De esta manera pueden alcanzar directamente la zona activa sin una disminución en su intensidad original. La eficiencia del detector alcanza su valor máximo para los fotones de estas energías, pues prácticamente todos los fotones que lleguen al detector interaccionarán con la zona activa y son registrados. El intervalo de energías para los cuales se obtiene la eficiencia máxima está dado por el ancho D del cristal, pues a mayor ancho, la región activa es más grande y la probabilidad de interacción es también mayor, al seguir aumentando la energía de los fotones sucede que algunos de éstos pueden atravesar todo el cristal sin interaccionar con el, de esta manera, se registran menos fotones de los que en realidad llegan al detector por lo cual la eficiencia disminuye. Para fotones muy energéticos la eficiencia del detector resulta ser muy baja porque la probabilidad de que interaccionen con el detector es muy pequeña.

El inconveniente que presentan los detectores de estado sólido para rayos X es que si el valor de D se hace muy grande entonces se degrada la eficacia para la colección de carga. Esto no es problemático cuando se quiere la detección de gammas donde se utilizan espesores grandes de D y cristales de germanio.

La respuesta del detector en cuanto a su linealidad y resolución depende de la cantidad estadística de carga que se genere en la zona activa debido a la interacción con un fotón y a la eficacia para la colección de la carga generada. En el caso de un haz de rayos X totalmente monoenergético, la forma de su espectro de rayos X consiste en un pico con forma semejante a la de una Gaussiana, debido a posibles efectos de mala colección de carga este pico debe tener una cola en el lado de baja energía. Sabiendo que realidad no es posible tener una fuente de rayos X o gammas totalmente monoenergética, debido a que los procesos de generación de rayos X y gammas siempre producen electrones secundarios en las fuentes que generan el espectro continuo de radiación. De esta manera, el pico de la radiación monoenergética debe de sobreponerse con un fondo continuo de radiación el cual, depende de la forma en como se excita a los átomos para producir los rayos X. Esta superposición con el fondo de radiación complica más la forma del espectro y puede hacer difícil el proceso de deconvolución de un espectro de rayos X. Se han realizado varios estudios sobre la forma de los picos producidos utilizando fuentes en las que el fondo de radiación se reduce o mantiene constante. En términos generales, estos estudios [Schole, Campbell 90, Campbell 96] indican que la función de forma de un pico monoenergético  $F(E_x)$  sin incluir su pico de escape (sección 4.5.9), puede describirse como la composición de las siguientes funciones de forma:

$$F(E_x) = G(E_x) + S(E_x) + CE(E_x) + CC(E_x)$$
(4.4)

donde  $G(E_x)$  corresponde a una función Gaussiana,  $S(E_x)$  es una meseta o función escalón que se extiende desde la energía cero hasta  $E_x$ ,  $CE(E_x)$  es una cola exponencial y CC(Ex) es una cola corta. En la figura 4.4 se muestra un diagrama de la forma de las componentes del pico mencionadas. La determinación de los parámetros asociados con estos elementos permite efectuar la deconvolución de los espectros utilizando la forma completa de los picos [Maxwell 89, Maxwell 95, Lepy].

En la figura 4.5 se muestra un espectro típico de rayos X inducido con protones que se obtiene con un detector de estado sólido y se indica al correspondiente elemento que genera cada uno de los picos de rayos X.



Figura 4.4 Diagrama de un pico monoenergético de rayos X registrado con un detector de estado sólido. En la figura se muestran las diversas componentes que dan forma al pico.



Figura 4.5 Espectro típico de rayos X obtenido usando un detector de estado sólido.



## 4.4 Determinación experimental de la eficiencia.

Como se ha indicado, la eficiencia del detector es una de las propiedades fundamental de los detectores para rayos X que debe de ser bien conocida, especialmente para aplicaciones de tipo cuantitativo, para esto, una posible opción es tomar la eficiencia a partir de la Ecuación (4.1) en donde los valores de los diversos parámetros se obtenidos directamente de las especificaciones del detector dadas por el fabricante, así como midiendo la geometría del detector dentro del dispositivo experimental. Sin embargo lo más recomendable es medir directamente la eficiencia del detector, esto puede hacerse de varias maneras que son descritas en las cuatro secciones siguientes.

#### 4.4.1 Medida de la eficiencia utilizando fuentes radiactivas.

La determinación de la eficiencia del detector se puede hacer utilizando fuentes radiactivas calibradas, a partir de las cuales se conoce la intensidad de las diversas líneas de emisión [Hansen]. Entonces el número de rayos gamma o X de energía *E* producidos por una fuente de tipo puntual y que son registrados por el detector son:

$$Y_{s} = A_{0} \Gamma(E) f_{c} \varepsilon(E) \tag{4.5}$$

donde  $Y_x$  es el número de fotones de energía E detectados,  $A_0$  es la actividad de la fuente radiactiva,  $\Gamma(E)$  es el número de fotones de energía E emitidos por decaimiento y  $f_c$  es un factor de corrección por la atenuación en el encapsulado de la fuente. Si se conocen  $A_0$  y  $\Gamma(E)$  entonces la eficiencia para fotones de energía E se determina a partir de:

$$\varepsilon(E) = \frac{Y_x f_c}{A_0 \Gamma(E)} \tag{4.6}$$

En la tabla 4.1 se muestran las principales fuentes radiactivas que resultan ser más convenientes para calibrar los detectores de estado sólido para fotones de baja energía. El inconveniente que presenta el uso de fuentes radiactivas como método para determinar la eficiencia del detector es que no existen muchas fuentes accesibles, además de que las líneas de emisión que producen son mayores que 4 keV.

## 4.4.2 Métodos por inducción de rayos X en blancos delgados.

Como se señalo en la sección anterior, para medir la eficiencia absoluta del detector a energías menores de 4 keV se requiere de otros métodos, el más recurrido es el uso de películas delgadas en las que se conoce su composición elemental y densidad atómica por unidad de área.

## 4.4.2.1 Consideraciones generales de la inducción de rayos X en blancos delgados.

Considérese una película delgada de unos cientos de nanómetros sobre un sustrato, se pueden inducir rayos X en esta película ya sea incidiéndole un haz monoenergético de rayos X, electrones o partículas cargadas, con energía  $E_0$ . En este caso el número  $Y_x$  de rayos X de energía  $E_x$  correspondientes a la línea de emisión K inducidos en algún elemento especifico a de la película delgada está dado por:

$$Y_{x}(E_{x}) = N_{O}\varepsilon(E_{x})\sigma^{\kappa}(E_{0})\omega_{x}N_{a}tF_{x}$$

$$(4.7)$$

donde  $\varepsilon(E_x)$  es la eficiencia del sistema de detección para fotones de energía  $E_x$ ,  $N_Q$  es el número de partículas incidentes sobre la película (fotones, electrones o iones),  $\sigma^K(E_q)$  es la sección eficaz de ionización de la capa atómica K del átomo *a* por las partículas incidentes,  $\omega_x$  es la fluorescencia de rayos X del átomo *a* para la capa K.  $N_a$  es la densidad atómica del elemento *a* en la película de espesor *t*, finalmente,  $F_x$  es un factor de

corrección debido a la atenuación en la misma película de los rayos X inducidos. De esta expresión puede despejarse y obtenerse el valor de la eficiencia  $e(E_x)$  del sistema si se conocen las demás cantidades.

| Fuente             | Linea<br>(Incluyendo cualquier<br>radiación Auger) | Energia | Intensidad I          | 1/1γ                  |
|--------------------|--|---------|-----------------------|-----------------------|
| <sup>31</sup> Cr   | Ka   | 4.95    | 0.1988 +0.0010        | 2.018 +0.021          |
|                    | Кβ   | 5.43    | $0.0270 \pm 0.0003$   | 0.274 ±0.0056         |
| <sup>54</sup> Mn   | Κα   | 5.412   | 0.2234 ±0.0011        | 0.2234 ±0.0011        |
|                    | К <i>β</i>   | 5.95    | $0.0305 \pm 0.00034$  | $0.0305 \pm 0.00034$  |
| 57Co               | Ka   | 6.397   | 0.5020 ±0.014         | 0.5863 ±0.016         |
|                    | Kβ   | 7.06    | 0.0691 ±0.0020        | 0.0807 ± 0.0024       |
|                    | <b>y14</b>   | 14.41   | 0.093 ± 0.002         | $0.1086 \pm 0.0023$   |
| <sup>65</sup> Zn   | Κα   | 8.041   | 0.3439 ±0.0017        | 0.6790 ±0.0044        |
|                    | кв   | 8.91    | 0.0479 ± 0.00034      | 0.0946 ±0.00077       |
| <sup>75</sup> Se   | Ka   | 10.327  | 0.4919 ±0.0036        | 0.8273 ±0.013         |
|                    | Кβ   | 11.72   | 0.0760 ± 0.00068      | 0.1278 ±0.0021        |
| <sup>85</sup> Sr   | Ka   | 13.375  | 0.4975 +0.0025        | 0.5035 +0.0035        |
|                    | Kβ   | 15.86   | 0.0880 ± 0.00062      | 0.089 ± 0.00077       |
| ۳Y                 | Ka   | 14.142  | 0.5111 +0.0025        | 0.5425 +0.0035        |
|                    | Kβ   | 16.765  | 0.0929 ±0.00065       | 0.0986 ±0.00081       |
| <sup>109</sup> Cd  | Κα   | 22.10   | 0.8200 +0.012         | 22.47 +0.58           |
|                    | K.8:   | 24.93   | $0.1468 \pm 0.0022$   | 4022 +0.107           |
|                    | Kβ   | 25.46   | 0.0258 ±0.00063       | 0.706 ±0.023          |
| <sup>113</sup> Sn  | Κα   | 24.14   | 0.795 + 0.003         | 1.225 +0.009          |
|                    | K8;  | 27.27   | 0.143 + 0.003         | 0.220 + 0.005         |
|                    | K Bi   | 27.86   | 0.0269 ± 0.00055      | 0.0414 ±0.00087       |
| <sup>137</sup> Cs  | Κα   | 32.06   | 0.0565 +0.0007        | 0.0663 + 0.0008       |
|                    | K <i>B</i> ;                                       | 36.4    | $0.0109 \pm 0.00014$  | 0.0127 ±0.00016       |
|                    | Kβ   | 37.3    | $0.00274 \pm 0.00006$ | $0.00322 \pm 0.00008$ |
| <sup>133</sup> Ba  | Κα   | 30.85   | 0.9946 ±0.0124        | 1.604 ±0.023          |
|                    | к <i>8</i> ;                                       | 35.0)   | $0.2316 \pm 0.0025$   | 0.374 ±0.006          |
|                    | KB;  | 35.8    | -                     | ··· _                 |
|                    | γ53  | 53.2    | 0.0218 ±0.00034       | 0.0352 ±0.006         |
| 1 <sup>34</sup> Ce | Κα   | 33.30   | 0.633 ± 0.009         | 0.792 ±0.011          |
|                    | Kβí  | 37.8    | $0.121 \pm 0.003$     | $0.151 \pm 0.004$     |
|                    | Kβ   | 38.7    | $0.0310 \pm 0.0008$   | 0.0388 ± 0.0009       |
| <sup>241</sup> Am  | La   | 13.9    | 0.133 ±0.004          | 0.371 ±0.011          |
|                    | Lηβ  | 17.8    | $0.194 \pm 0.006$     | 0.542 ±0.017          |
|                    | Ly   | 20.8    | 0.049 ±0.002          | 0.137 ±0.006          |
|                    | γ26  | 26.35   | 0.024 ±0.001          | 0.067 ±0.003          |
|                    | <b>759</b>   | 59.54   | 0.3582 ± 0.0012       | 1 –                   |

Tabla 4. l Principales fuentes radiactivas utilizadas para calibrar detectores de rayos X. Se indican las intensidades de las líneas de emisión comúnmente utilizadas. Inicialmente,  $Y_r(E_r)$  se obtiene directamente del espectro de rayos X producido, i ntegrando el número de cuentas que hay en su pico correspondiente. En el caso de que la radiación excitadora sean fotones entonces se tiene que las secciones eficaces de ionización en la ecuación (4.7) corresponden a interacciones fotoeléctricas como se indica en la sección 2.1, por lo que en este caso pueden obtenerse a partir de tablas de coeficientes de atenuación [Veigele, Storm, Theisen, Henke, Leroux], o mediante los programas de cómputo ATTENV4 de Orlic et al. [Orlic] o el XCOM [Berger]. Cuando la excitación se hace con electrones la expresión para la sección de ionización se vuelve más compleja pues depende de parámetros que involucran al mismo blanco no sólo en su composición química [Powell]. Para el caso en el que la excitación se hace con protones sus correspondientes secciones eficaces de ionización de capas K se pueden obtener de funciones de referencia [Paul86] comparadas con el modelo teórico ECPSSR (Perturbed Stationary States with increase atomic binding, PSS, Coulomb deflection, C, Energy Loss, E, and Relativistic correction, R) [Brand]. Este modelo teórico es el más utilizado para el análisis de procesos de ionización por incidencia de iones. Estas secciones de referencia se pueden obtener directamente de tablas [Paul 89] o de los valores teóricos del modelo ECPSSR y sustituyéndolos en las funciones de referencia [Paul 86]. Los valores teóricos de la ECPSSR pueden calcularse utilizando algoritmos de computadora [Smit]. La fluorescencia  $\omega_x$  se conoce por medio de cálculos teóricos que consideran métodos autoconsistentes de Hartree-Fock-Slater para el cálculo de las funciones de onda de los orbitales atómicos [Krause, Bambynek, Scofield, Chen].

El producto  $N_a t$  es la densidad de átomos de tipo *a* por unidad de área de la película. El valor de  $N_a t$  se puede medir por diferentes métodos como pueden ser la elipsometría [Azzam], medición directa del área de depósito y su masa con una balanza, métodos de evaluación de propiedades eléctricas, u otros. Si se emplean técnicas nucleares como la retrodispersión de lones, RBS (Rutherford Backscattering Spectrometry) [Chu], reacciones nucleares, NRA (Nuclear Reaction Analysis) [Bird, Tesmer], activación neutrónica, NAA (Nuclear Activation Analysis) [Vandecasteele], etc., para caracterizar a la película se tiene la ventaja de que el valor que proporcionan es absoluto, es decir, no depende de ningún otro estándar. El factor de corrección  $F_x$  puede calcularse u na v ez que h an sido determinados todos los parámetros antes m encionados, pues involucra a l espesor y composición de la película, forma de excitación, etc.

La medición de  $N_Q$  es una cantidad complicada de determinar con exactitud, especialmente si se está excitando con fotones. En caso de excitar con electrones o iones puede medirse la carga total acumulada que se ha hecho incidir en el blanco. Pero aun así, la medición de la carga total acumulada suele presentar una incertidumbre grande pues siempre se tiene la presencia de corrientes de fuga a través del blanco que producen en la medida un valor erróneo de la carga total acumulada. Hasta la fecha no existe un dispositivo o procedimiento que permita eliminar totalmente estas corrientes de fuga.

## 4.4.2.2 Determinación de la eficiencia utilizando PIXE y RBS.

Cuando los sistemas de detección están asociados con un montaje para análisis de rayos X por incidencia de partículas, PIXE (Particle Induced X-ray Emission) [Johanson], la determinación de la eficiencia utilizando blancos delgados se puede realizar simultáneamente con RBS. Con la combinación de estas dos técnicas es posible eliminar la dependencia en el valor de  $N_Q$  [Lennard]. Para esto se considera que sobre la película delgada se hace incidir un haz de iones como protones, por conveniencia la energía del haz  $E_0$  debe ser de más de 0.5 MeV para tener valores de las secciones de ionización aceptables y menores de 3 MeV para evitar la aparición de fenómenos nucleares que interfieran con la retrodispersión de Rutherford. En la figura 4.6 se muestra el diagrama del dispositivo experimental comúnmente utilizado para efectuar el análisis por PIXE y RBS simultáneamente.

El número  $Y_P$  de iones incidentes sobre u n b lanco d elgado que son retrodispersados y registrados c on u n detector de partículas en una dirección  $\theta_d$  con respecto a la incidencia del haz es:

$$Y_{P} = N_{O} \Omega_{P} \varepsilon_{P} \sigma_{R} (E_{0}, \theta_{d}) N_{a} t F_{R}$$
(4.8)

donde  $\Omega_P$  es el ángulo sólido del detector de partículas,  $\varepsilon_P$  es la eficiencia del detector para registrar los iones retrodispersados,  $\sigma_R$  es la sección de dispersión de Rutherford para los iones de energía  $E_0$  y  $F_R$  es un factor de

corrección por efectos de pérdida de energía del proyectil dentro de la película delgada. Por lo general, el detector de partículas empleado es del tipo de estado sólido como el de barrera superficial o los passivated planar detector, (ver sección 3.5.4.1). En este caso el detector se escoge con una zona de depleción tal que todos los iones retrodispersados llegan a esta zona donde depositan el resto de energía que lleven y por lo tanto siempre serán detectados. Así, en estos casos la eficiencia del detector de partículas es prácticamente igual a la unidad por lo cual no se volverá a considerarla en los cálculos siguientes. Si los átomos del tipo *a* que se están considerando tienen una masa atómica mayor que la del sustrato y además ésta es muy diferente a la de otros átomos componentes de la misma película, entonces los iones retrodispersados por los átomos del tipo *a* aparecen representados en el espectro RBS como un pico o meseta aislada. En este caso el valor de  $Y_p$  se obtiene directamente del espectro de RBS integrando el número de cuentas en el pico o meseta señalado antes.



Figura 4.6 Representación esquemática del dispositivo experimental para detectar rayos X y protones retrodispersados.

La sección de Rutherford con respecto al sistema de coordenadas fijo en el laboratorio está dada por la expresión [Chu]:

$$\frac{d \sigma_{R} (E, \theta)}{d \Omega} = \left( \frac{Z_{1} Z_{2} e^{2}}{2 E \operatorname{sen}^{2} \theta} \right)^{2} \frac{\left( \left[ m_{2}^{2} - m_{1}^{2} \operatorname{sen}^{2} \theta \right]^{1/2} + \cos \theta \right)^{2}}{\left( m_{2}^{2} - m_{1}^{2} \operatorname{sen}^{2} \theta \right)^{1/2}}$$
(4.9)

donde  $Z_1$  y  $Z_2$  corresponden a los números atómicos del ion incidente y al del átomo de tipo a del blanco, en tanto que  $m_1$  y  $m_2$  son sus respectivas masas atómicas. Para iones con energías menores de alrededor 1 MeV,



4-11

es conveniente multiplicar la sección de Rutherford por un factor de corrección que considere el efecto de apantallamiento del núcleo del átomo blanco por sus propios electrones. Una expresión para la sección de retrodispersión considerando este factor de corrección debido al apantallamiento electrónico está dada por L'Ecuyere [L'ecuyere]:

$$\sigma = \sigma_R \left( 1 - \frac{0.049 Z_1 Z_2^{4/3}}{E_{CM}} \right)$$
(4.10)

donde  $E_{CM}$  es la energia del ion incidente con respecto al centro de masa, aunque puede ponerse la energia con respecto al sistema de laboratorio sin producir un error apreciable. Otra expresión esta dada por Huttel [Huttel]:

$$\sigma(\theta) = \sigma_{R}(\theta) \left\{ 1 - b \frac{Z_{1} Z_{2} (Z_{1}^{2/3} + Z_{2}^{2/3})^{1/2}}{E} [(1 - c) + c/sen(\theta/2)] \right\}$$
(4.11)

donde  $\theta$  es el ángulo de retrodispersión,  $b = 4.7 \times 10^{5}$  MeV y c = 0.3 de acuerdo con la función de apantallamiento de Lenz-Jensen [Nastasi], o experimentalmente como  $b = (3.3 \pm 0.1) \times 10^{5}$  MeV y  $c = (0.6 \pm 0.1)$ . La diferencia entre estos dos factores de corrección no es significativa para protones con energías mayores que 400 keV.

De la ecuación (4.8) puede despejarse el número  $N_Q$  de iones incidentes sobre el blanco multiplicado por la densidad atómica por unidad de área  $N_a t$  de tal manera que al sustituirse en la ecuación (4.7) la eficiencia del detector de Si(Li) queda como:

$$\varepsilon(E_x) = \frac{Y_x \sigma_R (E_0, \theta_d) \Omega_R}{Y_P f_a \omega_a^K \sigma^K (E_0)} \frac{F_R}{F_X}$$
(4.12)

en donde el factor  $f_{\alpha}$  es la fracción de rayos X K $\alpha$  producidos en las emisiones radiativas K, en esta ecuación se hace uso de la inducción de rayos X en capas atómicas K, pues para la técnica PIXE en el caso de protones las secciones de ionización son muy bien conocidas para esta capa en particular de todos los elementos. El factor  $f_{\alpha}$  se emplea cuando es posible resolver con el detector los picos de rayos X K $\alpha$  de los K $\beta$  del átomo blanco del tipo a, cuando los dos picos anteriores no pueden ser resueltos se toma en total el efecto de las dos líneas y por tanto el factor  $f_{\alpha}$  se considera igual a la unidad.

Cuando las películas delgadas utilizadas como blanco tienen un espesor muy pequeño o la energía de los iones incidentes es suficientemente grande entonces los factores de corrección por atenuación y frenado del ion incidente dados por  $F_R$  y  $F_X$  prácticamente son iguales a uno y no son necesarios. El factor de corrección  $F_R$  puede considerarse como :

$$F_R = \frac{Y_R}{Y_R^0} \tag{4.13}$$

en donde  $Y_R$  es el número de iones retrodispersados cuando se considera al frenado en la película y  $Y_R^o$  es el número de estos iones cuando no hay frenado, es decir, el espesor de la película tiende a cero. Análogamente se tiene que para  $F_x$  se considera como:

$$F_X = \frac{Y_X}{Y_X^0} \tag{4.14}$$

donde  $Y_X$  es el número de rayos X producidos cuando se considera su atenuación y el frenado de los iones en la misma película blanco, en tanto que  $Y_X^0$  es para el caso en que no hay ni atenuación ni frenado del ion.

## 4.4.2.3 Determinación de los factores de corrección.

En el caso de que la película sea gruesa, para determinar la eficiencia utilizando conjuntamente PIXE y RBS, es conveniente considerar los factores de corrección dados por las ecuaciones (4.13) y (4.14), para determinar el factor de corrección  $F_R$  se parte de la forma correcta de estimar al número de iones retrodispersados, en este caso se tiene que  $Y_R$  debe ser:

$$Y_{R} = \int_{0}^{T} N_{Q} \Omega_{R} \sigma_{R}(E(t),\theta) N_{a} dt = k_{R}^{\prime} \int_{0}^{T} \sigma_{R}(E(t),\theta) dt$$

$$\tag{4.15}$$

donde t es el espesor de la película, E(t) es la energía del proyectil en función de la profundidad t y  $k_R$ ' es una constante. Al tomar la integral sobre todos los elementos de espesor dt de la película se está considerando el cambio en la sección de Rutherford debido al frenado del ion incidente, como la sección de Rutherford varía como el inverso del cuadrado de la energía, ver la ecuación (4.9), entonces se puede escribir:

$$Y_{R} = k_{R} \int_{0}^{T} \frac{dt}{E(t)^{2}}$$
(4.16)

donde  $k_R$  es una constante. Si no se toma en cuenta el frenado del ion, entonces se tiene que  $Y_R^o$  es:

$$Y_{R}^{0} = k_{R} \frac{T}{E_{0}^{2}}$$
(4.17)

donde  $E_0$  es la energía de incidencia del ion. Con estas dos últimas ecuaciones se puede determinar el factor  $F_R$  utilizando la ecuación. (4.13). De una manera análoga a lo anterior se tiene que el número total de rayos X inducidos y detectados con el detector considerando efectos de frenado del ion y atenuación en la misma película se tiene que  $Y_X$  es:

$$Y_{x} = k'_{x} \int_{0}^{t} \sigma^{\kappa}(E(t)) \exp(-\mu t / \cos \theta_{x}) dt$$
(4.18)

en donde  $k_X'$  es una constante;  $\mu$  es el coeficiente de atenuación en la película para los rayos X K $\alpha$  inducidos en los átomos del tipo a y  $\theta_X$  es el ángulo de salida de los rayos X en el blanco, es decir, es el ángulo que se forma entre la normal al blanco y el detector. Para cambios pequeños en la energía del ion se tiene que la sección eficaz de ionización puede escribirse como:

$$\sigma^{\kappa} \approx cte \, E^{\alpha} \tag{4.19}$$

donde cte y  $\alpha$  son constantes para cada tipo de átomo blanco en particular. De esta manera se tiene que:

$$Y_{X} = k_{X} \int_{0}^{T} E(t)^{\alpha} \exp(-\mu t/\cos\theta_{X}) dt$$
(4.20)

Si no se toman en cuenta el frenado y la atenuación entonces,  $Y_x^o$  queda como:

$$Y_X^0 = k_X T E_0^\alpha \tag{4.21}$$

4-13

Con base en todas las estimaciones anteriores y a partir de las ecuaciones (4.13) y (4.14) se tiene que el cociente de los factores de corrección es;

$$F(E_0, \Delta E) = \frac{F_R}{F_X} = E_0^{\alpha+2} \frac{\int_0^T \frac{dt}{E(t)^2}}{\int_0^T E(t)^{\alpha} e^{-\mu t/\cos\theta_X} dt}$$
(4.22)

Para calcular las integrales en la ecuación anterior es necesario recurrir a los poderes de frenado del ion dentro del material, los poderes de frenado dan la pérdida de energía de un ion al atravesar un elemento de superficie de un material. Para el caso de un material monoelemental y homogéneo el poder de frenado  $\varepsilon_f$  para un ion de energía  $E_q$  se define como:

$$\varepsilon_f(E_0) = -\frac{1}{N} \frac{dE}{dx}$$
(4.23)

donde N es el número de átomos por unidad de volumen y dE/dx es el cambio en la energía de un ion de energía incidente  $E_0$  al atravesar un espesor de material dx. El signo menos se pone para indicar que el cambio en la energía del ion es negativo. Si un material homogéneo está compuesto por moléculas de la forma  $A_n B_m$ entonces el poder de frenado en conjunto a partir de la ley de Bragg es:

$$\varepsilon_{f}\left(E_{0}\right) = n \varepsilon_{f}^{A}\left(E_{0}\right) + m \varepsilon_{f}^{B}\left(E_{0}\right)$$

$$(4.24)$$

donde  $e_f^A$  y  $e_f^B$  son los poderes de frenado para los elementos atómicos A y B, en este caso tiene que considerarse a N como la densidad de moléculas del tipo  $A_n B_m$  por unidad de volumen.

Existen expresiones teóricas y semiempíricas para estos factores de frenado de protones [Ziegler], a partir de estas expresiones se cuenta con tablas y algoritmos de computadora para su cálculo. Para intervalos pequeños de energía la pérdida de energía de un ion al atravesar un material puede estimarse como:

$$S(E_0) = N\varepsilon_f(E_0) = \frac{dE}{dx} = k_\varepsilon E_0^{\beta}$$
(4.25)

donde  $k_{\varepsilon} \neq \beta$  son constantes, integrando esta última ecuación puede obtenerse el espesor x que ha recorrido un ion dentro de un material cuando tiene un cambio de energía de  $E_0$  a E como:

$$x = \frac{1}{k_{\varepsilon}(1-\beta)} \left[ E^{1-\beta} - E_0^{1-\beta} \right]$$
(4.26)

Con a yuda de la ecuación (4.25) se puede hacer un cambio de variable en la integral que a parecen en el numerador de la ecuación (4.22) de tal manera que:

$$\int_{0}^{T} \frac{dt}{E(t)^{2}} = \int_{E_{0}}^{E_{1}} \frac{dE}{k_{\varepsilon} E^{\beta+2}} = \frac{1}{k_{\varepsilon}(\beta+1)} \Big[ E_{0}^{-(\beta+1)} - E_{1}^{-(\beta+1)} \Big]$$
(4.27)

donde  $E_1$  es la energía final de ion después de haber atravesado la película de espesor T, luego, en la integral que aparece en el denominador de la ecuación (4.22) se desarrolla el término exponencial como:

$$\int_{0}^{T} E(t)^{\alpha} e^{-\mu t/\cos\theta_{x}} dt \approx \int_{0}^{T} E(t)^{\alpha} \left( 1 - \frac{\mu t}{\cos\theta_{x}} + \frac{1}{2} \left( \frac{\mu t}{\cos\theta_{x}} \right)^{2} - \dots \right) dt \qquad (4.28)$$

Despreciando términos cuadráticos en t y expresando t en términos de la ecuación (4.26) se tiene que la integral anterior queda como;

$$\int_{0}^{T} E(t)^{\alpha} e^{-\mu t \cos \theta_{x}} dt \approx \frac{k_{\varepsilon} (1-\beta) + \mu E_{0}^{1-\beta}}{k_{\varepsilon}^{2} (1-\beta)(1+\alpha+\beta)} \left( E_{1}^{1+\alpha+\beta} - E_{0}^{1+\alpha+\beta} \right) - \frac{\mu \left( E_{1}^{2+\alpha-2\beta} - E_{0}^{2+\alpha-2\beta} \right)}{k_{\varepsilon}^{2} (1-\beta)(2+\alpha-2\beta)}$$
(4.29)

Estas integrales pueden simplificarse si la energía  $E_1$  se expresa como  $E_1 = E_0 - \Delta E$  donde  $\Delta E$  es el cambio en la energía del proyectil al atravesar toda la película de espesor T, si la película es delgada entonces se puede expresar  $\Delta E = S(E_0) T$  evaluando S para la energía de incidencia  $E_0$ . Además se tiene que  $\Delta E$  es mucho más pequeño que  $E_0$  por lo que pueden desarrollarse de manera binomial todos los términos de la forma:

$$(E_{0} - \Delta E)^{n} = E_{0}^{n} + n E_{0}^{n-1} \Delta E + \frac{n(n-1)}{2} E_{0}^{n-2} (\Delta E)^{2} + \dots$$
(4.30)

Despreciando los términos cuadráticos en adelante y sustituyendo todos estos desarrollos en las integrales (4.29) y (4.27) se llega a la siguiente expresión para el factor de corrección:

$$F(E_{0}, \Delta E) = \frac{F_{R}}{F_{X}} = \frac{1 + \frac{1}{2}(\beta + 2)\frac{\Delta E}{E_{0}}}{1 - \frac{1}{2}\left(\alpha - \beta + \frac{\mu E_{0}}{S(E_{0})}\right)\frac{\Delta E}{E_{0}}}$$
(4.31)

Esta expresión para los factores de corrección fue desarrollada inicialmente por Pajek [Pajek 89].

#### 4.4.3 Interpolación de la eficiencia entre valores medidos.

Los métodos para medir la e ficiencia del detector u tilizando fuentes radiactivas a sí c omo la inducción de rayos X en películas delgadas proporcionan valores específicos p ara cada línea de emisión utilizada. Para extrapolar la eficiencia a otras energías de fotones, se utiliza el ajuste de funciones a los datos experimentales. La exactitud del ajuste de estas funciones a los valores experimentales depende de su forma. La función más utilizada para estos ajustes es la de Gallagher y Cipolla [Gallagher] dada como:

$$\varepsilon(E_x) = \Omega' \exp(-\alpha E_x^{-\beta}) \left( 1 - \exp(-\gamma E_x^{-\delta}) \right)$$
(4.32)

donde  $\Omega'$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma'$  y  $\delta$  son los parámetros que se ajustan a los datos experimentales, para este tipo de ajustes se utiliza el método de mínimos cuadrados no lineales [Bevington]. La función dada por la ecuación (4.32) se escoge porque es semejante a expresión de la eficiencia del detector dada por la ecuación (4.1), de esta manera el primer término exponencial del lado derecho de la ecuación. (4.32) corresponde al efecto de la atenuación de los fotones antes de llegar a la región activa, en tanto que el término entre paréntesis se asocia con la radiación que interacciona con el detector.

Una ventaja de poder expresar a la eficiencia en términos de la función (4.32) en lugar de la (4.1) es que su determinación para una energía dada, solamente depende del cálculo de la función utilizando cinco parámetros, en cambio, si se utiliza la expresión (4.1) se necesitan conocer los coeficientes de atenuación de la

radiación incidente en cada uno de los componentes del detector lo cual vuelve el cálculo de la eficiencia muy complicado.

Pajek [Pajek 89] encuentra que para algunos detectores el ajuste anterior no es bueno a bajas energías de los fotones. El propone que el espesor de capa muerta puede tener una dependencia radial con respecto al centro del detector, donde se espera que la capa muerta cerca del centro sea más delgada que en los extremos (ver sección 4.5.6). Para considerar este efecto se agrega un nuevo término exponencial a la función que se está ajustando el cual tiene la forma:  $\exp(-\eta)$ , donde  $\eta$  es un nuevo parámetro que debe ajustarse.

## 4.4.4 Método de Montenegro.

Un método alternativo e interesante, para la calibración del detector a bajas energías es el proporcionado por Montenegro *et al.* [Montenegro], este método considera únicamente las intensidades de las líneas K $\alpha$  y K $\beta$ emitidas y su relación teórica K $\alpha$ /K $\beta$  de los átomos de un elemento específico en la muestra. Aunque este método presenta problemas para su aplicación debido a que el efecto Auger-Radiativo [Åberg, Marageter]hace complicado extraer la cantidad real de rayos X K $\beta$  que son registrados por el detector, aun así, la idea central de obtener la información necesaria simplemente del espectro de rayos X lo hace atractivo, por lo cual es conveniente mencionarlo. Además, si se utilizan correcciones exactas para el efecto Auger-Radiativo es posible que este método sea útil.

Este método se fundamenta en la expresión de Gallagher y Cipolla dada por la ecuación (4.32) para la parte correspondiente a bajas energías:

$$\varepsilon = \Omega' \exp(-\alpha E^{-\beta}) \tag{4.33}$$

que puede expresarse también como:

$$\log \varepsilon = \log \Omega' - \frac{\alpha}{E^{\beta}} \tag{4.34}$$

Derivando esta última ecuación con respecto a la energía de los rayos X se tiene que:

$$\frac{d(\log\varepsilon)}{dE} = \frac{\alpha \beta}{E^{\beta+1}}$$
(4.35)

Evaluando la derivada en la energía promedio:

$$\overline{E} = (E_{\alpha} + E_{\beta})/2 \tag{4.36}$$

donde  $E_{\alpha}$  y  $E_{\beta}$  corresponden a las energías de las líneas K $\alpha$  y K $\beta$  emitidas por un determinado elemento en el blanco, se tiene que:

$$\frac{d(\log\varepsilon)}{dE}\Big|_{E} = \frac{\alpha\beta}{E^{\rho+1}} \approx \frac{\log\varepsilon_{\rho} - \log\varepsilon_{\alpha}}{\Delta E} = \frac{\log(\varepsilon_{\rho}/\varepsilon_{\rho})}{\Delta E}$$
(4.37)

donde  $\varepsilon_a$  y  $\varepsilon_\beta$  corresponden a las eficiencias de las líneas K $\alpha$  y K $\beta$ . Por otro lado también se tiene que como:

 $\frac{d \log E}{dE} \bigg|_{E} = \frac{1}{E} \qquad \text{se puede aproximar } \Delta E \approx \overline{E} \Delta \log E \quad \text{, donde } \Delta E = E_{\beta} - E_{\infty} \text{ con lo cual se puede}$ 

expresar a la ecuación (4.37) como:

$$\frac{\log(\varepsilon_{\beta}/\varepsilon_{\alpha})}{\log(\varepsilon_{\alpha}/\varepsilon_{\alpha})} \approx \frac{\alpha\beta}{\overline{E}} = \lambda$$
(4.38)

Tomando el hecho de que las intensidades  $Y_{\alpha}$  y  $Y_{\beta}$  de rayos X registradas por el detector para las líneas K $\alpha$  y K $\beta$  emitidas están dadas por las ecuaciones:

$$Y_{\beta} = N_{Q} \varepsilon_{\beta} \sigma^{\kappa} \omega_{\kappa} f_{\beta} N_{a} t \tag{4.39}$$

$$Y_{a} = N_{Q} \varepsilon_{a} \sigma^{\kappa} \omega_{\kappa} f_{\alpha} N_{a} t \qquad (4.40)$$

donde  $f_{\alpha}$  y  $f_{\beta}$  corresponden a la fracción de rayos X K $\alpha$  y K $\beta$  por cada fotón emitido por una ionización en la capa K. Al dividir estas dos últimas ecuaciones una entre la otra se tiene que:

$$\frac{\dot{Y}_{\beta}}{Y_{\alpha}} = \frac{\varepsilon_{\beta}}{\varepsilon_{\alpha}} \frac{f_{\beta}}{f_{\alpha}} = \frac{\varepsilon_{\beta}}{\varepsilon_{\alpha}} \gamma' \qquad (4.41)$$

donde  $\gamma$ ' es el cociente de las intensidades K $\beta$ /K $\alpha$  y que se determina de valores teóricos [Scofield], de esta manera se puede obtener:

 $\frac{\varepsilon_{\beta}}{\varepsilon_{\alpha}} = \frac{Y_{\beta}}{Y_{\alpha}} \gamma'^{-1}$ (4.42)

Este valor para el cociente de eficiencias se calcula a partir de las áreas de los picos K $\alpha$  y K $\beta$  y luego multiplicando por  $\gamma^{*1}$ , de esta manera conociendo el valor del cociente  $\varepsilon_{p}/\varepsilon_{\alpha}$  es posible calcular el valor de  $\lambda$  dado por la ecuación (4.38), por lo que si se obtiene el logaritmo de  $\lambda$  se tiene que:

$$\log \lambda = \log \alpha \beta - \beta \log E \tag{4.43}$$

De esta manera si se grafica  $\log \lambda$  vs  $\log E$  se puede determinar  $\alpha$  y  $\beta$  ajustando una línea recta. Finalmente el valor de  $\Omega$ ' se determina a partir del uso de fuentes radiactivas de acuerdo con el método de la sección 4.4, len la zona donde se encuentra la meseta de la eficiencia.

Para determinar los valores de  $\gamma$  y  $\delta$  en la parte de alta energía se recurre al uso de fuentes radiactivas. Entonces la ecuación (4.32) se expresa como:

$$y = 1 - \exp(-\gamma/E^{\circ}) \tag{4.44}$$

donde

У

$$y = \frac{\varepsilon}{\Omega'} \exp(\alpha E^{-\beta})$$
(4.45)

Para energías mayores que 20 keV el factor  $\exp(\alpha E^{-\beta})$  es muy cercano a uno. Por esta razón para la zona de alta energía este factor puede ser sustituido por 1 y entonces se tiene que  $y = \varepsilon / \Omega^2$ . Por lo tanto la ecuación (4.44) se puede expresar como:

 $\log\left[\log\frac{1}{1-\gamma}\right] = \log\gamma - \delta\log E \tag{4.46}$ 

Entonces el valor de y se determina a partir de la eficiencia medida con fuentes radiactivas, con lo cual los parámetros  $\gamma$  y  $\delta$  se pueden conocer ajustando una línea recta a los puntos de la gráfica log $(\log(1-y)^{-1})$  vs log*E*.

## 4.5 Determinación de las características de los detectores de estado sólido para rayos X

En esta sección se muestran los diversos procedimientos que han sido presentados para determinar a los diversos parámetros y características de los detectores de rayos X.

## 4.5.1 Linealidad

En los detectores de estado sólido la generación de portadores de carga es directamente proporcional a la energía de la radiación incidente, en caso de que la respuesta del detector no sea lineal con la energía de la radiación incidente, esto indica que el cristal presenta severos daños en su estructura.

Para determinar la linealidad de un detector lo que se hace e s u tilizar líneas características de rayos X o gammas de fuentes radiactivas, luego se grafica la energía de los rayos X que llegan al detector contra el número del canal donde se encuentra el centroide del pico correspondiente a la línea característica, esta gráfica debe de ser totalmente lineal para un detector en buen estado.

## 4.5.2 Resolución en energía.

Las mejores resoluciones para rayos X y gammas de baja energía se obtienen en detectores con tamaños y espesores D pequeños, por lo común estos espesores no son mayores que 5 mm, los detectores para gammas de alta energía son gruesos cristales de germanio de varios centímetros, por el contrario como los rayos X generan una cantidad mucho menor de pares electrón-hueco en el silicio o germanio se tiene que para espesores grandes del cristal se puede perder mucha de esa carga por recombinación y no se obtenga una buena señal de salida.

La determinación de la resolución del detector se efectúa determinando el FWHM (ver sección 3.3.2) de los picos de rayos X característicos que son generados por el detector, para ver como es su dependencia con la energía de los fotones se hace una gráfica del cuadrado del FWHM contra la energía de su correspondiente rayo X o gamma característica, es de esperarse que esta gráfica tenga la forma de la ecuación (3.11), en caso de que así sea es posible determinar el factor de Fano F, a partir de las ecuaciones (3.10) y (3.11). Lo ideal es tener un factor de Fano cercano a la unidad pero para los detectores de estado sólido por lo regular es menor que la unidad. Para energías menores que 40 keV se encuentra que la dependencia en energía de los detectores de estado sólido de tipo pin es descrita de una manera adecuada como [Knoll]:

$$(FWHM)^2 = W_{elec}^2 + (2.35)^2 \xi F E$$
(4.47)

donde  $W_{elec}$  corresponde al ruido electrónico del sistema de detección,  $\xi$  es la energía necesaria para ionizar al material del detector a la temperatura de 77 °K (que es de 3.81 eV para el Silicio y 2.96 eV para el germanio), F es el factor de Fano y E es la energía del fotón.

## 4.5.3 Ángulo sólido y factores geométricos.

De acuerdo con la expresión (4.1) la eficiencia depende del ángulo sólido que subtienda el detector con respecto a la fuente de radiación, como se indica en la figura 4.7. Si se supone inicialmente que el detector tiene un área frontal activa  $A_a$  y una forma circular de radio a, en una primera aproximación, si la fuente se encuentra colocada sobre el eje normal de la cara frontal del detector a una distancia d muy grande de su superficie tal que d >> a, entonces el ángulo sólido que subtiende el detector es:

$$\Omega = \frac{A_a}{d^2} = \frac{\pi a^2}{d^2} \tag{4.48}$$

4-18

Cuando la fuente se encuentra cerca del detector la expresión anterior no es totalmente válida pues ésta corresponde a la del área de un elemento de superficie esférico en lugar del área  $m^2$  que es la de la superficie de la base del cono que genera este ángulo sólido. En este caso, el ángulo sólido que subtiende el detector es:

$$\Omega = \frac{\int_{A} dS}{r^2} = \frac{1}{r^2} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} r^2 \sin\theta d\theta d\phi = 2\pi (1 - \cos\alpha)$$
(4.49)

donde la integral de superficie se realiza sobre el área A la cual corresponde a una parte de la superficie de una esfera de radio r, los valor de r y  $\alpha$  están dados en términos de d y a por medio de las relaciones;



Figura 4.7 Ángulo sólido que subtiende el detector en función de la fuente de rayos X.

$$r^2 = a^2 + d^2 \tag{4.50}$$

$$\cos\alpha = \frac{d}{r} = \frac{d}{\sqrt{a^2 + d^2}}$$
(4.51)

Entonces el ángulo sólido que subtiende el detector al encontrarse a una distancia d de la fuente es:

$$\Omega = 2\pi \left( 1 - \frac{d}{\sqrt{a^2 + d^2}} \right) \tag{4.52}$$

Como se puede ver, el ángulo sólido depende, entre otras cosas, del tamaño del área activa frontal del detector y de aspectos geométricos involucrados en la distancia a la fuente, así como de la posición del cristal dentro del crióstato y de la profundidad promedio de interacción de los fotones con el detector. El conocimiento de estos factores contribuye a una mejor determinación de los efectos del ángulo sólido, los cuales se detallan en las siguientes tres secciones.

## 4.5.3.1 Área activa del detector.

Se entiende por área activa a la parte frontal de la superficie del detector que permite el registro de la radiación, es decir, la radiación que incida sobre esta área podrá ser registrada por el detector y, por la forma cilíndrica del detector es de esperarse que el área activa tenga forma circular.

El área activa se puede determinar directamente haciendo un barrido de la cara frontal del detector con un haz de fotones finamente colimado. Para esto se coloca enfrente de una fuente radiactiva un colimador con un orificio muy pequeño, la fuente junto con el colimador se montan en un sistema con movimiento horizontal y vertical. Colocando este dispositivo enfrente del detector se efectúa el barrido de la cara frontal, el barrido se realiza contando durante un tiempo fijo el número de fotones que son registrados en cada punto o posición enfrente del detector. De esta manera se va haciendo un mapeo que permite determinar las zonas de detección en la cara frontal del detector.

Estos barridos permiten también detectar regiones o zonas con imperfecciones del detector donde la radiación no sea registrada adecuadamente. El inconveniente de este tipo de barrido es que solamente puede hacerse con fotones de energías mayores que 4 keV. Si se quiere ver imperfecciones muy cercanas a la superficie lo más conveniente es el uso de fotones de menor energía, lo cual no es posible con fuentes radiactivas. Una manera de subsanar esta deficiencia en el método, se consigue depositando sobre la fuente radiactiva una cantidad de material de algún elemento ligero que al ser excitado por la fuente emita fotones de menor energía, aunque es de esperarse que el rendimiento de este proceso sea muy bajo.

## 4.5.3.2 Distancia del detector a la ventana de berilio.

Como el cristal de Si(Li) se encuentra en el interior de un crióstato al vacío no es posible determinar directamente su posición dentro del mismo, una manera sencilla de conocerla sería sacando una radiografia por rayos X del crióstato, de donde podría determinarse su posición. El inconveniente de este método está en la factibilidad de tener acceso a uno de estos equipos de rayos X o a poder desplazar el detector al lugar donde le puedan realizar la radiografía. Por lo regular el tamaño del dewar del detector no hace sencillo el desplazamiento del detector afuera de las regiones usuales de trabajo.

Una manera de determinar la distancia que hay de la ventana de berilio al detector es por medio de una fuente radiactiva puntual que pueda desplazarse a lo largo del eje que pasa por el centro del detector y que es perpendicular a la superficie frontal del detector. El centro del detector puede determinarse con base en el barrido efectuado para obtener el área activa, (ver sección 4.5.3.1). Si las distancias a las que se pone la fuente son grandes comparadas con el radio del detector entonces  $\Omega$  puede tomarse de la expresión dada por l a ecuación. (4.48) y de esta manera se tiene que la cantidad de fotones  $N_x$  de una energía  $E_x$  que emite la fuente y que son registrados por el detector varían como el inverso del cuadrado de la distancia d, pues se tiene que:

$$N_x = \varepsilon_0 \left( E_x \right) N_0 = k' \Omega N_0 = \frac{k^2}{d^2}$$
(4.53)

donde  $N_0$  es el número de fotones de energía  $E_x$  que emite la fuente, en tanto que k' y k son constantes, la distancia d puede descomponerse en la suma de la distancia  $d_1$  de la fuente a la ventana de berilio más la distancia  $d_0$  de la ventana a la superficie del detector, es decir,  $d = d_1 + d_0$ . Sustituyendo la suma de estas dos distancias en la ecuación anterior se obtiene la relación:

$$d_1 = \frac{k}{\sqrt{N_x}} - d_0 \tag{4.54}$$

Entonces para determinar el valor de  $d_0$  se utiliza una fuente radiactiva puntual que se coloca justo en el eje perpendicular al centro del área activa del detector, la fuente puntual se desplaza por el eje principal perpendicular al centro de la cara frontal del detector, se grafican los valores experimentales de  $(N_a)^{-1/2}$  para

diferentes distancias  $d_1$ , y a estos datos experimentales se l es ajusta u na línea recta donde la ordenada a l origen es igual a  $d_0$  de acuerdo con la ecuación (4.54).

En los casos en los que este experimento no pueda ser llevado a cabo en vacío, entonces se debe considerar un factor de corrección por atenuación de los rayos X de energía  $E_x$  en el aire, por lo que la relación anterior queda como:

$$\frac{d_1 = k \left(\frac{f_{men}}{N_x}\right)^{1/2} - d_0 \tag{4.55}$$

donde faten es el factor de atenuación dado por:

$$f_{alen} = e^{-\mu_{alre}d_1} = \exp(-\mu_{alre}d_1)$$
(4.56)

donde  $\mu_{aire}$  es el coeficiente de atenuación en el aire para cada energía de rayos X  $E_x$ .

#### 4.5.3.3 Dependencia del ángulo sólido con la energía del fotón.

Como se ha indicado antes, los fotones más energéticos son más penetrantes que aquellos de menor energía, esto origina, que la profundidad promedio  $z(E_x)$  dentro del cristal de Si(Li) a la cual interaccionan los fotones dependa de la energía  $E_x$ , siendo mayor para los fotones más energéticos, esto trae como consecuencia que el ángulo sólido dependa también de la energía de los fotones, como se muestra en la figura 4.8, por lo anterior, en las ecuaciones (4.48) y (4.52) para calcular el ángulo sólido debe de agregarse a la distancia d la profundidad  $z(E_x)$  de interacción promedio de los fotones [Hansen]. De esta manera, puede concluirse que la expresión para el ángulo sólido que debe ser utilizada en al ecuación (4.1) es:

$$\Omega = \Omega(E_x) = 2\pi \left( 1 - \frac{d + z(E_x)}{\left\{ \left[ d + z(E_x) \right]^2 + a^2 \right\}^{1/2}} \right)$$
(4.57)



Figura 4.8 Profundidad Z promedio a la cual interaccionan los rayos X en el interior del detector.

El cálculo de la profundidad promedio se hace de acuerdo c on relaciones e stadísticas, a sí, si P(x) es u na función de distribución de probabilidad no normalizada que depende de la variable x entonces el promedio de la variable x en un intervalo de 0 a L es:

$$\overline{x} = \frac{\int_{0}^{L} x P(x) dx}{\int_{0}^{L} P(x) dx}$$
(4.58)

En el caso que nos interesa se tiene que la cantidad  $e^{\mu}$  puede verse como una función de probabilidad de que un fotón interaccione con el cristal a una profundidad x, así la profundidad promedio  $z(E_x)$  dentro del cristal de Si(Li) a la cual interaccionan los fotones de energía  $E_x$  puede calcularse directamente de la expresión:

$$z(E_{x}) = \frac{\int_{0}^{D} ze^{-\mu_{SI}z} dz}{\int_{0}^{D} e^{-\mu_{SI}z} dz} = \frac{1 - e^{-\mu_{S}D} (1 + \mu_{SI}D)}{\mu_{SI} (1 - e^{-\mu_{S}D})}$$
(4.59)

donde  $\mu_{SI}$  es el coeficiente de atenuación en silicio para el fotón de energía  $E_x$  (En el caso de un detector con cristal de germanio se cambia  $\mu_{SI}$  por  $\mu_{Ge}$  que es el coeficiente de atenuación en germanio). Para fotones muy energéticos se tiene que  $\mu_{SI}$  tiende a cero por lo que entonces z = D/2. A algunos autores no les agrada este resultado y prefieren utilizar otras expresiones para  $z(E_x)$ .

Una forma alternativa para  $z(E_x)$  es considerarla como la distancia promedio en la cual se reduce a la mitad el número de fotones que interacciona con el detector [Smith]. Para calcular esta expresión primero se considera al número u de fotones de energía  $E_x$  que interaccionan con el detector:

$$u = I_0 \left( 1 - e^{-\mu_N D} \right) \tag{4.60}$$

de esta cantidad u de fotones que interaccionan con el detector; la mitad de ellos habrá interaccionado a la profundidad  $z(E_x)$  cuando:

$$\frac{u}{2} = \frac{I_0(1 - e^{-\mu_N D})}{2} = I_0(1 - e^{-\mu_N z})$$
(4.61)

De esta última expresión se deduce que:

$$z(E_x) = \frac{1}{\mu_{SI}} \log\left(\frac{2}{1 + e^{-\mu_{SI}D}}\right)$$
(4.62)

que corresponde a la distancia en la cual la radiación que interacciona con el detector ha disminuido a la mitad.

Para poder ver estos efectos en el ángulo sólido del detector se requiere que la fuente de radiación se encuentre muy cerca del cristal, en la mayoría de los casos estos efectos son muy pequeños y prácticamente imperceptibles. Cuando se tiene  $a \le d/10$ , el ángulo sólido del detector puede aproximarse con un error menor al 0.5% como:

$$\Omega(E) = \frac{\pi a^2}{(d+z(E))^2} = \Omega_F \frac{1}{(1+z(E)/d)^2}$$
(4.63)

4-22

donde se tiene que:

$$\Omega_F = \frac{\pi a^2}{d^2}$$

es el ángulo sólido de la cara frontal del detector.

#### 4.5.3.4 Corrección para fuentes no puntuales.

Hasta el momento todos los cálculos mostrados para el ángulo sólido del detector han considerado que la fuente de radiación es puntual, lo cual no siempre ocurre, en estos casos, en principio, se tendrá que efectuar una corrección al ángulo sólido que subtiende el detector, Cohen [Cohen] introduce un factor de corrección  $f_c(E)$  para el ángulo sólido dado por la expresión:

$$f_g(E) = \frac{2}{y} \left[ 1 - \frac{1}{\sqrt{1+y}} \right]$$
(4.65)

donde

$$y = \frac{a_s^2}{(d+z(E))^2}$$
(4.66)

y en donde a, es el radio de la fuente de radiación. De esta manera el ángulo sólido que subtiende el detector esta dado por:

$$\Omega(E) = f_g(E)\Omega_F \tag{4.67}$$

Por ejemplo, si  $a_s \le d/30$  entonces se tiene que  $0.999 \le f_g(E) < 1$ , con un error menor al 0.1%. Para los dispositivos experimentales comúnmente utilizados en las aplicaciones de PIXE en el Instituto de Física de la UNAM se tiene que  $f_g(E)$  prácticamente es igual a la unidad y el ángulo sólido puede tomarse a partir de la ecuación (4.52) con un error menor al 0.7%.

#### 4.5.4 Espesor de la ventana de Be.

El espesor de la ventana de berilio no se puede realizar directamente pues se encuentra fija en la ventana de entrada del crióstato del detector, algunos autores han recomendado que al momento de adquirir un detector de rayos X se solicite un pedazo de la misma lámina de berilio que fue utilizada para construir la ventana del detector, el grosor de esta lámina puede medirse directamente por varios métodos y serviría para dar confianza en el valor proporcionado por el fabricante.

Existe otro procedimiento alternativo, pero requiere del conocimiento de los espesores de las otras capas frontales del detector. La medida de estos espesores se detalla más adelante, pero por el momento se puede suponer que estos valores son conocidos. Entonces, una forma de medir el espesor de la ventana de berilio consiste en hacer incidir un haz de fotones finamente colimado perpendicular al centro del detector y posteriormente hacer incidir este haz al centro pero con una inclinación conocida. Relacionando el cambio en la intensidad de los rayos X debido a los absorbedores cuando la incidencia es normal y a un cierto ángulo de inclinación entonces puede determinarse el espesor de la ventana de berilio.

(4.64)

## 4.5.5 Espesor de la capa de hielo.

La degradación del vacío en el interior del crióstato da como resultado la posibilidad de aumentar la cantidad de hielo y contaminantes condensados en la cara frontal del detector, la manera de eliminar esta capa de hielo es dejando que el cristal llegue a la temperatura ambiente para que se evapore de la superficie la humedad condensada, posteriormente es necesario volver a reestablecer el vacío dentro de crióstato para eliminar toda contaminación dentro del mismo, una vez que el detector se encuentra en vacío nuevamente se enfría a la temperatura del nitrógeno líquido. Aun cuando el vacío dentro del crióstato no sea perfecto, lo más importante es que no entre aire que haga crecer el espesor de esta capa de hielo en muy corto tiempo.

Algunos detectores tienen crióstatos los cuales llevan un medidor de vacío integrado y una válvula para conectarse a una bomba de vacío, de esta manera puede monitorearse el vacío en su interior y en caso necesario s e puede efectuar el procedimiento anterior para reestablecer la eficiencia del detector, m uchos sistemas no cuentan con estos dispositivos, por lo cual, cada vez que se observe una degradación notoria de la eficiencia es necesario enviarlo a un taller donde se cuente con el equipo necesario para efectuar el tratamiento.

Una manera de medir el espesor de esta capa es haciendo incidir un haz de fotones colimado sobre el centro del detector a diferentes ángulos de incidencia con respecto a la superficie, en forma análoga a la que se propone para medir el espesor de la ventana de berilio, en este caso el efecto en la atenuación de los fotones para los diferentes ángulos de incidencia se asocia con el efecto de una ventana de berilio equivalente.

Como ya se dijo, más que preocuparse por el grosor de la capa de hielo es necesario ver si ésta no aumenta con el tiempo, para obtener el espesor de esta capa se suele comparar los efectos de degradación en la eficiencia de los fotones para bajas energías, así, el cambio en el tiempo que se encuentre en la eficiencia a bajas energías se asociará directamente con la capa de hielo.

#### 4.5.6 Espesor de la capa muerta.

El espesor de la capa muerta puede determinarse por medio de fluorescencia. Aquí se muestra como hacer este procedimiento si se tratara de un detector de silicio. Para el caso de un detector de germanio el procedimiento es semejante pero se cambian los coeficientes de atenuación del silicio por los del germanio y la fuente de rayos X para excitar a la capa K del germanio.

En un principio esto se lograr haciendo incidir sobre el detector un haz de rayos X monoenergético cuya energía sea un poco mayor que la de ionización de la capa K del silicio, de esta manera los rayos X incidentes interaccionarian por medio de efecto fotoeléctrico con mucho mayor probabilidad con la capa K del Si. Así se induciría la emisión de rayos X K del silicio que compone a la capa muerta. Suponiendo que la mitad de los rayos X producidos en la capa muerta se dirijan a la región activa, estos pueden ser detectados y su número es proporcional al espesor  $x_0$  de la capa muerta, en este caso el número de rayos X del haz incidente que interacciona con la capa atómica K del silicio de la zona muerta es:

$$(I_0 - I)_{\kappa} = I_0 (1 - e^{-\mu_{\tilde{M}}^{\kappa}(E_0)x_0}) = Y_0 (1 - e^{-\mu_{\tilde{M}}^{\kappa}(E_0)x_0})$$
(4.68)

donde  $I_0$  es la intensidad del haz incidente, I es la intensidad del haz transmitido al atravesar la capa muerta de espesor  $x_0$  y e l s ubíndice K que hace referencia a la producción d e una vacante en la capa K del silicio.  $\mu^{K}_{Si}(E_0)$  es el coeficiente de atenuación para los rayos X incidentes debido a la interacción con la capa atómica K del silicio. El número de fotones que ha interaccionado con la capa K deja un número igual de átomos de Si en estado excitado que e miten un electrón A uger o un fotón d e rayos X. El número de rayos X que son inducidos en la zona muerta es:

$$Y_{K} = Y_{0} \,\omega_{Si}^{K} \,(\,1 - e^{-\mu_{Si}^{K}(E_{0})x_{0}}\,) \tag{4.69}$$

donde  $Y_s$  es el número de rayos X K del silicio inducidos por el haz incidente de intensidad  $Y_0$  sobre la capa muerta<sup>1</sup>,  $\omega^{K}_{SI}$  es el rendimiento de la fluorescencia del Si para la capa K. Nuevamente, suponiendo que la mitad de estos rayos X K del Si inducidos se dirigen hacia la región activa del detector se tiene entonces que el número de fotones registrados es:

$$Y_{s} = \frac{1}{2} Y_{0} \omega_{SI}^{K} \left( 1 - e^{-\mu_{SI}^{K}(\mathcal{E}_{n}) x_{n}} \right) \mathcal{E}_{SIK}^{\prime}$$
(4.70)

donde  $\varepsilon'_{SIK}$  es la eficiencia para los rayos X K del silicio pero que en este caso no consideran los efectos de atenuación en la capa de oro, ventana de berilio y cualquier otro filtro. De esta última ecuación se tiene que para determinar  $x_0$  es necesario conocer  $\gamma_0$ , el cual se puede determinar a partir del número de fotones incidentes que son detectados  $C_d$ :

$$C_{d} = Y_0 e^{-\mu_{M}^{c}(E_0)x_0} \varepsilon_{x0}^{\prime}$$
(4.71)

donde  $\varepsilon'_{,s0}$  es la eficiencia p ara los rayos X incidentes sobre la zona muerta sin considerar los e fectos de atenuación en la capa de oro, ventana de berilio y cualquier otro filtro, el coeficiente de atenuación  $\mu'_{si}(E_{al})$  para la transmisión de los fotones incidentes es una buena aproximación si  $E_0$  se encuentra cercana al borde de absorción d e la capa K del S i, esta aproximación permite simplificar los cálculos, sustituyendo (4.70) en (4.71) se tiene que:

$$Y_{x} = \frac{1}{2} \frac{C_{d} \,\omega_{SI}^{K} \,\varepsilon_{SIK}^{\prime}}{\varepsilon_{x0}^{\prime}} \left( e^{\mu_{SI}^{K}(E_{0})x_{0}} - 1 \right)$$
(4.72)

por lo que el espesor  $x_0$  es:

$$x_{0} = \frac{1}{\mu_{SI}^{\kappa}(E_{x})} \log \left( \frac{2 Y_{x} \varepsilon_{x0}}{C_{d} \omega_{SI}^{\kappa} \varepsilon_{SIK}} + 1 \right).$$
(4.73)

De acuerdo con Hansen et al, (Hansen), como  $x_0$  es muy pequeña se puede desarrollar en serie la exponencial de la ecuación (4.72) con lo que:

$$x_{0} \approx \frac{2 Y_{x} \varepsilon_{x0}'}{C_{d} \omega_{Sl}^{K} \mu_{Sl}^{K} (E_{x}) \varepsilon_{SlK}'} .$$

$$(4.74)$$

La mejor manera de hacer esta medición es utilizando radiación de sincrotrón que ha sido monocromada a una energía  $E_0$ , esta energía se escoge ligeramente mayor que la del borde de absorción de la capa K del silicio, cuando no es posible tener rayos X de la energía deseada sino más bien rayos X correspondientes a emisión de líneas atómicas, entonces para efectuar la medición de  $x_0$  lo más conveniente sería utilizar rayos X K $\alpha$  del azufre o cloro, los rayos X del fósforo aunque son los que más excitan a la capa K del Si no son los más adecuados debido a que la resolución del detector no podría distinguir en la cola del pico de P K $\alpha$  a la línea Si K $\alpha$ .

Pajek [Pajek 89] encuentra que para algunos detectores el ajuste anterior no es bueno a bajas energías de los fotones, afirma que el espesor de capa muerta puede tener una dependencia radial con respecto al centro del detector, donde se esperaría que la capa muerta cerca del centro sea más delgada que en los extremos, este efecto es el responsable de tener que introducir el término  $\exp(-\eta)$  en el ajuste de la ecuación (4.32) de la sección 4.4.3.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Aqui  $Y_0$  se refiere a los fotones que inciden sobre la capa muerta y no a los fotones incidentes sobre el detector desde la ventana de berilio.

## 4.5.7 Espesor del contacto de oro.

El espesor del contacto de oro también puede determinarse en forma análoga al de la capa muerta haciendo fluorescer al oro del contacto, en este caso los rayos X que emite el oro y que son más fáciles de detectar son los rayos X de la línea L $\alpha$ , la línea L $\alpha$  se produce por transiciones electrónicas de las capas M<sub>4</sub> y M<sub>5</sub> a una vacante en la capa L<sub>3</sub>.

Se hace incidir un haz monoenergético de rayos X sobre el contacto de oro cuya energía  $E_0$  es suficiente para excitar a la capa L. En este caso el número de rayos X del haz incidente que interaccionaría con las subcapas atómicas L del oro y que da como resultado la producción de una vacante en la subcapa L<sub>3</sub> está dado como (ver la sección 1.4.1);

$$(I_0 - I)_{L3} = I_0 \Big[ (f_{13} + f_{12} f_{23}) (1 - e^{-\mu_{Au}^{L1}(E_0) x_{Au}}) + f_{23} (1 - e^{-\mu_{Au}^{L2}(E_0) x_{Au}}) + (1 - e^{-\mu_{Au}^{L2}(E_0) x_{Au}}) \Big]$$

$$(4.75)$$

donde  $I_o$  es la intensidad del haz incidente, I es la intensidad del haz transmitido a través de la capa de oro de espesor  $x_{Au}$ , el subíndice  $L_3$  hace referencia a la atenuación que producirá como resultado una vacante en la capa  $L_3$  del oro. Los coeficientes  $f_{ij}$  son los coeficientes de Coster-Kronig, los cuales dan la probabilidad de que ocura una transición no radiativa de un electrón de la capa  $L_i$  a la capa  $L_j$ , donde j < i. Los  $\mu^{L_i}_{Au}(E_0)$  son coeficientes de atenuación para los fotones de energía  $E_0$  debido a la interacción con la capa  $L_i$  del átomo de oro. Como el espesor  $x_{Au}$  es pequeño las exponenciales en la ecuación anterior pueden desarrollarse en serie de potencias, de tal manera que la intensidad de rayos X L $\alpha$  que se produce por la vacante en la capa  $L_j$  está dado por:

$$Y_{\lambda L\alpha} = Y_0 \,\omega_{L3} \,f_{L\alpha} \left[ \,(f_{13} + f_{12} \,f_{23} \,) \,\mu_{Au}^{L1}(E_0) \,x_{Au} + f_{23} \,\mu_{Au}^{L2}(E_0) \,x_{Au} + \mu_{Au}^{L3}(E_0) \,x_{Au} \right] \tag{4.76}$$

donde  $\omega_{L3}$  e s la fluorescencia de la capa L<sub>3</sub> que representa la probabilidad de que durante una transición electrónica a la capa L<sub>3</sub> se produzca la emisión de un fotón,  $f_{L\alpha}$  es la razón de emisión de rayos X L $\alpha$  producidos por una transición radiativa a la capa L<sub>3</sub>. Suponiendo que la mitad de estos rayos X producidos va a dirigirse hacia la región activa del detector se tiene que el número de estos fotones que es registrado es:

$$Y_{XL\alpha} = \frac{1}{2} Y_0 \varepsilon'_{AuL\alpha} \omega_{L3} f_{L\alpha} x_{Au} \left[ (f_{13} + f_{12} f_{23}) \mu^{L1}_{Au} (E_0) + f_{23} \mu^{L2}_{Au} (E_0) + \mu^{L3}_{Au} (E_0) \right]$$
(4.77)

donde  $\varepsilon'_{AUL\alpha}$  es la eficiencia del detector para la línea L $\alpha$  del oro sin considerar los efectos de la ventana de berilio y otros filtros anteriores al contacto de oro. En forma análoga a la ec. (4.71) se tiene que el número de rayos X incidentes que atravesaron al contacto de oro y que son registrados por el detector está dado por

$$C_{d} = Y_{0} e^{-\mu_{Au}(\mathcal{E}_{0})x_{0}} \varepsilon_{x0}^{\prime} \approx Y_{0} \varepsilon_{x0}^{\prime}$$

$$\tag{4.78}$$

donde  $\varepsilon_{n0}$  es la eficiencia del detector para los rayos X incidentes sin considerar los efectos de la ventana de berilio y otros filtros anteriores al contacto de oro, la aproximación indicada en la ecuación anterior puede hacerse debido a que la energía de la línea L $\alpha$  oro tiene una energía grande (9.7 keV) y que no es atenuada considerablemente en el mismo contacto de oro y la capa muerta de silicio. A partir de las dos ecuaciones anteriores el espesor del contacto de oro puede determinarse como:

$$x_{Au} = \frac{2 Y_{L\alpha} \varepsilon'_{x0}}{\omega_{L3} f_{L\alpha} C_d \varepsilon'_{AuL\alpha}} \left[ (f_{13} + f_{12} f_{23}) \mu^{L1}_{Au} (E_0) + f_{23} \mu^{L2}_{Au} (E_0) + \mu^{L3}_{Au} (E_0) \right]^{-1}$$
(4.79)

4-26

Como se ha mencionado en la sección 4.5.6, lo más conveniente para determinar  $x_{Au}$  es utilizar radiación monocromática, sin embargo, cuando no es posible tener directamente la energía deseada del haz, se recurre a las líneas de emisión atómica que exciten de manera más probable a la capa. En este caso las líneas atómicas de emisión más convenientes son las K del bromo, rubidio, estroncio y circonio, pero en este caso sucede que con excepción del bromo estos elementos excitan tanto sus líneas K $\alpha$  como K $\beta$ , por lo que es necesario considerar que se está excitando con dos líneas diferentes a la capa L del oro, la cual es la contribución de cada una al número de rayos X detectados:

$$Y_{XL\alpha} = \frac{1}{2} Y_{0K\alpha} \varepsilon'_{AuL\alpha} \omega_{L3} f_{L\alpha} x_{Au} \Big[ (f_{13} + f_{12} f_{23}) \mu^{L1}_{Au}(K\alpha) + f_{23} \mu^{L2}_{Au}(K\alpha) + \mu^{L3}_{Au}(K\alpha) \Big] + \frac{1}{2} Y_{0K\beta} \varepsilon'_{AuL\alpha} \omega_{L3} f_{L\alpha} x_{Au} \Big[ (f_{13} + f_{12} f_{23}) \mu^{L1}_{Au}(K\beta) + f_{23} \mu^{L2}_{Au}(K\beta) + \mu^{L3}_{Au}(K\beta) \Big]$$

$$(4.80)$$

donde  $Y_{0K\alpha}$  y  $Y_{0K\beta}$  son las intensidades de las líneas K $\alpha$  y K $\beta$  incidentes en la capa de oro las  $\mu^{\mu}_{Au}(K\alpha)$  y  $\mu^{\mu}_{Au}(K\beta)$  son los coeficientes de atenuación de las líneas incidentes K $\alpha$  y K $\beta$ . De esta manera  $x_{Au}$  queda dado como:

$$x_{Au} = \frac{2Y_{L\alpha}}{\omega_{L3} f_{L\alpha} \varepsilon'_{AuL\alpha}} \left\{ \frac{C_{dK\alpha}}{\varepsilon'_{0K\alpha}} \left[ (f_{13} + f_{12}f_{23}) \mu_{Au}^{L1}(K\alpha) + f_{23} \mu_{Au}^{L2}(K\alpha) + \mu_{Au}^{L3}(K\alpha) \right] + \frac{C_{0K\beta}}{\varepsilon'_{0K\beta}} \left[ (f_{13} + f_{12}f_{23}) \mu_{Au}^{L1}(K\beta) + f_{23} \mu_{Au}^{L2}(K\beta) + \mu_{Au}^{L3}(K\beta) \right] \right\}^{-1}$$
(4.81)

En el caso de que sean utilizadas la líneas K del bromo para la determinación de  $x_{Au}$  el problema se simplifica debido a que solamente sus respectivas líneas K $\alpha$ l, K $\beta$ l y K $\beta$ 2 son capaces de ionizar únicamente a la capa L<sub>3</sub> por lo que las transiciones Coster Kronig entre las subcapas L del oro ya no es necesario considerarlas. En este caso  $x_{Au}$  se determina a partir de:

$$x_{Au} = \frac{2Y_{L\alpha}}{\omega_{L3} f_{L\alpha} \varepsilon'_{AuL\alpha}} \left[ \frac{C_{dK\alpha}}{\varepsilon'_{0K\alpha}} \mu^{L3}_{Au}(E_{K\alpha}) + \frac{C_{dK\beta}}{\varepsilon'_{0K\beta}} \mu^{L3}_{Au}(E_{K\beta}) \right]^{-1}$$
(4.82)

o también se puede expresar como:

$$x_{Au} = \frac{2 Y_{L\alpha} \varepsilon'_{0K\alpha}}{\omega_{L3} f_{L\alpha} C_{dK\alpha} \varepsilon'_{AuL\alpha}} \left[ \frac{I(K\alpha_1)}{I(K\alpha)} \mu^{L3}_{Au}(E_{K\alpha}) + \frac{I(K\beta)}{I(K\alpha)} \mu^{L3}_{Au}(E_{K\beta}) \right]^{-1}$$
(4.83)

donde las cantidades  $I(K\alpha I) / I(K\alpha) = y I(K\beta) / I(K\alpha)$  son los cocientes de la intensidad de emisión de la línea Br Ka1 entre la Ka y la Br K $\beta$  y la Ka.

## 4.5.8 Espesor de la zona activa.

El espesor D de la zona activa del detector es prácticamente igual al ancho del cristal de silicio o germanio que se esté utilizando, así puede considerarse debido a que la capa muerta se estima de menos de 1  $\mu$ m y el ancho del detector es de entre 3 mm y 5 mm.

La forma experimental para medir este espesor, es a partir de la eficiencia del detector, determinada experimentalmente utilizando fuentes radiactivas para la zona de fotones de alta energía, y comparándola con el ajuste de la ecuación (4.32). Entonces se tiene que la eficiencia correspondiente a la parte de alta energía de la ecuación (4.1) debe ser igual a la del ajuste de la ecuación (4.32), de e sta manera se puede hacer una aproximación a la parte de alta energía de la eficiencia del detector como:

$$\varepsilon_0(E_x) \approx \frac{\Omega}{4\pi} (1 - \exp(-\mu(E_x)D) = \Omega'(1 - \exp(-\gamma E_x^{-\delta}))$$
(4.84)

donde se conocen los valores de  $\mu(E_{\lambda})$ ,  $\gamma y \delta$ . De la ecuación anterior y tomando en cuenta que  $\Omega/4\pi = \Omega$ ' se llega a que:

$$\mu(E_x)D = \gamma E_x^{-\delta}$$
(4.85)

Finalmente, de la ecuación anterior se puede ver que si se hace la gráfica de los valores de los coeficientes de atenuación  $\mu(E_x)$  contra  $\gamma E_x^{-3}$  se tiene que al ajustar una línea recta a los puntos experimentales la pendiente tiene el valor de  $D^{(1)}$ . Así efectuando este ajuste se determina el valor del espesor activo del detector.

## 4.5.9 Picos de escape.

La producción de pares electrón hueco en la región activa del detector se origina debido a los procesos de interacción de los fotones con el cristal de silicio. Como se ha mencionado, uno de estos procesos de interacción es el efecto fotoeléctrico, en este caso si la radiación tiene una energía  $E_x > 1.84$  keV entonces puede producirse la ionización de la capa K del silicio, produciendo subsecuentemente la emisión de un fotón de rayos X correspondiente a la línea Si K de 1.74 keV o un electrón Auger. Este fotón o electrón Auger emitido dentro del cristal va a interaccionar también con los otros átomos de Si produciendo nuevos pares electrón-hueco los cuales van a contribuir al total de pares colectados para la formación de la señal de salida del detector.

Si un cuanto de radiación interacciona con el cristal de Si muy cerca de su superficie puede suceder que el fotón de Si K producido no interaccione con ningún otro átomo del cristal y por lo tanto puede abandonar el detector sin depositar ahí toda su energía. En este caso, la carga colectada por los contactos eléctricos del detector es menor que la esperada y es equivalente a la de un fotón con una energía menor que 1.74 keV respecto a la del fotón original. El resultado final de este proceso en el espectro de radiación para fotones de energía  $E_x$  mayor que 1.74 keV es la presencia de un pico padre de energía  $E_x$  y otro pico menor correspondiente a una energía  $E_x - 1.74$  keV, como se muestra en la figura 4.4. A este último se le conoce como pico de escape, pues su origen esta relacionado con el escape de fotones del detector. Por lo regular la intensidad de los picos de escape es menor que 1.5 % de la del pico padre. Aunque su intensidad es pequeña comparada con la del pico padre, en algunos casos su tamaño puede ser comparable al de líneas de rayos X que se está tratando de determinar y por lo tanto su superposición con ellas puede crear problemas en los análisis por rayos X.

Una manera de estimar la intensidad de estos picos de escape es por medio de las suposiciones hechas por Reed [Reed] en las que se considera que la radiación incidente lo hace perpendicular al detector y que solamente los fotones que escapen por la cara frontal del detector van a contribuir con los picos de escape. Para esto se considera a los cuantos de radiación que interaccionan en el cristal del detector a una distancia xde la superficie produciendo la emisión de fotones Si K. Luego la fracción de ángulo sólido en la que pueden ser emitidos es:

$$\frac{d\Omega}{4\pi} = \frac{2\pi \operatorname{sen} \theta \, d\theta}{4\pi} = \frac{1}{2} \operatorname{sen} \theta \, d\theta \tag{4.86}$$

donde  $\theta$  es el ángulo entre la distancia x perpendicular a la superficie de la cara frontal del detector y el camino de longitud r que se necesita para alcanzar la superficie como se muestra en la figura 4.9. Luego, la cantidad  $dI_{\theta}$  de rayos X Si K generados a una profundidad x y emitidos en un ángulo sólido  $d\Omega$  que forma un ángulo  $\theta$  con respecto a la superficie y que escapan del detector por su parte frontal es:

$$d^{2}I_{\theta} = dI_{x} \frac{d\Omega}{4\pi} e^{-\mu_{ss}(E_{x}=1.74)x \sec\theta} = \frac{1}{2} dI_{x} e^{-\mu_{ss}(E_{x}=1.74)x \sec\theta} \sin\theta d\theta$$
(4.87)

donde  $dI_x$  es la intensidad de los rayos X Si K producidos por la radiación incidente en un espesor dx a una profundidad x adentro del cristal de Si(Li) y  $\mu_{St}(E_x = 1.74)$  es el coeficiente de atenuación en silicio para los fotones de energía 1.74 keV de la línea Si K. Para conocer  $dI_x$  se determina el número de cuantos de radiación incidente que van a interaccionar con la capa K del silicio en una capa de espesor dx a una profundidad x dentro del cristal es:

$$dI = I_0 \mu_{si}(E_0) e^{-\mu_{si}(E_0)x} dx$$
(4.88)

donde  $I_0$  es la intensidad de los cuantos de radicación que inciden perpendicularmente sobre el detector,  $\mu_{Si}(E_0)$  es el coeficiente de atenuación para la radiación incidente de energía  $E_0$  en silicio. De la cantidad dl de cuantos que interaccionan con el Si, se tiene que la fracción de éstos que generan la emisión de fotones Si K está dada por:

$$\omega_{SI}^{\kappa} \left( \frac{\mu_{SI}^{\kappa}(E_0)}{\mu_{SI}(E_0)} \right) = \omega_{SI}^{\kappa} \left( \frac{1 - r_{\kappa}}{r_{\kappa}} \right)$$
(4.89)

donde  $\mu_{S}^{K}(E_{0})$  es el coeficiente de atenuación en Si debido a una interacción con la capa K y  $r_{K}$  es la razón de salto en el borde de absorción de la capa K del silicio. De esta manera se tiene que:

$$dI_{x} = \omega_{SI}^{\kappa} \left( \frac{1 - r_{\kappa}}{r_{\kappa}} \right) dI = \omega_{SI}^{\kappa} \left( \frac{1 - r_{\kappa}}{r_{\kappa}} \right) I_{0} \mu_{SI}(E_{0}) e^{-\mu_{SI}(E_{0})x} dx$$
(4.90)

La fracción o proporción  $d\zeta$  de rayos X Si K producidos en el cristal a una profundidad x con respecto a la radiación incidente  $I_0$  sobre el detector y que logra escapar por la cara frontal dentro de un ángulo sólido  $d\Omega$  que forma un ángulo  $\theta$  con la cara frontal del detector es (ver figura 4.9):

$$d^{2}\zeta = \frac{d^{2}I_{\theta}}{I_{0}} = \frac{1}{2}\omega_{S}^{K}\left(\frac{1-r_{K}}{r_{K}}\right)\mu_{S}(E_{0}) e^{-(\mu_{S}(E_{1}=1.74)\sec\theta + \mu_{S}(E_{0}))x} \sin\theta d\theta dx \qquad (4.91)$$

Suponiendo que el detector tenga una profundidad y una área frontal infinita entonces la fracción de rayos X K del silicio producidos por la radiación incidente que logra escapar del detector es:

$$\zeta = \frac{1}{2}\omega_{Si}^{\kappa} \left(\frac{1-r_{\kappa}}{r_{\kappa}}\right) \mu_{Si}(E_0) \int_0^{\infty} \int_0^{\pi/2} e^{-(\mu_{Si}(SiK) \sec \theta + \mu_{Si}(E_0))x} \sin \theta \, d\theta \, dx \tag{4.92}$$

con lo cual

$$\zeta = \frac{1}{2} \omega_{SI}^{\kappa} \left( \frac{1 - r_{\kappa}}{r_{\kappa}} \right) \left\{ 1 - \frac{\mu_{SI}(SiK)}{\mu_{SI}(E_0)} \log \left( 1 + \frac{\mu_{SI}(E_0)}{\mu_{SI}(SiK)} \right) \right\}.$$
 (4.93)

4-29



Figura 4.9 Representación del escape de rayos X K del Si emitidos a una profundidad x por la cara frontal del cristal del detector.

De esta manera se tiene que  $\zeta$  es la probabilidad de que un fotón de rayos X que interaccione con el detector produzca el escape de un fotón Si K.

Con base en todo lo anterior se tiene que una manera de ver el factor  $f_{esc}$  que aparece en la expresión (4.1) para la eficiencia del detector de Si(Li) es que tiene que hacer referencia a los fotones Si K producidos en el detector por la radiación  $E_0$  y que no van a contar en el pico final que se obtenga para  $E_0$ . Entonces se tiene que:

$$f_{esc} = 1 - \zeta \,. \tag{4.94}$$

Una expresión muy importante en el análisis por espectroscopía de rayos X es la razón  $\kappa$  entre la intensidad del pico de escape con respecto a su pico padre, la cual está dada como:

$$\kappa = \frac{\text{intensidad del pico de escape}}{\text{Intensidad del pico padre}} = \frac{I_0 \zeta}{I_0 (1-\zeta)} = \frac{\zeta}{(1-\zeta)}$$
(4.95)

Se ha encontrado que la expresión (4.93) es una muy buena aproximación para la consideración de los picos de escape cuando la radiación incide perpendicular a la cara frontal del detector de Si(Li), cuando la radiación no lo hace de esta manera entonces se observa un cambio en la probabilidad  $\zeta$ , encontrándose por lo regular un aumento de ésta. Una manera experimental de determinar  $\zeta$  en propuesta por Johansson [Johansson 82], y consiste en medir directamente los factores  $\kappa$  para fotones con diversas energías *E* incidiendo sobre el detector y considerando el hecho de que los coeficientes de atenuación son aproximadamente proporcionales a CE<sup>k</sup> donde *C* y *k* son constantes, el valor de  $\zeta$  se obtiene a partir del ajuste de una función semejante a la ecuación (4.93), dada por:



$$\zeta = C_1 \left( 1 - C_2 E^{C_3} \log \left( 1 + \frac{1}{C_2 E^{C_3}} \right) \right)$$

donde las C<sub>i</sub> son los parámetros que por ajustar.

## 4.5.10 Región de colección incompleta de carga.

Como se ha mencionado en la sección 4.3 la forma de los picos producidos en un espectro de rayos X por los detectores están compuestos de un pico gaussiano con una cola en el lado de baja energía, estas colas son debidas a procesos de mala colección de carga en el cristal del detector, a e fecto A uger-radiativo que se presenta en los átomos al ser ionizados y al efecto Compton que los fotones de 17 a 40 keV pueden sufrir en su camino al detector. Además, estas colas se superponen sobre un fondo continuo de radiación producido en el blanco, el cual es principalmente debido al bremsstrahlung de los electrones secundarios producidos en el blanco por la fuente excitadora.

Para poder explicar los efectos de mala colección de carga en el detector Goulding [Goulding] propone que esto es debido a la difusión térmica de los electrones en la superficie del detector, donde contribuyen a la corriente de fuga del detector y por tanto no son tomados en cuenta en la colección de carga debida a la radiación. Lo malo de este modelo es que no explica del todo estos efectos pues con el no es posible efectuar buenas simulaciones de las colas de los picos. Shima et al. [Shima] proponen un modelo en el cual el cristal del detector se divide en tres regiones con espesores bien definidos, como se indica en la figura 4.10. Uno es la capa muerta de tipo p, donde la eficiencia  $\eta$  en la colección de carga que se ha generado en ella por la radiación es cero, es decir  $\eta = 0$ . Luego viene una capa de espesor T de mala colección de carga en donde se tiene los pares electrón-hueco que sean generados en ella por la radiación no son totalmente colectados y por tanto la eficiencia de colección de carga en esta zona es  $\eta < 1$ . Finalmente se tiene la parte del cristal donde todos los portadores de carga generados por la radiación que interaccione c on ella son colectados por los electrodos del detector, es decir su eficiencia de colección de carga es  $\eta = 1$ . De esta manera se tiene que la carga creada en esta segunda capa produce un pulso de menor energía al de la del fotón original. Tomando un espectro al que se le ha sustraído todo el fondo de radiación se tiene que el espesor T está dado por:

$$T = \frac{1}{\mu(E)} \log \left( 1 + \frac{N_{PC}}{N_{TC}} \right)$$
(4.97)

donde  $N_{TC}$  es el número de eventos donde toda la carga creada en el detector es totalmente colectada y  $N_{PC}$  es el número de eventos donde la carga creada es parcialmente colectada en el cristal, se puede ver que  $N_{TC}$  está dada por la contribución del área total del pico gaussiano, el valor de  $N_{PC}$  está dado como  $N_{PC} = N - N_{TC}$ , donde N es el número total de cuentas en el espectro (recordando que es un espectro al que se le ha sustraído el fondo de radiación).



Figura 4.10 Representación de las zonas de nula colección de carga  $\eta = 0$ , mala colección de carga  $\eta < 1$  y buena colección de carga  $\eta = 1$ .



(4.96)

El problema que existe con el modelo anterior de Shima et al. es que experimentalmente se encuentra que el valor para T no es único y que depende de la energía E de los fotones. Por este motivo Geretschläger [Geretschläger] modifica el modelo anterior incorporándole la presencia de cúmulos de mala colección de carga en la región del cristal con  $\eta=1$ , estos cúmulos los explica como zonas pequeñas donde el cristal no es totalmente del tipo intrínseco, ya sea porque se encuentra una impureza dentro del cristal o porque los átomos donadores de litio no están compensando adecuadamente al material semiconductor, entonces cuando la radiación i nteracciona con uno de estos cúmulos, la carga generada no es totalmente colectada. Con este nuevo modelo lo que se supone, es que el espesor T dado por la ecuación (4.97) está integrado por dos contribuciones, una de espesor  $T_c$  constante y otra  $T_E$  que depende de la energía de los fotones que lleguen al detector. De acuerdo con estas ideas se deduce una expresión aproximada para el espesor equivalente T [Geretschläger] que está dado por la expresión:

$$T = T_{c} + T_{E} = T_{c} + \frac{b}{\mu(E)}$$
(4.98)

donde b es una constante que está relacionada con la densidad de cúmulos en el cristal del detector. Con ayuda del conocimiento de todo lo anterior es posible incorporar estos parámetros para desarrollar programas de cómputo que permitan una mejor deconvolución de los picos de rayos X.

## Referencias.

[Campbell90] J.L. Campbell, Nucl. Instr. and Meth. B 49 (1990) 115.

[Campbell96] J.L. Campbell, Nucl. Instr. and Meth. B 109/110 (1996) 71.

[Geretschläger] M. Geretschläger, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 28 (1987) 289.

[Goulding] F.S. Goulding, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research 142 (1977) 213.

[Maxwell89] J.A. Maxwell, J.L. Campbell and W.J. Teesdale, Nucl. Instr. and Meth. B 43 (1989) 218.

[Maxwell95] J.A. Maxwell, W.J. Teesdale and J.L. Campbell, Nucl. Instr. and Meth. B 95 (1995) 407.

[Lepy] M.C. Lepy, M.M. Be and J. Plagnard, Application of Accelerators in Research and Industry, Ed. J.L. Duggan and I.L. Morgan, AIP Press, N.Y., 1997.

[Aberg] T. Aberg and J. Utraainen, Physical Review Letters, 22 (1969) 1346.

[Azzam] R.M.A. Asma and N.M. Bashara, *Ellipsometry and polarized light*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1977.

[Bambynek] W. Bambynek, B. Craseman, R.W. Fink, H.U. Freud, H. Mark, C.D. Swift, R.E. Price and P. V. Rao, Review of Modern Physics, 44 (1972) 716.

[Bevington] P.R. Bevington, Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences, Mc.Graw-Hill, N.Y., 1969.

[Berger] M.J. Berger and J.H. Hubbell, Nacional Bureau of Standard, Report NBSIR 87-3597, 1987.

[Bird] J.R. Bird and J.S. Williams, Ion beams for material analysis, Academic Press, Sidney, 1989.

[Brand] W. Brandt and G. Lapicki, Phys. Rev. 23 (1981) 1717.

[Chen] M. H. Chen and B. Crasemann, Phys. Rev. 21 (1980) 346.

[Chu] W.K. Chu, J.M. Mayer, and M.A. Nicolet, Backscattering Spectrometry, Academic Press, N.Y. 1978.

[Cohen] D.D. Cohen, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research 178 (1980) 481.

[Gallagher] W.J. Gallagher and S.J. Cipolla, Nucl. Instr. and Meth. 122 (1974) 405.

[Hansen] J.S. Hansen, J.C. McGeorge, D. Nix, W.D. Schmidt-Ott, I: Unus, and R.W. Fink, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research 106 (1973) 365.

[Henke] B. L. Henke, E.M. Gullikson and J. C. Davies, X-ray interactions: Photoabsorption, scattering, transmission and reflection at E = 50 - 30,000 eV, Z = 1 - 92, At. Data Nucl. Data 54 (1993) 181.

[Huttel] E. Huttel., W. Arnold, H. Baumgart and G. Clausnitzer, Nucl. Instr. Meth. B 12 (1985) 193.

[Johansson82] G.I. Johansson, X-ray Spetrometry 11 (1982) 194.

[Johansson] S.A.E. Johansson and J.L. Campbell, *PIXE, a novel technique for elemental analysis*, John Wiley & Sons, Chichester 1988.

[Knoll] G. F. Knoll, Radiation detection and measurement, John Wiley & Sons, New York, 1979.

[Krause] M.O. Krause, J. Phys. Chem. Ref. Data, 8 (1979) 307.

[L'ecuyere] J.L. L'Ecuyere, J.A. Davies and N. Matsunami, Nucl. Instr. and Meth. 160 (1979) 337.

[Lennard] W.N. Lennard and D. Phillips, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research 166 (1979) 521.

[Leroux] J. Leroux and T.P. Thinh, Revised tables of X-Ray mass attenuation coefficient, Corporation Scientifique Claisse Inc., Quebec, 1977.

[Marageter] E. Marageter, W. Wegscheider and K. Müller, X-ray Spectrometry, 13 (1984) 78.

[Mckelvey] J. P. McKelvey, Física del Estado Sólido y de Semiconductores, Límusa, México, 1987.

[Montenegro] E.C. Montenegro, A. Oliver and F. Aldape, Nucl. Instr. and Meth. B 12 (1985) 453.

[Nastasi] M. Nastasi, J.W. Mayer, J.K. Hirvonen, Ion-solid interactions: fundamentals and applications, Cambridge, University Press, U.K. 1996.

[Orlic] 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.

[Ortec] Catálogo EG&G Ortec 1997/1998, Modular pulse-processing electronics and semiconductor radiation detectors, Oak-Ridge, Tennessee, 1997.

[Pajek89] M. Pajek et al., Nucl. Instr. and Meth. B 42 (1989) 346.

[Papp] T. Papp, J.L. Campbell and E. Papp-Szabó, Nucl. Instr. and Meth. B 189 (2002) 33. T. Papp, T. Lakatos, Z. Nejedly and J.L. Campbell, Nucl. Instr. and Meth. B 189 (2002) 66. [Paul86] H. Paul and J. Muhr, Physics Report, 135 (1986) 47.

[Paul89] H. Paul and J. S. Sacher, At. Data Nucl. Data 42 (1989) 105.

[Powell] C.J. Powell, en *Electron impact ionization*, editado por T.D. Märk y G.H. Dunn, Springer, Wien, 1985, pagina 198.

[Reed] S.J.B. Reed and N.G. Ware, J. Phys. E 5 (1972) 582.

[Schole] F. Scholze and G. Ulm, Nucl, Instr. and Meth. A 339 (1994) 49

[Shima] K. Shima, S. Nagai, T. Mikuno and Yasumi, Nucl. Instr. and Meth. 217 (1983) 515.

[Scofield] J.H. Scofield, Physical Review, A9 (1974) 1041.

[Smit] Z. Smit, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 36 (1989) 254.

[Smith] Smith, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research 94 (1971) 157.

[Storm] E. Storm and H.I. Israel, Photon cross-sections from 1 keV to 100 MeV for elements Z=1 to Z=100, Nucl. Data Tables 7 (1971) 565.

[Tesmer] J.R. Tesmer and M. Nastasi, Handbook of modern ion beam material analysis, Material Research Society, Pittsburg, 1995.

[Theisen] R. Theisen and D. Vollath, *Tables of X-ray mass attenuation coefficients*, Verla Stahleisen M.B.H. Dusseldorf, 1967.

[Vandecasteele] C. Vandecasteele and R.A. Chalmers, *Activation analysis with charged particles*, editado por Ellis Horwood Ltd, 1988.

[Veigele] W.J. Veigele, At. Data Nucl. Data 5 (1973) 51.

[Ziegler] F. Ziegler, J.P. Biersack and U. Littmark, *The stopping and ranges of ions in matter*, Pergamon Press, New York, 1985.

# **CAPÍTULO 5**

# CARACTERIZACIÓN EXPERIMENTAL Y RESULTADOS

## **5.1 Aspectos Generales**

En este capítulo se muestran los experimentos realizados para la caracterización experimental de los parámetros más importantes de tres detectores de estado sólido para rayos X que son utilizados en los aceleradores de partículas del Instituto de Física de la UNAM. La razón para realizar estos experimentos es que algunos parámetros no pueden medirse directamente. Los detectores caracterizados son: un detector de silicio con litio difundido marca Canberra modelo SSL30150 que se llamará simplemente Si(Li), uno de germanio hiperpuro marca Canberra modelo GL0055P para el registro de rayos X y gammas de baja energía que se llamará LEGe y finalmente uno de silicio marca AmpTek modelo XR-100CR al cual se llamará XR y que utiliza un proceso termoeléctrico para enfriar el transistor de efecto de campo.

Al detector más estudiado es el de Si(Li) pues es el que se planea utilizar para las aplicaciones de la técnica PIXE con nuevas condiciones geométricas que requieren de un mejor conocimiento del mismo detector.

Cada uno de los detectores trae consigo un preamplificador integrado, en el caso de los detectores Si(Li) y LEGe la señal producida por el preamplificador es enviada a un módulo NIM amplificador marca Canberra Modelo 2026, para el detector XR se utilizó un amplificador marca AmpTek modelo PX2CR y para el registro de la información se utilizaron tres tarjetas multicanales para computadora PC. Una marca Ortec modelo Maestro, una marca Oxford modelo PCA3 y una Canberra modelo Genie 2000.

Los rayos X y gammas de baja energía se obtuvieron de fuentes radiactivas calibradas puntuales (menores que 0.5 mm de diámetro) de <sup>133</sup>Ba, <sup>137</sup>Cs y <sup>241</sup>Am, las cuales están encapsuladas en acrílico de 1.0 mm de espesor. Estas fuentes fueron adquiridas a la empresa Amersham, de Inglaterra, la cual las proporcionó ya calibradas. Se utilizó una fuente radiactiva extendida de <sup>55</sup>Fe no calibrada y los rayos X característicos de varios elementos generados por medio de la emisión inducida por colisiones con partículas cargadas, PIXE, para lo cual se utilizó el Acelerador Peletrón del Instituto de Física de la UNAM. En la Figura 5.1 se muestra un esquema general de la cámara de vacío donde se efectuó la inducción de rayos X por medio de PIXE y el cual es típico para este tipo de experimentos [Johansson]. En la figura 5.2 se muestra un esquema ampliado de la vista superior de la cámara de vacío. El detector se alineó a 45° con respecto a la dirección de incidencia del haz de iones y los blancos forman un ángulo de 45° con respecto a la dirección de incidencia del

## 5.2 Linealidad del detector

La primer prueba realizada a los detectores fue ver su linealidad con la finalidad de comprobar que el cristal detector no presente daños graves en su estructura, esta es una prueba elemental y rutinaria que siempre se realiza para calibrar en energía los espectros de radiación obtenidos con los detectores. Esto se efectuó de acuerdo a lo indicado en la sección 4.5.1, a partir de varios espectros de rayos X y gammas obtenidos por medio de PIXE y fuentes radiactivas los cuales fueron adquiridos manteniendo un mismo valor de amplificación, siempre se observó que la respuesta fue lineal, con lo cual se garantizó que la respuesta era adecuada y no había presencia de daños serios en los cristales de los detectores. En las figuras 5.3 a 5.5 se muestran las gráficas de número de canal correspondiente al centroide de cada pico de rayos X contra su respectiva energía correspondientes a cada uno de los tres detectores, Si(Li), LEGe y XR, respectivamente, para la región de 0 - 10 keV. Se hace énfasis de la linealidad sólo en esta región de energías debido a que es la comúnmente empleada en la mayoría de los experimentos realizados con rayos X en los aceleradores de partículas del Instituto de Física de la UNAM. En estas gráficas puede apreciarse la linealidad de los detectores.



Figura 5.1 Representación esquemática del dispositivo experimental para PIXE y RBS.



Figura 5.2 Diagrama del interior de la cámara de rayos X.





Figura 5.4 Linealidad del detector LEGe.



Figura 5.5 Linealidad del detector XR.

# 5.3 Área activa del detector

Para determinar el área activa de los detectores se realizó un barrido con un haz colimado de rayos X como se indica en la sección 4.5.3.1. Para ellos se utilizaron los rayos X de 5.89 keV correspondientes a la línea K $\alpha$ del Mn, este haz se obtuvo a partir de una fuente radiactiva extendida de <sup>55</sup>Fe a la cual se le puso enfrente un colimador de aluminio con un orificio de 0.3 mm y de 0.8 mm. La fuente junto con el colimador se pusieron en una platina con movimiento micrométrico en un plano, es decir, que cuenta con movimiento de precisión en las dos direcciones X-Y. Esta platina tiene calidad de instrumentación óptica y no presenta problemas mecánicos en su sistema de movimiento, se montó en un soporte enfrente de cada uno de los detectores de rayos X de tal manera que el orificio del colimador fue de 2 mm.

Con este montaje se efectuó el movimiento de la fuente y el colimador paralelos a la ventana de berilio de los detectores. Para determinar plenamente el árca activa de los detectores, primero se hicieron barridos en X y en Y a pasos de 0.5 mm para encontrar el centro del detector, una vez encontrado el centro se hizo un barrido en la dirección X y otro en la dirección Y para determinar el diámetro efectivo del área activa. En las figuras 5.6 y 5.7 se muestran estos barridos en el eje X para los detectores Si(Li) y LEGe, respectivamente. En las figuras 5.8 y 5.9 se muestran los barridos en X y Y para el detector XR. Todos estos barridos fueron referidos al centro del detector y como se ve en las figuras, tienen forma de meseta. Debido a la actividad de la fuente y al tamaño del orificio del colimador los tiempos de conteo para cada punto del barrido fueron de 20 minutos. Por este motivo no resultó práctico realizar los barridos de la superficie completa de los detectores.

Los barridos en X y en Y coinciden en ambos casos para los tres detectores, para los detectores Si(Li) y LEGe se puede afirmar que tienen un área activa circular, mientras que para el detector XR el fabricante indica que el cristal tiene forma rectangular por lo que en este caso no resulta correcto hablar del "diámetro" activo, aunque aún así se utilizará este término con las reservas indicadas. El tamaño del diámetro activo se determinó en cada caso a partir del ancho de la meseta a la mitad de su altura máxima. No se encontraron

puntos con mala detección por parte del detector, por lo que se puede garantizar que no existen daños en el cristal y que el área activa es uniforme en la superficie,



Figura 5.6 Barrido en X para el detector Si(Li).



Figura 5.7 Barrido en X para el detector LEGe.



Figura 5.8 Barrido en X del detector XR.



Figura 5.9 Barrido en Y del detector XR.
El tamaño del diámetro activo del detector de Si(Li) medido de esta manera fue de  $6.2 \pm 0.3$  mm, mientras que el valor reportado por el fabricante es de 6.2 mm. Para el detector LEGe el diámetro medido fue de 7.7  $\pm$  0.3 mm, y el valor indicado por el fabricante es de 8.0 mm. En el caso del detector XR se obtuvo para el barrido en X un valor de 2.2  $\pm$  0.3 mm y para Y el valor de 2.1  $\pm$  0.3 mm. En tanto el fabricante de este último detector reporta un tamaño rectangular del cristal de 2.8 mm en X por 2.4 mm en Y.

En los casos de los detectores Si(Li) y LEGe si consideramos la incertidumbre de nuestras medidas podemos señalar que los valores o btenidos son semejantes a los indicados por el fabricante. D e h echo las medidas fueron más acordes con los datos del fabricante que en el caso de otras medidas efectuadas con anterioridad en otros detectores [Campbell 86, Campbell 90, Rodríguez] en donde se reportan diferencias en el área activa de 9 % a 22 %. En el caso del detector XR tomando los valores medidos para los vértices del cristal rectangular encontramos una diferencia del 30 % con el valor del área activa que indica el fabricante.

## 5.4 Distancia del cristal a la ventana de berilio.

En este caso sólo se efectuó esta medida para el detector de Si(Li) porque fue el único con el que se tuvo el tiempo necesario para realizar todo el experimento. Los otros dos detectores fueron requeridos constantemente en otros experimentos y no fue posible trabajar con ellos el tiempo necesario.

Para determinar esta distancia se utilizó el procedimiento indicado en la sección 4.5.3.2. Para encontrar el centro del detector en el montaje experimental, se hizo un barrido tal como se indica en la sección 5.3 utilizando la fuente de <sup>55</sup>Fe con el colimador de aluminio montados en la platina con movimiento micrométrico, en este caso la platina se montó en un soporte que a su vez se encontraba sobre un banco óptico el cual se podía mover sobre un riel, este riel se encontraba totalmente paralelo al crióstato del detector de tal manera que era posible acercar o alejar a la fuente radiactiva en dirección perpendicular a la ventana de berilio.

Una vez localizado el centro del detector se posicionó al colimador de aluminio de tal manera que su orificio coincidiera con el centro del detector, se colocó una fuente radiactiva puntual de <sup>241</sup>Am encapsulada en acrílico de tal manera que el material radiactivo coincidiera con la posición del orificio del colimador. Una vez colocada la fuente puntual fue posible acercarla y alejarla con ayuda del banco óptico justo en el eje axial del detector, posteriormente se tomaron espectros de la fuente de <sup>241</sup>Am a diferentes distancias del detector. En estos espectros se registró el número de rayos X de la línea La del Neptunio (13.94 keV) y las gammas de 26 keV y 59 keV normalizados con el tiempo de captura del espectro.

Debido a la intensidad de la fuente utilizada y a que a medida que la fuente era alejada del detector la razón de conteo disminuía considerablemente, se tenía entonces que los tiempos de captura llegaron a ser hasta de doce horas, y durante todo el tiempo que duraron las mediciones fue necesario mantener el dispositivo sin que se registrara ningún movimiento de alguna de sus partes fundamentales.

Como la medición de estos espectros se realizó en aire fue necesario considerar el efecto de la atenuación de los rayos X en el aire, para esto se determinó el coeficiente de atenuación de cada una de las energías de los fotones u tilizados suponiendo una composición del aire de 78% N, 21% O y 1% Ar. Los coeficientes de atenuación  $\mu$  fueron determinados utilizando el programa ATTENV4 [Orlic] que calcula coeficientes de atenuación de rayos X., los valores obtenidos para los coeficientes de atenuación de las energías 13.94 keV, 26 keV y 59 keV fueron respectivamente: 1.91 cm<sup>2</sup>/g, 0.43 cm<sup>2</sup>/g y 0.18 cm<sup>2</sup>/g, para transformar estos coeficientes a unidades de cm<sup>-1</sup> se dividen entre la densidad del aire de la Ciudad de México, para ello se consideró la densidad del aire seco a 22 °C al nivel del mar de 1.23 kg/m<sup>3</sup> y se calculó la densidad al nivel de la Ciudad de México utilizando la fórmula barométrica para la densidad del aire utilizado fue de 1.084 kg/cm<sup>3</sup>.

En la figura 5.10 se muestra la gráfica de la distancia de la fuente contra la raíz cuadrada del inverso de las intensidades de las gammas de 26 keV y 59 keV así como los rayos X de la línea L $\alpha$  del Np multiplicadas por su respectivo factor de atenuación  $f_{aten}$  tal como se sugiere en la sección 4.5.3.2, a c ada u no de los tres conjuntos de puntos se les ajustó una línea recta y al comparar el resultado del ajuste de estas tres líneas rectas con la ecuación (4.55) se encontró que la distancia del detector a la ventana de berilio es igual a la ordenada al origen que en promedio es de 7.2 ± 1.2mm, en tanto que el valor proporcionado por el fabricante fue de Smm, esta discrepancia puede deberse al error sistemático que se puede cometer al calcular los coeficiente de atenuación en el aire a la altura de la Ciudad de México.



Figura 5.10 Cálculo de la distancia a la ventana de Be para el detector de Si(Li).

## 5.5 Resolución.

La resolución en energía de la respuesta del detector en función de la energía de la radiación se efectuó de acuerdo con lo indicado en la sección 4.5.2. Para conseguir esto se determinaron los FWHM de los picos obtenidos con cada detector para las líneas características de rayos X K $\alpha$  que fueron inducidos por PIXE en los elementos con número atómico  $13 \le Z \le 32$ . Así también se utilizaron a los diversos rayos X y gammas emitidos por las fuentes radiactivas. Todas estas medidas se efectuaron manteniendo para cada detector un mismo valor de amplificación en el amplificador de pulsos para todos los picos utilizados.

En las figuras 5.11 a 5.13 se muestran las gráficas de el cuadrado del FWHM contra la energía de los fotones para cada uno de los tres detectores de rayos X utilizados. De estas gráficas se observa que los datos siguen una distribución lineal. Ajustando una linea recta a cada conjunto de datos y comparando con la ecuación (4.47) se tiene que la ordenada al origen corresponde al cuadrado del ruido electrónico del sistema de detección y la pendiente al o rigen se asocia con la generación estadística de portadores de carga cuando interacciona la radiación con el detecctor. De la ecuación (4.47) se puede determinar el factor de fano para cada



Figura 5.11 Resolución del detector de Si(Li).



Figura 5.12 Resolución del detector de Germanio.





Figura 5.13 Resolución del detector XR.

uno de estos detectores. Se tiene que el ruido electrónico para los tres sistemas de detección fluctuó entre los 120 eV y 180 eV, aunque se debe tener en cuenta que éste puede variar dependiendo del valor de amplificación que se utilice en el amplificador, pues éste aumenta las señales de ruido que le lleguen. El factor de fano resulto ser igual a  $0.12 \pm 0.007$  para el detector de Si(Li), de  $0.12 \pm 0.007$  para el detector XR.

#### 5.6 Espesor de la capa muerta.

En este caso se utilizó el método descrito en la sección 4.5.6. para medir la capa muerta del detector de Si(Li). Para excitar a la capa muerta de silicio se utilizaron los rayos X K $\alpha$  del azufre que tienen una energía justamente arriba de la de ionización de la capa de K del silicio y por lo cual excitan mucho a esta capa. Aquí el inconveniente es que la cola del pico de la K $\alpha$  de S hace complicado poder determinar un pico pequeño a una energía justamente menor que esta. Estos rayos X K del azufre fueron producidos por medio de PIXE bombardeando una pastilla de azufre con protones de 3 MeV.

En el espectro de rayos X obtenido no se logró definir ningún pico de rayos X correspondiente a la línea K del silicio. Pero en este caso lo que si se hizo fue una estimación del tamaño máximo que puede tener la capa muerta para que pueda generar un pico visible en el espectro de rayos X, para esto existe una convención [Ishii] de acuerdo con la cual un pico de rayos X es posible resolverlo en un espectro de radiación cuando el número de cuentas del pico  $N_P$  es 3 veces mayor que la raiz cuadrada del número de cuentas  $N_F$  del fondo de radiación en la correspondiente región del FWHM de la energía del fotón. Esto es, un pico se puede resolver en un espectro si el número de cuentas del pico  $N_P > 3 N_F^{1/2}$ , entonces del espectro obtenido se cuenta el número de cuentas  $N_F$  que hay en el fondo de radiación en la región del FWHM correspondiente al pico de la línea K del silicio. A este valor de  $N_F$  se le saca la raiz cuadrada y se multiplica por 3 y así se obtiene el pico más pequeño de rayos X K del silicio que en un principio podría resolverse en el espectro. El espesor máximo posible de la capa muerta se obtuvo a partir de la ecuación (4.74) en donde el valor de  $N_P$  se sustituye en la



variable  $Y_{x}$ , en tanto que para la variable  $C_d$  se utiliza el número de cuentas que hay en el pico K $\alpha$  del azufre. Para el valor de la fluorescencia de la capa K del silicio se utiliza el valor de  $\omega_K = 0.048$  [Krause] y para el coeficiente de absorción fotoeléctrica de rayos X K $\alpha$  del azufre en silicio se utiliza  $\mu_{S'}^{K} = 2.02 \ 10^3 \ \text{cm}^2/\text{g}$  [Berger], Los valores para las eficiencias fueron los obtenidos por el ajuste indicado más adelante en la sección 5.12.

De esta manera encontramos que el espesor máximo de la capa muerta que se puede observar en el espectro corresponde a 0.08 µm. Esto es, el espesor de la capa muerta del detector Si es menor a 0.08 µm.

## 5.7 Espesor de la capa de oro.

El espesor de la capa de oro del detector de Si(Li) se trató de medir de acuerdo con el procedimiento de la sección 4.5.7. En este caso se utilizó para excitar a los átomos de oro a los rayos X de las líneas  $K\alpha_1$ ,  $K\beta_1$  y  $K\beta_2$  del Br. Estos rayos X fueron producidos por medio del bombardeo de una pastilla de NaBr con protones de 3 MeV.

Al igual que en el caso de la capa muerta no fue posible determinar ningún pico de la línea L $\alpha$  del oro. Por este motivo utilizando el mismo criterio se hizo una estimación de la capa de oro de espesor más grande que puede tener el contacto de oro. Utilizando el mismo criterio indicado en la sección anterior, es decir suponer que  $N_P > 3 N_F^{1/2}$ , y procediendo en forma análoga tenemos entonces que usando la ecuación (4.83) podemos determinar el espesor máximo que puede tener el contacto de oro.

Los valores utilizados para los parámetros de la ecuación (4.83) fueron  $\omega_{L3} = 0.32$  [Krause],  $f_{L\alpha} = 0.798$  [Salem],  $I(K\alpha_1)/I(K\alpha) = 0.659$  [Scofield] y  $I(K\beta)/I(K\alpha) = 0.166$  [Khan]. Los valores para las eficiencias fueron los obtenidos por el ajuste indicado más adelante en la sección 5.12. De esta manera se encontró que el espesor máximo de la capa muerta que se puede observar en el espectro corresponde a 0.02 µm, es decir, el espesor de la capa de oro del detector Si(Li) es menor que 0.02 µm.

El hecho de no observar en el espectro una señal de los rayos X característicos del oro del contacto frontal de oro es debido a que los procesos de crecimiento de películas delgadas ya se encuentran muy avanzados y pueden producirse películas con mucha calidad y con un espesor pequeño. Este resultado anterior se contrapone al de los detectores fabricados más de diez años atrás donde era por lo regular muy fácil excitar a la capa de oro y que sus rayos X aparecieran reflejados en el espectro [Shima, Rodríguez].

## 5.8 Picos de escape

Para ver la dependencia de los picos de escape con la energía de los fotones en los detectores de silicio se utilizaron rayos X característicos de las líneas K $\alpha$  de los elementos con número atómico entre  $16 \le Z \le 32$ . Estos rayos X se produjeron induciéndolos en blancos que contenían a los elementos señalados al bombardearlos con protones de 2.5 M eV. A partir de los espectros de rayos X obtenidos se determinó el número de cuentas del pico K $\alpha$  y de su correspondiente pico de escape localizado a una energía menor en 1.74 keV. En los casos del azufre y cloro se tomó toda la línea K porque no fue posible separar a los picos K $\alpha$ y K $\beta$  pues se encuentran muy juntos.

Para sacar el numero de cuentas del pico Ka o pico padre y del pico de escape se utilizó el programa de cómputo AXIL [VanEspen], con este programa lo que se hace es ajustar una función para el fondo de radiación del espectro y luego sustraerla y ajustar funciones gaussianas a los picos del espectro, a esto se le conoce como la deconvolución de los picos que aparecen en el espectro.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

Conociendo el pico padre y el de escape fue posible determinar el valor del cociente  $\kappa$  para cada línea de rayos X. En las figuras 5.14 y 5.15 se muestran graficados los cocientes  $\kappa$  con respecto a la energía de los fotones para los detectores Si(Li) y XR respectivamente. En las gráficas se muestra con una línea continua la función teórica para los picos de escape de acuerdo con el modelo de Reed [Reed] dado por las ecuaciones (4.93) y (4.95).

Como se puede apreciar para el caso del detector Si(Li) los resultados coinciden plenamente con el modelo teórico. Esto también lo que nos indica es que los rayos X llegan al detector de Si(Li) en dirección normal a su área activa.



Figura 5.14 Razón  $\kappa$  del pico de escape y el pico padre para el detector de Si(Li).

TESIS CON FALLA DE ORIGEN



Figura 5.15 Razón  $\kappa$  del pico de escape y el pico padre para el detector XR.

## 5.9 Eficiencia utilizando fuentes radiactivas.

En este caso se midieron las eficiencias de los detectores de Si(Li) y LEGe colocados en la cámara de análisis por PIXE del Acelerador Peletrón del IFUNAM, utilizando el procedimiento indicado en la sección 4.4.1 Se utilizaron las fuentes radiactivas puntuales calibradas de <sup>133</sup>Ba (11.9  $\mu$ Ci), <sup>137</sup>Cs (11.4  $\mu$ Ci) y <sup>241</sup>Am (11.1  $\mu$ Ci). La fecha de calibración de las fuentes es el 1 de Julio de 1991. Estas fuentes fueron colocadas de tal manera que el material radiactivo coincidiera justamente con el punto donde el haz de iones incide sobre las muestras que se ponen en la cámara de análisis por PIXE.

Las líneas de rayos X consideradas con la fuente de <sup>113</sup>Ba, fueron la K $\alpha_1$ , K $\alpha_2$ , K $\beta_1$ , K $\beta_2$  del cesio y las gammas de 53 keV, 79 keV y 81 keV. Para la de <sup>137</sup>Cs las líneas consideradas fueron las K $\alpha_1$ , K $\alpha_2$ , K $\beta_1$  y K $\beta_2$  del bario. Finalmente con la de <sup>241</sup>Am las líneas L*l*, L $\alpha$ , L $\beta$ , L $\gamma$  del neptunio y las gammas de 26 keV, 33 keV, 43 keV y 59 keV.

El s istema d e d etección s e dejó contando d urante 24 h oras c on c ada u na de e stas fuentes radiactivas. L a cámara siempre se mantuvo en vacío a una presión del orden de  $10^{-6}$  Torr o menor. Las áreas de los picos correspondientes a cada una de estas líneas obtenidas en los espectros fueron extraídas utilizando el programa AXIL, la eficiencia fue determinada utilizando la ecuación (4.6). En las figuras 5.16 y 5.17 se muestran con cuadrados las eficiencias medidas para los detectores Si(Li) y LEGe respectivamente.





Figura 5.16 Curva de eficiencia del detector de Si(Li).

## 5.10 Eficiencia utilizando PIXE y RBS.

Con el método descrito en la sección 4.4.2.2 se determinó la eficiencia de los detectores de Si(Li) y LEGe en la cámara de análisis por PIXE del Acelerador Peletrón del IFUNAM. Para medir la eficiencia del detector para fotones de baja energía utilizando PIXE y RBS se utilizaron los rayos X K $\alpha$  de elementos con número atómico entre 12 < Z <33. Los blancos empleados para producir estos rayos X consistían en películas delgadas depositadas sobre mylar y que fueron obtenidas de la empresa Micromatter que se especializa en la fabricación de patrones para microanálisis, los blancos Micromatter utilizados fueron de Mg, Al Si, GaP, CuSx, NaCl, KCl, CaF2, ScF3, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn y Ge, estas películas se bombardearon con protones de 2.5 M eV que incidían a 45° con respecto a la normal del blanco y los espectros de rayos X

Para registrar a las partículas retrodispersadas se utilizó un detector de partículas del tipo PIPS marca Canberra, con la finalidad de poder determinar con exactitud el ángulo sólido de este detector se le colocó enfrente un colimador de aluminio con un orificio de 2 mm de diámetro. El ángulo sólido del detector de partículas  $\Omega_R$  se midió tomando la distancia del punto donde pega el haz en los blancos al colimador del detector. El espesor *t* de las películas se determinó por medio de RBS [Chu] utilizando los mismos protones retrodispersados, así se pudo determinar el espesor de las películas y así poder efectuar las correcciones posteriores.





Figura 5.17 Curva de eficiencia del detectorLEGe.

La eficiencia se determinó a partir de la ecuación (4.12) multiplicada por su factor de corrección a partir de la ecuación (4.31). Los valor de la  $\sigma_K(E_a)$  se obtuvieron de las tablas de Paul y Sacher [Paul 89], la  $\sigma_R(E_a)$  utilizando la fórmula de Rutherford (ecuación 4.9) con la corrección de apantallamiento de L'Ecuyere (ecuación 4.10). Los valores de  $\omega_K$  se tomaron de las tablas de Krause [Krause], los valores de  $f\alpha$  se obtuvieron a partir de las razones K $\beta/K\alpha$  de Scofield [Scofield], el factor de corrección de los valores de  $\alpha$  se determinaron a partir de un ajuste a los valores de la  $\sigma_K(E)$  de las tablas de Paul y Sacher [Paul 89], los valores de  $\alpha$  se determinaron a partir de un ajuste a los valores de la  $\sigma_K(E)$  de las tablas de Paul y Sacher [Paul89], los valores de  $\beta$  y S( $E_0$ ) se obtuvieron a partir de las funciones semiempíricas de Ziegler et al. Para los poderes de frenado [Ziegler]y los valores de los coeficientes de atenuación se obtuvieron utilizando el programa ATTENV4 [Orlic].

Se encontró que estos factores de corrección para la eficiencia mediante PIXE y RBS dados por la ecuación (4.31) son menores al 3% para todos los blancos utilizados. El las figuras 5.16 y 5.17 se muestran con puntos circulares las eficiencias medidas para los detectores Si(Li) y LEGe respectivamente.

|   | TESS |    | CON    |
|---|------|----|--------|
| F | ALLA | DE | ORIGEN |

5-15

## 5.11 Eficiencia utilizando el método de Montenegro.

Utilizando los mismos espectros obtenidos en la sección 5.10, se determinó la eficiencia utilizando el método de Montenegro indicado en la sección 4.4.4. Con los valores del número de cuentas de los picos K $\alpha$  y K $\beta$  obtenidos usando el programa AXIL, y el valor teórico de los cocientes K $\beta$ /K $\alpha$  dado por Scofield [Scofield], se determinaron los valores de  $\lambda$  dados por la ecuación (4.38) para cada par de líneas características K $\alpha$  y K $\beta$  de los elementos bombardeados con protones.

Los valores de las energías de las líneas K $\alpha$  y K $\beta$  para obtener su valor promedio fueron determinados a partir de las tablas de Bearden [Bearden], en la figuras 5.18 y 5.19 se muestran las gráficas de los valores del log $\lambda$ contra el log E para cada uno de los detectores, de acuerdo con la ecuación (4.43), se ajustó una línea recta a los puntos de esta última gráfica y se encontraron los valores de  $\alpha = 22.0 \pm 5.7$  y  $\beta = 3.3 \pm 0.7$  para el detector Si(Li) en tanto que para el LEGe se encontraron los valores  $\alpha = 2.4 \pm 1.2$  y  $\beta = 1.4 \pm 0.5$ .

Para la región de alta energía se tiene que el valor de  $\Omega$ ' se puede obtener de las eficiencias medidas usando las fuentes radiactivas mostradas en la sección 5.9. De las figuras 5.16 y 5.17 se determina que el valor de  $\Omega' = \Omega/4\pi$  es de 4.3×10<sup>-4</sup> para el detector Si(Li) y de 5.6×10<sup>-4</sup> para el LEGe.



Figura 5.18 Gráfica de  $\lambda$  contra la energía promedio de los rayos X K para el detector de Si(Li).





Figura 5.19 Gráfica de  $\lambda$  contra la energía promedio de los rayos X K para el detector LEGe.

Luego a partir de las áreas de los picos correspondientes a la gammas consideradas en al sección 5.9 se calculan los valores de la variable y como se indica en la ecuación (4.45), considerando solamente a las gammas con energías mayores que 30 keV pues con ellas se tiene que el factor  $\exp(-\alpha E^{\beta})$  es prácticamente igual a la unidad. En la figura 5.20 y 5.21 se muestran las gráficas del factor log ((1-y)<sup>-1</sup>) contra la energía de las gammas de las fuentes radiactivas para los detectores Si(Li) y LEGe, respectivamente.

De acuerdo con la ecuación (4.46) se ajusta una línea recta a los puntos de estas dos últimas gráficas y se encuentran los valores de  $\gamma = 8.7 \times 10^5 \pm 0.5 \times 10^5 \text{ y}$   $\delta = 3.8 \pm 0.2$  para el detector Si(Li) en tanto que para el LEGe se encontraron los valores  $\gamma = 1700 \pm 1300 \text{ y}$   $\delta = 0.67 \pm 0.41$ . Los valores de estos últimos dos parámetros para el detector LEGe, tienen incertidumbres de casi el 80% por lo que no son confiables, el motivo es que tienen una variación de casi un orden de magnitud para la misma energía.

Una vez determinados estos parámetros se sustituyen en la ecuación (4.32) y así se obtienen las funciones analíticas para la eficiencia utilizando este método de Montenegro. En las figuras 5.16 y 5.17 se muestran graficadas con una línea punteada estas funciones para los detectores Si(Li) y LEGe respectivamente. Como se puede ver de las figuras, los ajustes no son buenos para la parte de baja energía en tanto que sí lo son para la parte de baja energía. El motivo por el cual no es bueno el ajuste para la parte de baja energía radica en que hay electrones de efectos de Auger radiativo que hacen inexacta la extracción del número de cuentas de la línea K $\beta$ .





Figura 5.20 Gráfica de log ((1-y)<sup>1</sup>) contra la energia promedio de los rayos X K para el detector de Si(Li).



Figura 5.21 Gráfica de log ((1-y)<sup>-1</sup>) contra la energía promedio de los rayos X K para el detector LEGe.

# 5.12 Ajustes a la eficiencia.

Con la finalidad de poder contar con una expresión analítica para la eficiencia de los detectores que sea útil para determinar la eficiencia de cualquier fotón que llegue al detector se ajustan a los valores medidos de la eficiencia por medio de fuentes radiactivas y PIXE-RBS la función indicada en la ecuación (4.32), este ajuste se efectúa por medio de mínimos cuadrados no lineales [Bevington], para esto se utiliza el programa de cómputo Origin. Como valores iniciales para efectuar los ajustes se toman los valores de  $\Omega'$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  y  $\delta$ obtenidos en la sección 5.11 por el método de Montenegro.

Para el detector S i(Li) se tienen los siguientes valores:  $\Omega' = 0.00043 \pm 0.00003$ ,  $\alpha = 14.4 \pm 6.3$ ,  $\beta = 2.5 \pm 0.5$ ,  $\gamma = 5.2 \times 10^5 \pm 5.6 \times 10^5$  y  $\delta = 3.7 \pm 0.9$ . Luego para el detector LEGe se tiene los valores  $\Omega' = 0.00058 \pm 0.00003$ ,  $\alpha = 24.2 \pm 8.3$ ,  $\beta = 2.7 \pm 0.3$ ,  $\gamma = 5.6 \times 10^6 \pm 7.0 \times 10^6$  y  $\delta = 3.5 \pm 1.6$ .

De los valores anteriores se observa que las incertidumbres de las constantes  $\gamma y \delta$  tienen incertidumbres del orden del 100%, esto se origina por el procedimiento iterativo del método de aproximación ya que se encuentran variando a estos dos parámetros que tienen un amplio margen de variación y pueden combinarse y seguir dando buenos ajustes. Para el caso del detector de Si(Li) gracias a que la parte de la eficiencia de alta energía tiene una caída notoria es posible utilizar el método de Montenegro con mucha mayor exactitud y precisión que el ajuste por mínimos cuadrados. Aun así los dos procedimientos dan un muy buen ajuste para la eficiencia en las gráficas de la eficiencia para la parte de alta energía, así a la función dada por la ecuación (4.32) del detector de Si(Li) se le dan los valores del método de Montenegro para los parámetros  $\gamma = 8.7 \times 10^5$  $\pm 0.6 \times 10^5$  y  $\delta = 3.8 \pm 0.2$ .

En el caso del detector L EGe los valores de  $\gamma$  obtenidos por Montenegro y el ajuste de esta función por mínimos cuadrados no lineales difieren de manera considerable. Esto se debe a que para la parte de la eficiencia de alta energía como no hay una caída o variación como en el caso del Si(Li) es dificil ajustar la parte de alta energía de la ecuación (4.32), además, el método de Montenegro presenta una incertidumbre muy grande a diferencia de lo que ocurre con el de Si(Li). Por otro lado los valores de los parámetros  $\gamma y \delta$  dados por el método de mínimos cuadrados no lineales se aproxima más a los valores reales del espesor activo del detector y los valores de los coeficientes de atenuación. Por lo tanto para el ajuste de la función (4.32) correspondiente al detector LEGe se le dan los valores obtenidos por el método de mínimos cuadrados no lineales.

En las figuras 5.16 y 5.17 se muestran las funciones continuas dadas por la ecuación (4.32) por medio de las líneas continuas, de estas dos figuras se observa que el método de Montenegro para la región de baja energía no es el más adecuado, pero si dio al menos los valores iniciales para efectuar los ajustes por medio de mínimos cuadrados no lineales.

## 5.13 Colas de los picos

A los elementos con número atómico 13 < Z < 33 se les bombardeó con protones de 2.5 MeV para obtener los ayos X característicos K $\alpha$ , con el programa de cómputo AXIL se ajustaron funciones al fondo de radiación de los espectros. Posteriormente se extraer el fondo de los espectros y quedan solamente los picos de las líneas K $\alpha$  y K $\beta$  con sus respectivas colas del lado de baja energía, al pico de la K $\alpha$  se le ajustó una función gaussiana. El área bajo la curva de la gaussiana ajustada fue considerada como el valor  $N_{TC}$  (que aparece en la ecuación (4.97) ) del número de eventos que generan carga en el detector y son totalmente recolectados por los electrodos. Luego tomando en el espectro de rayos X al número de cuentas N correspondientes al pico K $\alpha$  junto con su cola de baja energía y el número de eventos cuya carga generada en el detector es parcialmente colectada por los electrodos esta dado como:  $N_{PC} = N - N_{TC}$ . De esta manera conociendo los valores de  $N_{TC}$  y  $N_{PC}$ , y los respectivos coeficientes de atenuación  $\mu_{SI}$  de los rayos X en silicio, se puede calcular con la ecuación (4.97) el valor de T para la región del detector cuya eficiencia de colección de carga no es buena.

# ESTA TESIS NO SALE DE LA BIBLIOTEC

En la figura 5.22 se muestra la gráfica de los espesores T contra el inverso de los coeficientes de atenuación  $\mu_{SI}$  para cada una de las líneas de rayos X consideradas. A los puntos de esta gráfica se les ajusta una línea recta de tal manera que comparando con la ecuación (4.98) se tiene que el espesor constante para la región de mala colección de carga del detector es  $T = 6.5 \pm 2.4 \ \mu_S/cm^2$ , el valor de la pendiente se asocia con la constante  $b = 0.0011 \pm 0.0004$ , dividiendo el valor de T entre el de la densidad del silicio  $\rho = 2.33 \ g/cm^3 = 2.33 \times 10^6 \ \mu_S/cm^3$  se tiene que  $T = (2.8 \pm 1) \times 10^6 \ cm = 0.03 \ \mu m \pm 0.01 \ \mu m$ . Por otro lado se tiene que la constante b da un valor que está asociado con el tamaño de los cúmulos presentes en el cristal donde se da la recombinación de los pares electrón-hueco generados en el cristal.



Figura 5.22 Espesor de la zona de mala colección de carga calculado con la formula 4.97 en función del inverso del coeficiente de atenuación en Si para cada energía de rayos X.

## **5.14 Conclusiones**

En este trabajo se ha presentado una revisión de los diversos métodos existentes para la caracterización de las propiedades de los detectores de estado sólido para rayos X. Así pues, la aportación más importante de este trabajo de tesis ha sido la presentación de un compendio de procedimientos para poder determinar las propiedades particulares de cada detector. Es conveniente dejar en claro que este compendio no puede considerarse totalmente completo, pues para algunas propiedades puede pensarse en otros métodos y medios para poder ser caracterizadas. Aquí han sido presentados todos aquellos procedimientos que fue posible realizar completamente en los laboratorios del Instituto de Física de la UNAM.

En este último capítulo se han aplicado varios de los métodos descritos en el capítulo 4 para la caracterización de rayos X. Con ellos ha sido posible conocer más a fondo los detectores que actualmente se están utilizando en el Acelerador Peletrón del IFUNAM. Estos métodos mostraron su eficacia para determinar algunas propiedades del los detectores, sin embargo se observa también que algunos de estos métodos tienen limitaciones, como los utilizados para la medición de la capa muerta y el contacto de oro. También se pueden ver los problemas que presenta el método de Montenegro para la determinación de la eficiencia en la región de baja energía por lo que la aplicación de este método está supeditada a una buena extracción del área de los picos K $\beta$  de los espectros de rayos X la cual se complica por el Efecto Auger Radiativo. Es de esperarse que si se llega a contar con un buen procedimiento para efectuar la estimación de este efecto, entonces el método de Montenegro puede presentarse como una buena alternativa para la parte de alta energía resultó ser muy adecuado en el caso del detector de Si(Li) porque ahí la eficiencia tiene una caída notoria que permite una buena aplicación del método, caso contrario al del detector LEGe debido a que ahí no había una variación notoria en la eficiencia.

En cuanto a la observación de la respuesta lineal de un detector de rayos X con respecto a la energía de la radiación resulta claro que esto es algo totalmente elemental y normal para estos detectores. Pero aquí se hace notar que esta propiedad es un indicador inicial sobre el estado o condición del cristal del detector. En los tres detectores estudiados pudo observarse que sus respectivos cristales se encontraban en buen estado, especialmente para la región de energías de l keV a 10 keV.

Se encontraron diferencias en el tamaño de las áreas frontales activas de los detectores con respecto al tamaño de los cristales proporcionados por el fabricante. La mayor de estas diferencias se dio en el detector XR cuyo cristal de silicio tiene una forma rectangular. Aunque se presentan estas diferencias con los tamaños de la superficie frontal de los cristales esto no debe de ser en muchos casos motivo de preocupación. Por el contrario, lo que es más destacable e importante para el uso de los detectores es que se observa que las áreas activas son uniformes y sin defectos en donde hubiese zonas de menor detección. Esto último es lo que hace posible que estos detectores puedan ser aplicados en experimentos donde se efectúa el registro de rayos X con solamente una parte del detector sin alterar su efectividad para la detección, es decir se mantiene la misma eficiencia sin contar el término debido al ángulo sólido.

Para el caso del detector de Si(Li) tenemos que el valor medido para la distancia de la superficie frontal del cristal de silicio a la ventana de berilio del cristato difirió en 2.2 mm con respecto al valor proporcionado por el fabricante. Como se indicó antes, la principal fuente de error para esta medición fue la estimación del atenuamiento de la radiación en aire a la altura de la Ciudad de México. Por lo general la detección de rayos X inducidos con iones, electrones o fluorescencia se efectúa colocando el detector a distancias de 5 cm o mayores [Monroy]. Para aplicaciones típicas de espectroscopía de rayos X el valor de esta distancia no es crítico porque el término referido al ángulo sólido que subtiende el detector ya va incluido en la eficiencia de detección la cual se mide experimentalmente con una buena precisión de un 4% a 8%. Pero por otro lado para aplicaciones en donde hay que considerar por separado del valor del ángulo sólido, como es el caso de la detección con una parte del área frontal del detector, se tendrá que esta distancia en la distancia a la ventana de berilio resulta a l valor del ángulo sólido del detector Si(Li) la cual deberá de ser i gual o menor al 7% (dependiendo de la distancia a la cual se encuentre la fuente del detector).

El espesor de la capa muerta y el del contacto frontal de oro no fue posible determinarlos con exactitud para el detector Si(Li) porque la observación de los rayos X K del silicio y L del oro producidos por fluorescencia en estas capas se encontraban por debajo del fondo de radiación. Sin embargo con el método propuesto fue posible efectuar una estimación del tamaño máximo que pudiesen tener. Lo anterior fue posible gracias al conocimiento experimental de la resolución del detector con lo cual se pudo efectuar la estimación del tamaño del ancho de un pico de rayos X K del silicio y otro de la L $\alpha$  del oro.

El conocimiento de la resolución de cada detector de rayos X tiene la ventaja de poder brindar una estimación de la anchura que tendría en el espectro cada pico de rayos X correspondiente a una determinada energía. Esto resulta ser muy útil para a quellos casos en los que será n ecesario a plicar e sta resolución para poder distinguir entre dos o más picos que se encuentren muy cercanos o que se traslapen en un espectro de rayos X. Esto es fundamental para realizar una buena deconvolución del espectro y así poder obtener valores exactos de las intensidades correspondientes a cada uno de los rayos X que se estén registrando.

Finalmente, con todo lo mencionado, la conclusión más destacada a la que se llega es que se puede señalar a la mayoría de los procedimientos indicados en el capítulo 4 como adecuados para efectuar la caracterización de detectores de estado sólido para rayos X.

# Referencias

[Bearden] J.A. Bearden and A.F. Burr, Rev. Mod. Phys. 39 (1967) 125.

[Bevington] P.R. Bevington, Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences, Mc.Graw-Hill, N.Y., 1969.

[Berger] M.J. Berger and J.H. Hubbell, Nacional Bureau of Standard, Report NBSIR 87-3597, 1987.

[Campbell 86] J.L. Campbell and P.L. McGhee, Nucl. Instr. and Meth. A 248 (1986) 393.

[Campbell 90] J.L. Campbell, Nucl. Instr. and Meth. B 49 (1990) 115.

[Chu] W.K. Chu, J.M. Mayer, and M.A. Nicolet, Backscattering Spectrometry, Academic Press, N.Y. 1978.

[Ishii] K. Ishii and S. Morita, I. J. PIXE, 1 (1990) 1.

[Johansson] S.A.E. Johansson and J.L. Campbell, *PIXE, a novel technique for elemental analysis*, John Wiley & Sons, Chichester 1988.

[Khan] Md. R. Khan and H. Raemdonck, X-ray Spectrometry 9 (1980) 32.

[Krause] M.O. Krause, J. Phys. Chem. Ref. Data 8 (1979) 307.

[Monroy] B. M. Monroy-Pelácz, "Caracterización y aplicación de un dispositivo de haz externo para análisis mediante PIXE," Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias, UNAM, 2002.

[Orlic] I. Orlic, K.K. Loh, C.H. Sow, S.M. Tang and P. Thong, Nucl. Instr. and Meth. B 74 (1993) 352.

[Paul89] H. Paul and J. S. Sacher, At. Data Nucl. Data 42 (1989) 105.

[Reed] S.J.B. Reed and N.G. Ware, J. Phys. E 5 (1972) 582.

[Rodriguez] L. Rodriguez-Fernandez, J. Miranda and A. Oliver, J. X-Ray Sci. Tech. 4 (1994) 221.

[Salem] S.I. Salem, S.L. Panossian and R.A. Krause, At. Data Nucl. Data 14 (1974) 91.

[Scofield] J. H. Scofield, Phys. Rev. 9 (1974) 1041.

[Shima] K. Shima, K. Umetani and T. Mikuno, J. Appl. Phys. 51 (1980) 846.

[VanEspen] P. Van Espen, H. Nullens and W. Maenhaut, Microbeam Analysis 1979, editado por Newbury San Francisco Press, San Francisco, 1979,

[Ziegler] F. Ziegler, J.P. Biersack and U. Littmark, The stopping and ranges of ions in matter, Pergamon Press, New York, 1985.