



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**VARIACIÓN EN LAS TASAS DE EMISIÓN DE
RAYOS X – L DE Gd POR IMPACTO DE
PROTONES EN FUNCIÓN DE LA ENERGÍA DE
BOMBARDEO**

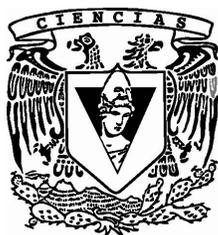
T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A:

CARLOS EDUARDO CANTO ESCAMILLA



**DIRECTOR DE TESIS:
Dr. OSCAR GENARO DE LUCIO MORALES
2010**



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**VARIACIÓN EN LAS TASAS DE EMISIÓN DE
RAYOS X – L DE Gd POR IMPACTO DE
PROTONES EN FUNCIÓN DE LA ENERGÍA DE
BOMBARDEO**

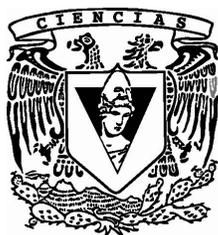
T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A:

CARLOS EDUARDO CANTO ESCAMILLA



**DIRECTOR DE TESIS:
Dr. OSCAR GENARO DE LUCIO MORALES
2010**

Hoja de Datos del Jurado

1. Datos del alumno

Canto
Escamilla
Carlos Eduardo
56844228
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
301118084

2. Datos del Tutor

Dr.
Oscar Genaro
de Lucio
Morales

3. Datos del Sinodal 1

Dr.
Eduardo
Andrade
Ibarra

4. Datos del Sinodal 2

M. en C.
Patricia Raquel
Avilés
Mandujano

5. Datos del Sinodal 3

Dr.
Marcelo
Lugo
Licona

6. Datos del Sinodal 4

Fís.
Ghiraldo Macave
Murillo
Olayo

7. Datos del trabajo escrito

Variación en las tasas de emisión de Rayos X – L de Gd por impacto de protones en función de la energía de bombardeo

80 p

2010

Agradecimientos

Deseo agradecer a mis sinodales:

Dr. Eduardo Andrade Ibarra

Dr. Oscar Genaro de Lucio Morales

M. en C. Patricia Raquel Avilés Mandujano

Fis. Ghiraldo Macave Murillo Olayo

Dr. Marcelo Francisco Lugo Licona

por su apoyo y revisión del presente trabajo, así como por sus observaciones que ayudaron a enriquecerlo.

Agradezco también a la Dra. Corina Solís Rosales por su asesoría técnica en los programas de computadora necesarios para el análisis de los datos obtenidos.

Al Dr. Javier Miranda Martín del Campo por sus consejos sobre el tema de la tesis y su apoyo para resolver los problemas que se presentaron.

Al Fis. Juan Carlos Pineda Santamaría por su colaboración en el manejo del Acelerador Van de Graaff de 0.7 MV y la extracción de los datos obtenidos.

Al Sr. Melitón Galindo González por su ayuda en la preparación de las muestras utilizadas en los experimentos.

Al M. en C. Eustacio Pérez Zavala por su colaboración técnica en varios aspectos de esta tesis.

Al Dr. Luis Rodríguez Fernández por permitir el uso del acelerador y por sus consejos en la conclusión de este trabajo.

Al Sistema Nacional de Investigadores por apoyarme económicamente para poder realizar de buena manera la tesis.

Dedico este trabajo a todas las personas que han sido importantes en mi vida (que son muchas) y espero que, al mencionarlas, no omita a alguna, pero en caso de hacerlo les pido disculpas y aclaro que no es por falta de cariño si no por error y les digo que siempre están en mi mente y mi corazón.

Se los dedico a mis padres José de Jesús Canto Carbajal y Raquel Escamilla Andrew por su cariño y por siempre cuidar de mí, a mi hermana María del Carmen Paulina Canto Escamilla por su amistad y amor fundamentales en mi vida.

A mi tío Juan Escamilla Andrew por ser un segundo padre para mí y apoyarme en tantas locuras, a mi tía María de los Ángeles y a mi abuela María del Carmen Carbajal Reynoso por todo su amor durante tantos años, y a mi otra abuelita Sara Andrew Andrew quien nos cuida a todos desde arriba y a quien trato siempre de hacer sentirse orgullosa.

A Paulina Pradel Soto, Esteban Santillán López y Pablo Ernesto Mota Santiago por ser más que mis amigos durante tanto tiempo por haberme apoyado siempre y estado ahí cuando lo necesito. Deseo que siempre sigamos siendo amigos.

A Víctor, Julio y Tania Gil por haber sido un apoyo tan grande en mi vida y por quererme tanto como para convertirse en mis hermanos mayores.

Al Doctor Eduardo Andrade por su cariño, aprecio y ayuda, en todo aspecto, durante estos últimos años. A la Licenciada Claude Thions Chaudy por toda su ayuda y afecto desde que entre en la carrera. A la Licenciada Socorro Becerril por sus consejos y apoyo los últimos dos años.

A mi alumno y amigo Ricardo y a mi pequeño amiguito Juan Carlos por ayudarme a conocer un nuevo aspecto de la vida y por permitirme tener dos hermanitos pequeños. A mi amiga Andrea de Chile por demostrarme que la amistad no conoce fronteras y a Aldo por ayudarme tantas veces durante la carrera cuando no tenía ni idea de qué trataban las clases. También deseo agradecer a Mireya por darme su apoyo y su opinión de las cosas sin importar lo duro que fuera y a Eimi, que en paz descanse, pues lo que me dijo me hace nunca perder el camino.

Se lo dedico a Zulma, Pilar, Sam, Itzel, Andrómeda, Mónica, Judith, Patricia, Manuel y Teicu, pues jamás han dejado de ser mis amigos dentro de mi corazón y no podría entender la vida si todos ustedes.

A Isabel, Elia y Maricela por darme el regalo mágico y por demás indescriptible de tres hermanitas que llenan mi vida de alegría y felicidad, no sé qué haría sin ustedes.

A Harle, Phoibon, Alfaldor, Diana y todos los demás mininos por su amor incondicional. A Ana Sofía Colette pues, aunque tal vez solo existe ahora en mi imaginación, siempre te he querido. Pero, sobre todo...

Te dedico este trabajo en especial a ti, Tania.

Tal vez no sean las suficientes palabras para expresarte todo lo que necesito contarte, pero al menos dicen una gran parte de lo que siempre ha habido en mi corazón. Ha pasado mucho tiempo desde que nos conocimos y es cierto que las cosas no han salido muy bien, por ello te ofrezco todas mis disculpas; pero existe algo que no ha cambiado, y es que te quiero muchísimo.

Es por eso que, al dedicarte este trabajo que es todo tuyo, deseo agradecerte por TODO lo que has hecho por mí, lo mucho que significas en mi vida, por tantas veces que me has ayudado (tal vez sin saberlo) a continuar in rendirme, a aprender tantísimas cosas, a encontrar el lado bello de la vida, a quererme a mí mismo y a jamás perder la fe.

Gracias por siempre ser tú misma y tener ese modo tan genial de ser; me encantaría poder conocerte mucho más, descubrir cada aspecto que moldea tu ser, y también me encantaría que pudieras conocerme más pues así sabrías lo mucho que me importas y que por ello lo primordial para mí siempre será tu amistad y, sobre todo, tu felicidad por lo que haré hasta lo imposible para que la alcances sin importar en dónde se encuentre o lo que ello implique. Siempre que me necesites estaré contigo para ayudarte.

Te quiero con todo mi corazón.

Índice

	Página
A. Agradecimientos	I
B. Dedicatoria	II
C. Pensamientos	III
Introducción	1
Capítulo 1: <i>Interacción de la Radiación Ionizante con la Materia</i>	
1.1. Interacción de las Partículas Cargadas con la Materia -----	5
1.2. Interacción de la Radiación Electromagnética con la Materia -----	7
Capítulo 2: <i>Análisis Mediante la Técnica de Emisión de Rayos X Característicos Inducidos por Impacto de Partículas</i>	
2.1. Descripción de las Características Fundamentales de los Detectores <i>Si(Li)</i> ----	12
2.2. Descripción de la Técnica PIXE -----	21
2.3. Tasas de Emisión de Rayos X Inducidos por Partículas -----	31
Capítulo 3: <i>Procedimiento Experimental</i>	
3.1. Descripción del Dispositivo Experimental -----	35
3.2. Descripción Experimental -----	37
Capítulo 4: <i>Análisis de Resultados</i>	
4.1. Descripción del Análisis Matemático de los Resultados -----	43
4.2. Cálculo de la Eficiencia del Detector -----	48
4.3. Determinación de las Áreas de los Picos Identificados -----	51
Conclusiones -----	77
Referencias -----	79

Introducción

El presente trabajo tiene como objetivo determinar la forma en la que varían las tasas de emisión de rayos X inducidos por partículas en las transiciones electrónicas hacia la capa L del Gadolinio, como función de la energía de los protones que inciden sobre los átomos, en el intervalo de energías de 300 keV a 750 keV.

Los rayos X inducidos por partículas son característicos de cada material y se generan cuando colisiona una partícula con cierta energía con un átomo, dicha colisión libera a un electrón de alguna de las capas electrónicas del blanco generándose así una vacante: la vacante se llena mediante el descenso de un electrón presente en una capa superior, lo cual libera a un fotón cuya energía es igual a la diferencia de energía entre los niveles de la vacante y del electrón de la capa superior.

Los fotones producidos forman un espectro continuo en el cual se pueden observar picos pertenecientes a cada fotón emitido, y cuya área dependerá de la intensidad de la línea espectral en cuestión. Los rayos X se clasifican según la capa en la que se generó la vacante, por ejemplo en nuestro caso de interés, cuando las vacantes aparecen en la segunda capa electrónica son denominados rayos X L .

A estas líneas espectrales se les denota también con un subíndice que muestra la capa de la que provino el electrón que llenó a la vacante, según la capa se denota con letras griegas es decir, continuando con el ejemplo, si el electrón vino de la capa M el fotón producido será un rayo X L_{α} y si viene de la capa N se le llamará L_{β} ; ya que es posible que varias líneas provengan de una misma capa, se les coloca un número junto al subíndice según la intensidad de cada una y la subcapa de la que provenga el electrón, obteniéndose de esta forma líneas del tipo $L_{\alpha 1}$.

Existen tres subcapas dentro de la capa L (L_1 , L_2 y L_3) y cada una de las líneas espectrales puede clasificarse como perteneciente a alguna subcapa, por lo que sumando las intensidades de todos los picos se obtiene la intensidad de la subcapa. Después, se suman estos tres valores para obtener la intensidad de la capa L .

Lo anterior es para dar una noción de la intensidad de las líneas espectrales y la intensidad de la capa total; esto es importante debido a que consideramos la intensidad relativa de cada línea como el cociente de su intensidad entre la intensidad de la capa total.

Considerando las energías de 6 líneas espectrales, las cuales son L_I , $L_{\alpha 1}$, $L_{\beta 1}$, $L_{\beta 2}$, $L_{\gamma 1}$ y $L_{\gamma 3}$, cuyas gráficas y resultados se presentan en la sección 4.3 en la que se trata de observar si las intensidades relativas de cada línea son o no dependientes de la energía de impacto de la partícula entrante. Se describirá en el primer capítulo el modo en el que interactúa la

radiación con la materia y a la dependencia de las secciones de producción de rayos X con respecto a la energía.

Ya que hemos ofrecido una somera explicación del origen del fenómeno que estudiamos y las clasificaciones de los datos que de él se desprenden, es necesario explicar las actividades realizadas y la técnica empleada para la obtención de los resultados experimentales que nos condujeron a concluir la forma de variación de las tasas de emisión con respecto a la energía de bombardeo.

La técnica que utilizamos en nuestra labor experimental es la llamada *Análisis por Emisión de Rayos X Inducidos por Partículas* (o Análisis PIXE por sus siglas en inglés), la cual consiste en bombardear un blanco hecho del material que se desea analizar usando partículas (en nuestro caso protones) aceleradas hasta una energía cinética conocida. El impacto de los protones causa la emisión de fotones característicos, como se mencionó párrafos arriba, los cuales se registran en espectros para su análisis.

Se aplicó esta técnica en el Acelerador Van de Graaff de 700 kV del IFUNAM, en colocando una película delgada de GdF_3 delgada sobre un sustrato de Carbono pirolítico dentro de una cámara de análisis en donde se encontraban dos tipos de detectores, uno de Si – Li para registrar a los fotones producidos, y otro para realizar un estudio de *Retro – Dispersión de Rutherford* (o RBS por sus siglas en inglés) el cual es necesario para poder determinar algunas características de la película de Fluoruro de Gadolinio (GdF_3) entre ellas su grosor y así tener en cuenta el tipo de consideraciones teóricas con las que se debe trabajar.

En el experimento una fuente de protones se coloca en el acelerador de partículas que se encuentra al vacío, los protones se aceleran a energías determinadas previamente y se les dirige a la cámara de análisis en donde colisionan con el blanco produciendo fotones y rebotando los protones. Ambos tipos de partículas se registran en los detectores que se encuentran con una geometría de detección ya establecida respecto a la muestra y al haz incidente.

Finalmente, la información proveniente de los detectores se amplifica y procesa mediante un conjunto de sistemas electrónicos, los cuales envían la información a un ordenador que, con el software apropiado, registra los espectros producidos para ambos tipos de experimentos (PIXE y RBS) y los almacena para su análisis ulterior.

Una vez que se han registrado la carga total que llega al detector (la cual, junto con el ángulo sólido subtendido por el mismo, permiten obtener el número de protones incidentes) y la energía de bombardeo, se cambió a esta última para realizar un nuevo par de experimentos, los cuales se dejaban cada vez más tiempo con el fin de mantener una misma cantidad de fotones registrados provenientes de la línea L_I en todos los resultados.

También se hicieron análisis semejantes con un conjunto de distintos tipos de muestra de grosores conocidos, para poder determinar la eficiencia del detector de Silicio – Litio.

El procedimiento que se siguió para analizar los espectros obtenidos, consistió en el empleo de varios programas de computadora, los cuales nos permitieron determinar el grosor de la película de GdF_3 , así como las intensidades de cada pico que pudiese resolverse con claridad para todas las energías; estos valores, junto con los de las áreas de cada subcapa y de la capa L total, permitieron desarrollar un conjunto de gráficas que mostraran la variación de la intensidades relativas de las líneas espectrales con respecto a la energía de los protones incidentes y de ahí deducir la forma en la que varían las tasas de emisión correspondientes. Además, con un análisis similar de las líneas K para las otras muestras, se obtuvo una gráfica que muestra la curva de eficiencia del detector en un intervalo de bajas energías.

Los resultados de obtenidos pueden ayudar en el estudio de la ionización del Gadolinio, pues el conocer la variación de las tasas de emisión con respecto a la energía de partículas que incidan sobre el elemento es útil para entender los procesos por los cuales el átomo puede perder electrones en la capa L . Esto puede tener aplicaciones importantes, sobre todo en medicina, en donde los estudios por mapeo de imágenes por resonancia magnética requieren de compuestos trazas inyectados en el organismo; la mayoría de dichos compuestos son moléculas que incluyen Gadolinio como uno de sus componentes, como en el Gd_2Zn_3 o en Gd_2Cu_3 .

El mapeo de imágenes por resonancia magnética se ha vuelto una herramienta muy potente en la medicina, para encontrar cáncer en tejidos principalmente, pero para que funcione adecuadamente es necesario que dichos compuestos, por estar dentro del torrente sanguíneo, no sean dañinos al cuerpo; comúnmente las moléculas como Gd_2Zn_3 no presentan efectos contraproducentes dentro del paciente, pero después de transcurrir cierto tiempo la molécula se rompe y el Gd, junto con el Zinc, se ioniza.

Debido a que este elemento es venenoso para el ser humano, aún en concentraciones pequeñas, una mejor comprensión de los fenómenos que llevan al Gadolinio a ionizarse y salir de la molécula, puede ayudar a evitar dicho fenómeno, investigación en la cual nuestro trabajo puede servir de ayuda. [1]

Comenzamos este texto con una descripción de los principales modelos teóricos que son aplicables a nuestra labor y que llevan a la descripción del fenómeno conocido como *Poder de Frenado*, en dónde se describirá a la pérdida de energía de los protones impactantes con respecto a su penetración dentro del material.

Después realizamos una descripción sobre la interacción entre radiación y materia, en donde se menciona la que la materia produce un coeficiente de atenuación el cual reduce la intensidad de la radiación que entra a ella por diversos métodos.

Continuamos con una descripción a fondo de los principios requeridos sobre la técnica de Análisis PIXE y las características fundamentales de los detectores de Silicio – Litio que empleamos en nuestra labor experimental, además explicamos los conceptos de intensidad relativa de las líneas de emisión de rayos X y el fondo presente en cada espectro así como las causas que lo generan.

Finalmente presentamos las características de los dispositivos empleados, el montaje que se realizó para desarrollar nuestro experimento, así como el procedimiento que se llevó a cabo en el bombardeo de la muestras de GdF_3 , junto con los resultados derivados de dicho trabajo y las conclusiones que de ellos emanan.

Capítulo 1: *Interacción de la Radiación Ionizante con la Materia*

1.1 Interacción de Partículas Cargadas con la Materia

Cuando la radiación atraviesa a la materia surgen tres casos principales en los cuales podemos tener interés por la naturaleza de nuestro experimento; dichos casos se refieren a tres tipos de radiación: partículas muy masivas cargadas, electrones y radiación electromagnética.

La característica principal del fenómeno con partículas cargadas masivas radica en el hecho de que sólo estas atraviesan la misma cantidad de material para una energía dada sin importar el número de partículas incidentes; a esta cantidad de distancia necesaria para frenar a las partículas se le llama *alcance*.

En el caso de los electrones, estos radian energía más fácilmente debido a que el coeficiente carga – masa es muy alto y por ende están sujetos a violentas aceleraciones debidas a la acción de fuerzas eléctricas. Además, están sujetos a dispersión dentro del material lo cual vuelve a sus trayectorias irregulares; el tema del *Brehmstrahlung* (*radiación de frenado*) será visto más adelante, e influirá en nuestro espectro formando una distribución continua en la sección de bajas energías y formará parte del fondo del espectro, tema que será discutido en el capítulo 2.

Se define como *poder de frenado de la sustancia absorbidora* al promedio de la energía perdida por una partícula incidente en un material por unidad de longitud de camino, sus unidades son de energía entre distancia. El frenado de las partículas ocurre cuando estas poseen altas energías cinéticas y penetran en materiales donde ionizan a las moléculas o a los átomos constitutivos del mismo que se encuentran a su paso; a consecuencia de ello las partículas pierden energía en muchos pasos pequeños.

Las fluctuaciones en la pérdida de energía producen también cambios en el alcance para una sustancia dada. Si se grafica el número de partículas en el rayo incidente contra la profundidad del material se puede observar que la curva resultante se mantiene como una función constante hasta que se llega a un cierto valor de la profundidad, después de él se llega a otro punto en el cual sólo la mitad de las partículas han alcanzado a pasar llamado el *alcance promedio* R_0 . Se le denomina *Alcance extrapolado* R_1 al punto para el cual ya no hay partículas incidentes que sigan penetrando. A la distancia entre estos dos puntos se le llama *parámetro straggling*.

Ya que mencionamos anteriormente al coeficiente de absorción, podemos definir tres tipos de estos coeficientes: el coeficiente de absorción, el coeficiente de absorción de masa y el

coeficiente de absorción atómico μ_a . La relación entre el coeficiente de absorción μ y el coeficiente de absorción de masa μ' se encuentra dada por la ecuación descrita en [2]:

$$\mu' = \frac{\mu}{\rho} \quad (1.1.1)$$

En donde ρ es la densidad del medio. Cuando el grosor se mide en número de átomos por centímetro cuadrado se define al coeficiente de absorción atómico mediante el número de átomos por centímetro cúbico N [2]:

$$\mu_a = \frac{\mu}{N} \quad (1.1.2)$$

Una vez que hemos definido las variables que se involucran en el poder de frenado nos conviene aclarar el proceso por el cual la partícula incidente va perdiendo energía en el medio absorbedor. La forma más común para la pérdida de energía se encuentra dada por la interacción Coulombiana con los electrones de los átomos. Si se da el caso de que la energía necesaria para excitar a los electrones, o bien para ionizar al átomo, es suficientemente baja en comparación con la energía del haz incidente, se puede considerar que la interacción partícula electrón es elástica. También existen interacciones con los núcleos atómicos, sin embargo las consideramos despreciables por su tamaño al compararlos con los electrones.

Cuando se extraen electrones de los átomos del medio absorbedor se constituye la *ionización primaria* en la cual los electrones pueden tener energías de valores hasta $4m/M$ veces la energía del haz incidente; estos electrones a su vez inducen una segunda ionización llamada *ionización secundaria* la cual es relativamente difícil de predecir teóricamente. En el momento en el que la partícula incidente ya no puede ionizar más se dice que ha alcanzado su alcance en ese medio.

Si se da el caso de que una de las partículas cargadas colisione con el núcleo esto puede llevar aceleraciones casi instantáneas, lo cual dará paso a la emisión de radiación en lo que se denomina *radiación de frenado*. Otra forma de perder energía es la llamada *radiación de Cerenkov*, que se produce al polarizarse longitudinalmente un medio transparente, cuando una partícula cargada lo atraviesa con una velocidad superior a la velocidad de fase en ese medio.

Denominando a T como la energía cinética de la partícula incidente, el poder de frenado absoluto queda descrito por lo referido en [2]:

$$-\frac{dT}{dx} = \text{poderdefrenado} = \left(-\frac{dT}{dx}\right)_{\text{colisión}} + \left(-\frac{dT}{dx}\right)_{\text{radiación}} \quad (1.1.3)$$

La posibilidad de determinar el poder de frenado total presente en nuestro material nos ayuda a definir cuánta energía pierden los protones al atravesar el material y así realizar las correcciones requeridas dentro de los programas de análisis como *WINQXAS* y *GUPIX*, de los cuales hablaremos más adelante. Este valor, acompañado con el grosor del material, nos permitirá definir si la película se trata de una *película delgada*, lo que nos deja hacer un conjunto de aproximaciones que se explicarán en capítulos posteriores, y observar que el cambio de energía de los protones es muy pequeño para el intervalo de energías manejado. [2], [3]

1.2 Interacción de la Radiación Electromagnética con la Materia

El paso de la radiación electromagnética a través de la materia es un fenómeno cotidiano en el cual convergen varios efectos que mencionaremos en el curso de este capítulo, algunos de ellos son la dispersión elástica y el efecto Compton. La ley que describe a la absorción de los fotones en la materia, cuando la sección de colisión se mantiene constante, se encuentra expresada por [2]:

$$n_x = n_0 e^{-N\sigma x} = n_0 e^{-\mu x} \quad (1.2.1)$$

En donde $\mu = N\sigma = 1/\lambda$ es el llamado *coeficiente de atenuación lineal* el cual es una característica específica para cada par material – haz incidente; λ es el llamado *recorrido libre medio* de una partícula que atraviesa un cierto grosor del material, σ es la sección eficaz del material, N es la densidad de centros de absorción de difusión y n_0 es el número de partículas por segundo que conforman al haz.

Al estudiar a la radiación electromagnética debemos considerar al haz incidente como un flujo de fotones individuales, los cuales pueden ser absorbidos por los núcleos del material blanco, o bien difundirse de manera semejante a los electrones de bajas energías que colisionan con la materia.

Para bajas energías la radiación electromagnética no posee un alcance definido, en comparación con los proyectiles pesados descritos en el capítulo anterior; para los fotones se tiene solamente al factor μ . Existen varios procesos que causan la atenuación de dichos fotones, como la *absorción* y la *dispersión*; en el caso de la absorción se suscita una conversión de la energía ya sea parcial, total o directa, en la que los fotones depositan su energía en otras partículas la cual se manifiestan como energía cinética de las mismas; por otro lado, la difusión consiste en la desviación de un fotón de la trayectoria seguida por todo el haz. [3]

Al pasar la radiación electromagnética por la materia el fenómeno de absorción es del tipo exponencial (como se mencionó en el capítulo anterior), tal que queda descrito por la ecuación obtenida de [2]:

$$-\frac{dI}{I} = \mu dx \quad (1.2.2)$$

En donde I es la intensidad de la radiación primaria y dx es el grosor del material atravesado

Ya que un cuanto dispersado no puede ser absorbido después por el material (debido a que ya no tiene la energía suficiente para ello) debe de escribirse un coeficiente de atenuación para cada fenómeno y describir al coeficiente de atenuación total, como se indica en [2]:

$$\mu = \mu_a + \mu_s \quad (1.2.3)$$

Con μ_a el *coeficiente de atenuación por absorción* y μ_s el *coeficiente de atenuación por dispersión*. Estos coeficientes dependen, como mencionamos párrafos arriba, de los números atómicos de los constituyentes del material y de la energía de los fotones incidentes; la manera en que estos coeficientes son función de las variables antes dichas depende de los siguientes procesos de interacción:

1. Dispersión Elástica
2. Efecto Fotoeléctrico
3. Dispersión de Compton
4. Producción de pares (para altas energías)

En los casos de los efectos fotoeléctrico y de producción de pares se da una pérdida de la energía cinética del fotón, mientras que en el efecto Compton esta se mantiene pero existe un cambio en la longitud de onda del fotón que sufre esta interacción por lo que la radiación dispersada por él es incoherente con la dispersada por el haz original.

Existen también otros efectos que causan absorción y dispersión pero que aportan en menor medida al valor del coeficiente total de atenuación, ejemplos de ellos son la dispersión nuclear inelástica, el efecto fotonuclear y la fotoproducción de mesones. Por otro lado, el proceso elástico que aporta más al valor del coeficiente es la dispersión elástica de Raleygh, y sólo en casos especiales como el efecto Mössbauer es que la atenuación nuclear supera a la causada por los electrones; en el presente texto sólo se considerarán las interacciones electrónicas.

Sean σ_R la sección eficaz para la dispersión de Raleygh, σ_F para la absorción de fotones, σ_C para el efecto Compton y σ_p para la producción de pares; entonces podemos expresar al coeficiente de atenuación lineal para un haz homogéneo como, según se expresa en [3]:

$$\mu = N(\sigma_R + \sigma_F + \sigma_P) + ZN\sigma_C \quad (1.2.4)$$

En donde sólo Z multiplica a la sección eficaz para el efecto Compton porque este se da solamente con los electrones atómicos individualmente, al contrario de los otros efectos que interactúan con todo el átomo. La expresión para el efecto Compton es válida cuando el momento transferido a cada electrón en la dispersión no coherente supera el valor $\sqrt{2Bm_e}$, con B la energía de enlace de los electrones; de lo contrario el valor que aparece en (1.2.4) para este efecto se ve reducido. El comportamiento de la sección transversal total respecto de la energía puede observarse en la siguiente figura, tomada de [4].

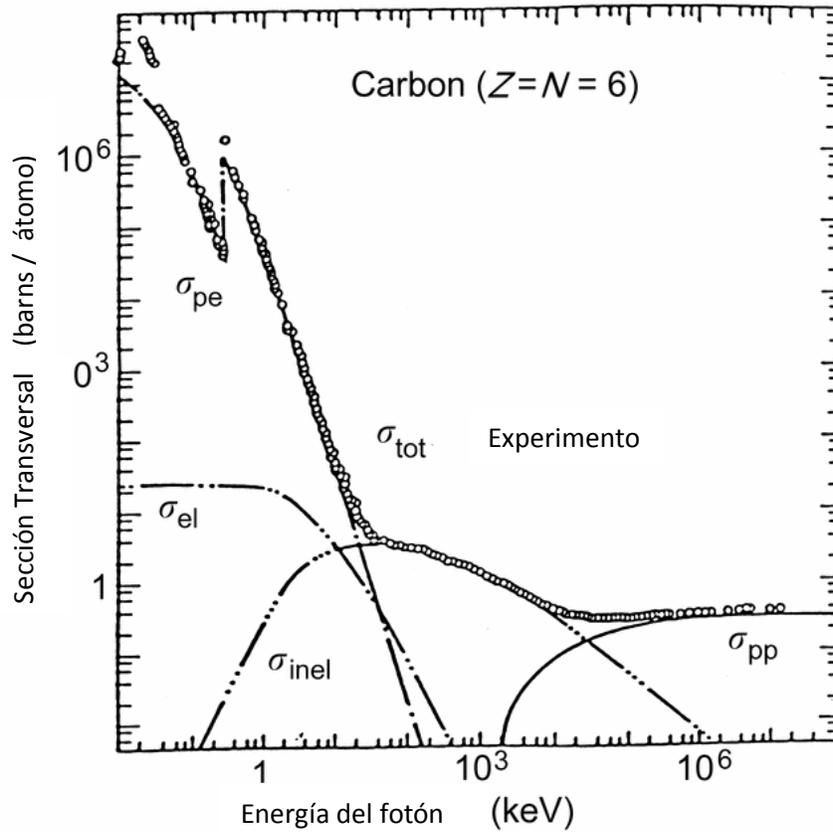


Figura 1.2.1. En la ilustración se muestra la variación de la sección total con respecto a la energía de los fotones.

Definimos al *coeficiente de atenuación másico* μ_m como el cociente entre el coeficiente lineal y la densidad del medio absorbente; esta variable es una función complicada de la energía ya que la sección eficaz para la producción de pares aumenta con la energía mientras que las de los efectos fotoeléctrico y Compton disminuyen con esta. Cada uno de los procesos que hemos mencionado es bastante complejo por sí mismo y se encuentra acompañado por efectos secundarios como la emisión de electrones Auger, además de la emisión de radiación fluorescente en el caso fotoeléctrico, la emisión de electrones de

reculado en el caso Compton, y la aniquilación de positrones en la producción de pares. [3] El comportamiento del coeficiente de atenuación lineal con respecto a la energía se muestra en la siguiente figura, la cual fue tomada de [5].

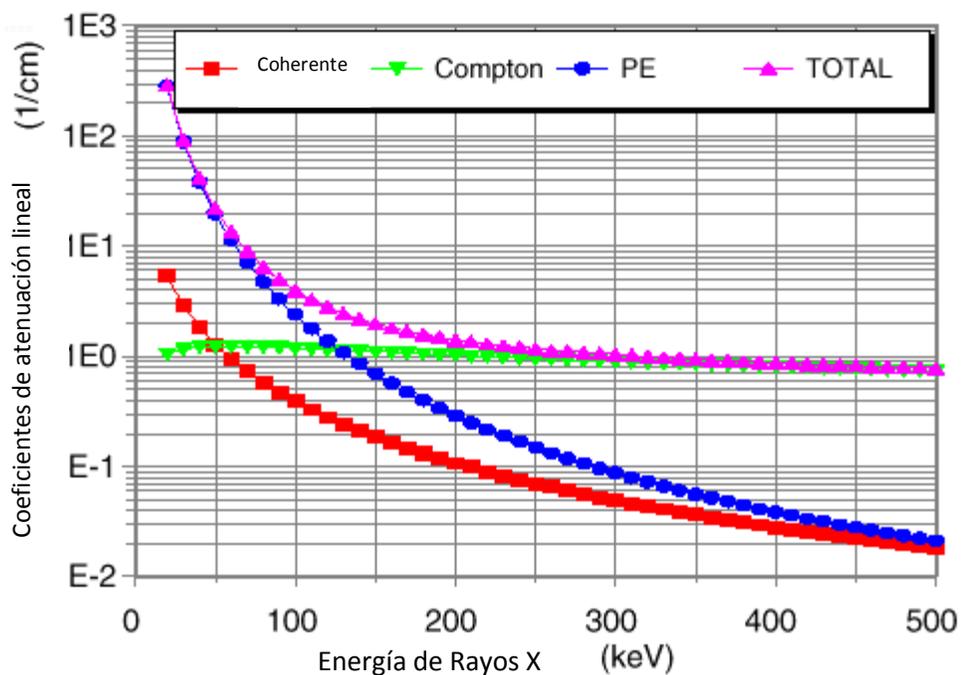


Figura 1.2.2. En la imagen se muestra el comportamiento del coeficiente lineal de atenuación contra la energía de los rayos X, para los procesos coherentes, Compton y Fotoeléctrico (PE)

Según el elemento del que se componga el material absorbente, los fenómenos mencionados tienen distintas importancias para energías diferentes, por ejemplo, para el Carbono con energías menores a 0.05 MeV el efecto fotoeléctrico es el dominante, mientras que el Compton tiene un bajo aporte al coeficiente de atenuación; para energías en un rango desde 0.05 MeV hasta 1 MeV los papeles se invierten y la contribución del efecto fotoeléctrico se ve reducida hasta volverse despreciable; para energías entre 1 MeV y 40 MeV aparece la producción de pares pero el efecto Compton sigue dominando, hasta que se supera este límite después del cual la producción de pares tiene una importancia superior.

A continuación describimos un poco acerca del efecto Auger, esto con el fin de incluir información acerca de todos los puntos señalados en el inicio del capítulo; la explicación es somera debido a la complejidad de este fenómeno y a que sólo requerimos del valor final de la sección de producción del mismo para poder definir el grado en el que afecta a nuestros resultados finales.

Como se dijo en la introducción, y será expandido en el capítulo posterior, la vacancia creada por la expulsión del electrón durante el proceso que determina a la técnica PIXE es llenada al bajar un electrón de una capa superior; este proceso puede estar acompañado por

la emisión de radiación fluorescente. Como una alternativa a esto es posible que no se emita este tipo de radiación sino que se expulse a un electrón de la capa exterior en lo que se conoce como emisión Auger; estos dos procesos compiten entre sí.

Al número de rayos X emitidos por las vacancias en una capa dada se le llama *producción fluorescente* β . Esto se puede analizar con mayor detalle al distinguir la producción fluorescente diferenciando las aportaciones de cada uno de los niveles, lo que conlleva a lo dicho en [3]:

$$\beta_K = \beta_{KL} + \beta_{KM} + \dots \quad (1.2.5)$$

Por ejemplo, si se excitó a la capa K, puede ocurrir que el electrón Auger provenga de la capa L al llenar la vacante K, la energía del electrón Auger L es explicada en [3] como:

$$T = h\nu_K - E_L = E_K - 2E_L \quad (1.2.6)$$

Siendo ν_K la frecuencia de la línea K. Esto causará en el espectro PIXE que aparezcan picos extras o bien que se aumente la intensidad de algunos presentes, dicho efecto se tendrá en cuenta en el momento de analizar los resultados.

Capítulo 2: *Análisis Mediante la Técnica de Emisión de Rayos X Característicos Inducidos por Impacto de Partículas*

Este capítulo del texto tiene como propósito estudiar la espectrometría por la *emisión de rayos X CARACTERÍSTICOS inducida por partículas* o *PIXE* por sus siglas en inglés. Dividiremos la discusión en tres secciones, la primera se dedicará a la descripción y caracterización de los detectores de Silicio – Litio (Si(Li)) utilizados durante la experiencia para detectar los fotones de rayos X generados al bombardear a nuestra muestra de GdF_3 con protones de bajas energías.

La segunda parte comprenderá un estudio acerca de la técnica PIXE así como de la teoría que acompaña a dicho tipo de espectrometría, enfocándonos en la definición de espectro, de líneas espectrales y su significado así como del fondo presente en el resultado original. También se mencionará un poco acerca de la *Aproximación de la Onda Plana de Born*, teoría en la que se basa nuestra deducción de las secciones de producción de rayos X K , empleadas durante la obtención de la curva de eficiencia del detector.

Finalmente, la última subsección tratará acerca de las tasas de emisión de rayos X inducidos por partículas y las intensidades relativas de los mismos, conceptos en los cuales se basan los resultados.

2.1 Descripción de las Características Fundamentales de los Detectores Si(Li)

En esta sección indicaremos los parámetros principales que conforman al detector de Silicio – Litio así como algunas maneras de determinarlos; también se incluye una discusión sobre la eficiencia de este tipo de detectores.

Debido a los procesos de fabricación, muchas de las características reportadas por el fabricante, incluyendo la eficiencia absoluta que se deriva de estas, difiere a la expresada por los fabricantes en las tablas anexas a los instrumentos de detección. Es por estas razones que resulta fundamental el describir y obtener valores precisos para las distintas características del detector; comúnmente se expresa la eficiencia absoluta del detector como [6]:

$$\varepsilon_0(E) = \frac{\Omega}{4\pi} [\exp(-\sum_j \mu_j x_j)] f_{esc} (1 - \exp(-\mu_{Si} D)) \quad (2.1.1)$$

En donde Ω es el ángulo sólido como función de la energía de bombardeo E , las x_j representan los grosores de la ventana de Berilio, una posible capa de hielo, del contacto de oro, la capa muerta de silicio x_0 y la capa de silicio para recolección incompleta de carga x_{Si} . Las μ son los coeficientes de absorción lineales (descritos en los capítulos pasados) para cada una de las capas mencionadas con anterioridad; la función por la que se multiplica la suma en (2.1.1) es un factor de corrección debido al escape de los rayos X K del silicio del volumen activo del detector; finalmente D es el grosor activo del detector.

La expresión anterior está definida para detectores en los que los grosores se encuentran bien determinados con excepción de la capa de Silicio x_{Si} , la cual depende de la energía de bombardeo. Ya que existen otros filtros entre la fuente de los rayos X y la primera de las ventanas se debe de estimar a la eficiencia total absoluta del sistema de detección $\varepsilon(E)$ como se expresa en [6]:

$$\varepsilon(E) = T(E)\varepsilon_0(E) \quad (2.1.2)$$

El factor que multiplica a la eficiencia absoluta está determinado por los grosores t_i de los filtros externos, por comparación con (2.1.1) se tiene que, por lo dado en [6]:

$$T(E) = \exp\left(-\sum_i \mu_i t_i\right) \quad (2.1.3)$$

Para continuar con la descripción del detector es necesario indicar la posición del mismo en el montaje experimental; el rayo de protones con el cual se bombardeó la muestra formaba un ángulo de 45 grados con respecto a la normal del material (GdF_3), mientras que el detector se colocó a 90 grados de la dirección de incidencia del haz.

Para determinar el ángulo sólido que observa el detector de Silicio – Litio es necesario obtener la distancia d_0 entre la ventana de Berilio y el cristal de Silicio, lo cual no puede hacerse directamente debido a que ambas partes se encuentran encerradas dentro del cuerpo del detector. Para poder obtener dicha medida se toma la tasa de conteo N_x proveniente de una fuente puntual de fotones a diferentes distancias del instrumento en su centro axial, y se observa que dicha tasa es inversamente proporcional al cuadrado de la distancia.

Es necesario entonces encontrar el centro axial del detector, para ello en [7] se menciona un proceso en el cual, una fuente radioactiva de ^{57}Co se coloca de manera que pueda moverse sobre todo un plano paralelo al del detector; una vez que se hace eso se mueve a la fuente hasta encontrar el punto en el que el número de cuentas a un tiempo fijo sea máximo. Así pues, la distancia entre la ventana de Berilio y el cristal de Silicio está dada en [7] por:

$$d_1 = k \sqrt{\frac{f_a}{N_x}} - d_0 \quad (2.1.4)$$

Siendo k una constante de proporcionalidad, d_l la distancia de la fuente de Cobalto a la ventana de Berilio, y f_a el factor de atenuación del aire que se incluye para atender el efecto de que las mediciones de la tasa de conteo se realizan en el vacío; dicho factor de atenuación puede obtenerse mediante los coeficientes de absorción de masa, así como la densidad del aire y su composición en el lugar del experimento, todos ellos medibles o reportados en tablas.

Otro valor que es necesario conocer para determinar el ángulo sólido deseado es el área activa de la cara frontal del detector; para determinarla en el trabajo referido en [5] el detector es escaneado por un rayo de fotones finamente colimado, de tal modo que el diámetro de la superficie pueda medirse al observar las variaciones en las cuentas medidas por el detector cuando es escaneado sobre un diámetro dado.

Se debe de tener cuidado con las estimaciones derivadas de un análisis como el que aquí se mencionó pues existe un déficit de área en comparación con el valor real, debido principalmente a que hay una distorsión del campo eléctrico cerca de los bordes de la superficie cilíndrica del detector; esto crea carga en dicha región la cual fluye a la superficie en donde se pierde y, por ello, las señales no son registradas.

Dirijamos ahora nuestra discusión hacia los ángulos sólidos subtendidos por una fuente puntual ubicada en el eje de simetría cilíndrico del detector, dicha fuente está a una distancia d de la superficie activa frontal. El ángulo sólido esta dado entonces por (obsérvese [7]):

$$\Omega(E) = 2\pi \left(1 - \frac{d + Z(E)}{\sqrt{(d + Z(E))^2 + a^2}} \right) \quad (2.1.5)$$

Siendo a el radio de la superficie activa y $Z(E)$ la profundidad de interacción media para fotones de energía E . Podemos determinar a la profundidad de interacción mediante la ecuación que aparece en [7]:

$$Z(E) = \frac{\int_0^D z \exp(-\mu_{Si} z) dz}{\int_0^D \exp(-\mu_{Si} z) dz} = \frac{1 - \exp(-\mu_{Si} D)(1 + \mu_{Si} D)}{\mu_{Si} [1 - \exp(-\mu_{Si} D)]} \quad (2.1.6)$$

Con μ_{Si} el coeficiente de absorción lineal del Silicio y D la profundidad sensible. Si el radio de la superficie activa es menor o igual a un décimo de la distancia de la fuente al detector la ecuación (2.1.5) puede aproximarse por la simplificación dada en [7]:

$$\Omega(E) = \frac{\pi a^2}{(d + Z(E))^2} \quad (2.1.7)$$

Lo que nos permite obtener el ángulo sólido para la cara frontal del detector con la siguiente expresión (las siguientes cuatro expresiones son tomadas de [7]):

$$\Omega_F = \frac{\pi a^2}{d^2} \quad (2.1.8)$$

Si la fuente radiativa no es puntual se puede incluir un factor de corrección para (2.1.8) dado por:

$$f_g(E) = \frac{2}{y} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{1-y}} \right] \quad (2.1.9)$$

Con:

$$y = \frac{a_s^2}{(d + Z(E))^2} \quad (2.1.10)$$

Siendo a_s el radio de la fuente; con esto en mente el ángulo sólido corregido se encuentra dado por el producto de (2.1.9) con (2.1.8). Cuando la distancia a la superficie activa frontal es igual o mayor a 30 veces el radio de la fuente se tiene que el factor de corrección es muy cercano a 1 lo cual reduce drásticamente el error a valores menores al 0.1 %, permitiéndonos así el uso de la aproximación al ángulo sólido que representa (2.1.7).

Existe a su vez una dependencia de la eficiencia con la distancia radial ρ que tiene una fuente puntual respecto al eje simétrico de la ventana de Berilio; si llamamos ε_0 a la eficiencia en el eje simétrico y b_0 a un parámetro característico del detector (función de la energía del fotón incidente), dicha dependencia está dada por:

$$\varepsilon(\rho) = \varepsilon_0 \exp(-b_0 \rho^2) \quad (2.1.11)$$

Para determinar dicha dependencia radial en [7] se menciona que en el trabajo se movió en dicha dirección a una fuente de Cobalto 57 manteniéndola en un plano perpendicular a la superficie del detector, comprobándose lo que se deduce de (2.1.11), es decir, que la eficiencia disminuye rápidamente a medida de que la distancia radial aumenta.

Cabe mencionar que cuando un fotón es detectado por el detector de Silicio – Litio el sistema de este instrumento genera un pulso eléctrico cuya altura varía linealmente con la energía del fotón; si se toma como E a la energía del fotón, y x se le llama al canal en el que se ubica el centro del pico con dicha energía, el comportamiento lineal hace que estos valores se relacionen por lo dado en [7]:

$$E = Ax + B \quad (2.1.12)$$

Mencionaremos ahora un poco acerca del *Factor de Fano*. La forma de los picos detectados por nuestro instrumento, en una primera representación teórica, debería de ser la de una Gaussiana cuyo centroide se ubicase en el canal correspondiente a la energía del fotón recibido. El hecho de que fuera una Gaussiana y no una función delta se debe a que el cristal detector libera cargas al azar lo cual genera el ancho del pico.

En la realidad, el pico no tiene la forma de una Gaussiana debido al ruido electrónico y a otros efectos generados durante la detección; el factor llamado *ancho total a la mitad del máximo* (o *FWHM* por sus siglas en inglés) de cada pico para energías pequeñas está dado por (refiérase a [7] para esta expresión):

$$(FWHM)^2 = W_{elec}^2 + 5.5225\xi FE \quad (2.1.13)$$

Donde W_{elec} es la parte del ruido que no depende de la energía fotónica, mientras que el segundo sumando marca las fluctuaciones estadísticas en la recolección de cargas y ξ representa la energía necesaria para crear un par electrón – agujero en el material del detector, el cual toma el valor de 3.81 eV para el Silicio a 77 grados Kelvin. El denominado *Factor de Fano* F es una muestra de la desviación de la estadística de Poisson en la formación de cargas del detector.

Para determinar a este factor se hacen incidir sobre el detector, rayos X K_α de distintas energías y se mide el FWHM, conociendo la energía de dichos fotones se puede emplear a (2.1.13), para obtener F ajustando los datos del $(FWHM)^2$ para varias energías por medio de una recta y así deducir al factor como la pendiente de dicho ajuste; mientras que a W_{elec} se le puede ver como la ordenada al origen en esta gráfica.

Si las energías son más altas que 45 keV el valor de FWHM aumenta debido a la fuga de corriente dentro del detector, por lo que se debe de corregir a (2.1.13) con un factor que tome en cuenta esto.

A partir de este punto nuestra discusión se enfocará a describir una manera de medir cada una de las capas que forman al detector, como mencionamos al principio del texto, comenzando por la *Ventana de Berilio*. Ya que esta ventana se encuentra encerrada dentro del Criostato no existe una manera directa de medir su grosor, sin embargo, se puede medir este dato junto con el de todas las capas de contaminación como una sola capa de atenuación.

En lo que respecta a la capa de oro, es necesario determinar su grosor puesto que la eficiencia del detector, en regiones bajas de energía, se verá afectada por los bordes de absorción del oro los cuales producen discontinuidades en la transmisión de rayos X a través de dicha capa. Para poder medir el valor de nuestro interés se utiliza la fluorescencia de la subcapa L del oro empleando fotones de energías mayores a 11.92 keV. Observando los rayos X L_α del oro producidos por la fluorescencia en el contacto de dicho material, y

considerando que la mitad de los rayos llegan a la profundidad activa del detector, es posible determinar el grosor de la capa.

Para excitar al Oro se usan los rayos X K , en [7], del Estroncio producidos por una fuente de Yodo 88, esto genera picos pequeños L_α y L_β del Oro, mientras que la fluorescencia permite deducir un grosor para la capa de oro que se encuentra dado por [7]:

$$x_{Au} = \frac{2C_{L\alpha}}{\omega_{L_3}\varepsilon_{L\alpha}f_{L\alpha} \left[\frac{C_{K\alpha}}{\varepsilon_{K\alpha}} (\mu^{p_3}(K\alpha) + f_{23}\mu^{p_2}(K\alpha)) + \frac{C_{K\beta}}{\varepsilon_{K\beta}} (\mu^{p_3}(K\beta) + f_{23}\mu^{p_2}(K\beta)) + (f_{13} + f_{12}f_{23})\mu^{p_1}(K\beta) \right]} \quad (2.1.14)$$

En donde $C_{L\alpha}$, $C_{K\alpha}$ y $C_{K\beta}$ son las producciones de las tasas de conteo de los rayos x para el Oro L_α , el Estroncio L_β y el Estroncio K_β ; $\varepsilon_{L\alpha}$, $\varepsilon_{K\alpha}$ y $\varepsilon_{K\beta}$ son las eficiencias del detector para cada uno de los rayos X ya mencionados. $\omega_{L_3} = 0.32$ es la producción de fluorescencia de la subcapa L_3 del Oro, $f_{L\alpha} = 0.798$ es la proporción entre las probabilidades de transición de la capa L_α del oro y la L_3 ; $f_{12} = 0.14$, $f_{13} = 0.53$, y $f_{23} = 0.122$ son las producciones de transición Coster – Kroning para las subcapas L del oro. Finalmente $\mu^{p_i}(K_j)$ es el coeficiente de absorción fotoeléctrico de la subcapa del Oro L_i para los fotones K_j del Estroncio.

La siguiente capa en nuestro detector es la capa muerta frontal de Silicio, la cual es responsable por una discontinuidad en la eficiencia a una energía dada causada por el borde de absorción K del Silicio. Se propone una forma de medir el grosor de esta capa mediante la fluorescencia inducida por fotones que tengan energías superiores a la energía a la cual se presenta la discontinuidad. Un análisis nos permite obtener que [7]:

$$x_0 = \frac{2C_K \varepsilon_e}{\mu_{Si}^p C_e \omega_K^{Si} \varepsilon_K} \quad (2.1.15)$$

Con C_K , ε_K , C_e y ε_e las producciones de las tasas de conteo y las eficiencias de los rayos X K de Silicio y de los fotones excitantes respectivamente; μ_{Si}^p es el coeficiente de absorción para la capa de Silicio que hemos trabajado y para los fotones excitantes, finalmente $\omega_K^{Si} = 0.048$ indica la producción de fluorescencia de la capa K del silicio.

Existe una dependencia radial de la capa muerta del Silicio para algunos detectores de Silicio Litio, la cual es más gruesa en los bordes que en el centro y que explica la pendiente en la curva de eficiencia para la región entre 6 y 20 keV de energía del fotón. Debido a que no se puede observar la forma real de la capa muerta, se supone que hay una capa muerta

de Silicio uniforme junto con una anular en la región de la periferia de un grosor constante; para que pueda incluirse este efecto de la sección periférica en el cálculo de la eficiencia de esta capa es necesario multiplicar a (2.1.15) por un factor de corrección dado por [7]:

$$f_p = 1 + \alpha_0 \exp(-\mu_{Si} x_{op}) \quad (2.1.16)$$

Con x_{op} el grosor de la capa muerta de Silicio periférica y α_0 la proporción entre las áreas de las ventanas del detector con y sin la capa periférica. Esto nos sirve ya que si los grosores de la ventana de Berilio y la capa de contacto de Oro ya han sido calculados, el resto de los grosores pueden obtenerse al ajustar los valores experimentales de la eficiencia con la eficiencia total absoluta del detector multiplicada por el factor de corrección mencionado arriba.

Existe una capa de hielo en frente del contacto de oro la cual aumenta con el paso del tiempo, esto origina una disminución gradual en la eficiencia absoluta sobre todo para los fotones que carecen de la energía suficiente para atravesarla (fotones de 6 keV o menores).

Al efecto de la capa de hielo en la disminución de la eficiencia absoluta se agregan los debidos a contaminantes externos como pueden ser el aceite dentro de la bomba de vacío y algunos otros.

Uno de los efectos que mencionamos en los capítulos anteriores es el de la interacción de los fotones con los átomos del material constituyente (en este caso con las capas K del cristal de Silicio), dicha interacción produce fotoelectrones y rayos X K_α del Silicio, algunos de estos rayos pueden escapar de la zona activa del detector lo cual causa que se detecten fotones con energías menores a la de incidencia por un factor de 1.74 keV.

El efecto de esto es la aparición de un pico (pico de escape) con energía asociada al centroide de $E - 1.74$ keV pero con el mismo valor de FWHM que el del pico original; sin embargo la intensidad de estos suele ser una parte mínima de la del pico inicial (la intensidad de estos picos se sumó a la de las líneas originales sobre todo en el caso de las líneas L_i y $L_{\alpha 1}$). Si la radiación incide perpendicularmente en la superficie del detector y considerando que los rayos X sólo escapan por la cara frontal del detector se puede obtener una ecuación para la probabilidad de escape de los rayos X [7]:

$$\zeta = \frac{1}{2} \omega_K \left(\frac{r-1}{r} \right) \left[1 - \frac{\mu'_{Si}(K)}{\mu'_{Si}} \ln \left(1 + \frac{\mu'_{Si}}{\mu'_{Si}(K)} \right) \right] \quad (2.1.17)$$

Con ω_K la producción de fluorescencia para la capa K del Silicio, r la tasa de salto de absorción K del Silicio, μ'_{Si} el coeficiente de absorción de masa del Silicio para la radiación incidente y $\mu'_{Si}(K)$ s el coeficiente para los rayos X K del Silicio. En el caso en

el que la radiación no incida normalmente se debe de corregir (2.1.17) pero ello conlleva un problema en la medición el ángulo de incidencia de la radiación; una solución a esto es medir ζ y luego ajustar la curva resultante mediante 3 parámetros en la ecuación siguiente, como se dice en [7] para las siguientes ecuaciones:

$$\zeta = C_1 \left(1 - C_2 E^{C_3} \ln \left(1 + \frac{1}{C_2 E^{C_3}} \right) \right) \quad (2.1.18)$$

Una vez calculado esto, se corrige a (2.1.1) mediante el siguiente factor:

$$f_{esc} = 1 - \zeta \quad (2.1.19)$$

Llamamos proporción de intensidad κ del pico de escape al cociente entre (2.1.17) y (2.1.19). Para poder definir si el uso de (2.1.17) es correcto en nuestro detector, se deben de comparar los valores teóricos de κ con los medidos experimentalmente al bombardear con protones distintos blancos gruesos; al hacer esto se obtiene una buena relación con dicha ecuación para energías superiores a 3 keV.

Como mencionamos arriba, la forma de los fotopicos se aleja de la dada por una Gaussiana al momento de hacer experimentos reales, por esto, los picos están descritos por un pico Gaussiano y una cola en su lado de menor energía la cual surge debido a varios efectos los cuales se suman en un fondo continuo debido a la radiación de frenado de los protones alentándose y a la producción de electrones secundarios. Estos efectos son: una recolección pobre de carga debida a la radiación en el cristal de Silicio – Litio, el efecto Auger (del que hablamos en secciones pasadas) en el blanco, y la dispersión de Compton (también ya mencionada) de los fotones en el camino de la fuente al detector para energías entre 17 y 40 keV.

La recolección pobre de carga puede explicarse por la difusión de electrones térmicos en la superficie del detector y su posterior pérdida; a su vez, para bajas señales, las bajas señales de voltaje que se registran se deben al escape de la región activa de electrones Auger y fotoelectrones. Se pueden describir las zonas que se alejan de la forma de la Gaussiana recurriendo a un nuevo modelo del detector en el cual el cristal principal está dividido en tres regiones: La capa muerta de Silicio, en la cual la eficiencia de recolección de carga η es 0; una segunda capa de grosor T en donde la eficiencia es menor que 1; y finalmente la última carga con eficiencia de valor 1.

Esto implica que la carga generada en la segunda capa produce un pulso más chico que el del fotón original; si negamos los efectos de la radiación de frenado y la dispersión Compton, el valor del grosor de dicha capa puede obtenerse mediante:

$$T = \frac{1}{\mu'_{Si}} \ln \left(1 + \frac{N_{BC}}{N_{FC}} \right) \quad (2.1.20)$$

En donde N_{FC} (formado por las contribuciones de las áreas Gaussianas de los picos y de sus picos de escape, el apilamiento de los pulsos y el efecto Auger) simboliza el número de eventos en donde toda la carga creada dentro del cristal es completamente recolectada, y N_{BC} (el número total de cuentas del espectro menos N_{FC}) es el número de eventos en donde la carga sólo se recolecta parcialmente.

Ya que T depende de la energía, la segunda capa no se encuentra bien definida y deben de agregarse cúmulos a la tercera capa en los cuales exista una compensación incompleta de las impurezas del aceptor por parte de los donores de Litio; si la radiación interactúa en dichos cúmulos se recolectará la carga parcial generada. Es por esto que la capa segunda debe de ser interpretada como construida por una capa no dependiente de la energía de grosor T_C y una de grosor T_E que si dependa de ella; con esto en cuenta se da que, si llamamos b a un parámetro relacionado con la densidad de cúmulos en nuestro cristal, el grosor de la capa es [7]:

$$T = T_E + T_C = \frac{b}{\mu'_{Si}} + T_C \quad (2.1.21)$$

Nos toca determinar el último parámetro de (2.1.1), es decir, la profundidad activa D la cual es la región activa del cristal en donde es posible recolectar carga; para determinar este grosor se debe ajustar (2.1.1) a los valores experimentales de la eficiencia. Para entender esto explicaremos ahora un poco acerca de la determinación experimental de la eficiencia, la cual es usualmente medida para estudios PIXE mediante el uso de fuentes radiactivas con energías ya conocidas y con rayos x inducidos por el impacto de iones.

Las fuentes radiactivas puntuales usadas en [7] incluyen al Cobalto 57, al Cesio 137 y al Americio 241 entre otras, estas deben de ser colocadas en la misma zona en la que incide nuestro haz de protones durante el análisis, así la eficiencia puede determinarse como [7]:

$$\varepsilon(E) = \frac{N_x f_C}{A_0 \Gamma(E)} \quad (2.1.22)$$

Siendo N_x el número de fotones registrados, A_0 la actividad de la fuente, $\Gamma(E)$ el número de fotones con una energía E emitidos por decaimiento, f_C es un factor de corrección por la atenuación de la cápsula. Para determinar la eficiencia en regiones menores a los 10 keV se debe de usar un método PIXE pues existen pocas fuentes radiactivas que emitan con energías tan bajas, mediante el método PIXE la eficiencia está dada por [7]:

$$\varepsilon(E) = \frac{N_X \sigma_R(E_0) \Omega_R F_R}{N_R f \omega_K \sigma_K(E_0) F_X} \quad (2.1.23)$$

Con N_R el número de protones dispersados que son detectados por el detector de barrera de superficie y Ω_R su ángulo sólido; $\sigma_K(E_0)$ y $\sigma_R(E_0)$ son las secciones transversales de ionización para la capa K y la de la retrodispersión de Rutherford; ω_K es la producción de fluorescencia de la capa K , mientras que f es la tasa de emisión relativa de las líneas K_α y K_β . Los términos F son correcciones debidas a la dependencia con la energía de las secciones transversales.

Como parte final de esta sección incluimos una discusión acerca de los ajustes a los datos experimentales de la eficiencia, ya que es útil tener una expresión analítica que describa los valores obtenidos en el experimento. La función depende de la energía E del fotón, asumiendo que la atenuación del fotón es proporcional a $E^{-\nu}$, siendo el exponente cercano a -2.9; la forma de la función es (refiérase a [7]):

$$\varepsilon = \frac{\Omega}{4\pi} \exp(-\alpha E^{-\beta}) (1 - \exp(-\gamma E^{-\delta})) \quad (2.1.24)$$

Siendo todos los caracteres griegos (excepto ε y π) parámetros de ajuste con valores cercanos a 2.9 para α y β . El ajuste por mínimos cuadrados no lineales se realiza entonces con el algoritmo de Marquardt. [8]

El problema con este método es que no considera los bordes de absorción provenientes de las capas de Silicio y Oro, por lo que es mejor tratar de ajustar a los datos experimentales la ecuación (2.1.2), lo cual se hace para energías menores a 20 keV considerando al ángulo sólido y a los grosores de las capas de hielo y de Oro como los parámetros para ajustar; para energías mayores a este límite sólo consideramos a la profundidad activa como parámetro a ajustar. Con todo esto en cuenta se observa que en las regiones superiores a los 4.5 keV de energía del fotón los ajustes son muy cercanos a los valores experimentales medidos de la eficiencia, por lo que las expresiones que describen a la eficiencia se deben de separar en dos rangos, uno para energías menores a 4.5 keV en la cual la ecuación correcta es (2.1.24) y para energías mayores en las que la ecuación a usar es (2.1.2).

2.2 Descripción de la Técnica PIXE

El objetivo de esta sección es mencionar algunos aspectos de la técnica de análisis PIXE considerando la forma de los espectros obtenidos para películas delgadas, su significado y el fondo continuo presente en ellos. Ya mencionamos en este capítulo un poco acerca de los detectores de Silicio Litio, que son los más comunes para este tipo de análisis ya que poseen una resolución de energía de 150 eV a 5.9 keV permitiendo que las líneas de rayos

X K (las que representan fotones de menor energía) para elementos vecinos puedan resolverse con una alta precisión.

Sin embargo, el alto número de picos presentes en un espectro común hace que la interferencia y apilamiento entre ellos sea un fenómeno común sin importar lo buena que pueda llegar a ser la resolución del detector de Silicio Litio.

PIXE es un método analítico basado en la emisión de Rayos X, en esta, los protones de alta energía que se impactan sobre un material expulsan electrones de las capas más internas de los átomos constitutivos del blanco. Cuando la vacante generada se llena con el descenso de un electrón de una capa superior se emite un fotón en la frecuencia de los Rayos X.

También puede suceder (como se dijo en el capítulo anterior) que la desexcitación se lleve a cabo mediante el efecto Auger lo cual debe de tomarse en cuenta al momento de estudiar el espectro producido, ya que la probabilidad de emisión de un cuanto de Rayo X (la producción de fluorescencia mencionada antes) es casi 1 para los elementos pesados, pero muy baja para los elementos ligeros.

El espectro de rayos X se encuentra determinado por los niveles de energía de los electrones en los átomos. Si se observa un diagrama para un elemento medianamente pesado como el mostrado en la Figura 2.2.1 (tomada de [9]), en la cual se observan las transiciones permitidas por las reglas cuánticas de selección, puede notarse que las transiciones que llegan a la capa K son denominadas *rayos X K*, y de igual manera para los rayos X *L* y *M*.

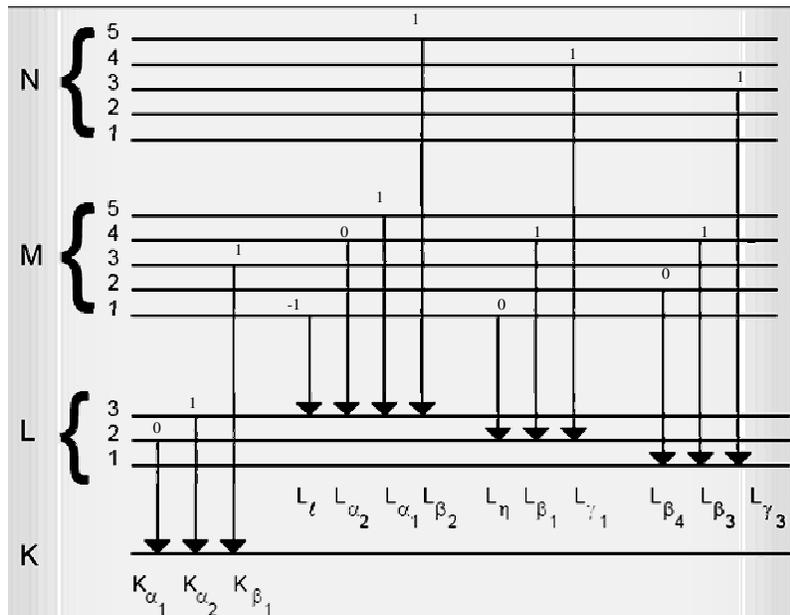


Figura 2.2.1 En la ilustración se observa un diagrama simple de las transiciones electrónicas que dan origen a los rayos X inducidos por partículas. Sobre cada flecha se incluye el valor del cambio del momento angular total (Δj) de cada vacante asociada.

Si el electrón que llena la vacancia viene de la capa L, la transición es llamada K_α , mientras que si viene de la capa M se le denota como K_β ; debido a la presencia de la estructura fina, tanto K_α como K_β tienen dobletes. Las transiciones a la capa L tienen muchas componentes, especialmente para los elementos pesados lo cual complica enormemente la forma del espectro final, sin embargo muchas componentes tienen casi la misma energía ($K_{\alpha 1}$ y $K_{\alpha 2}$ por ejemplo) por lo que aparecen fundidas en un mismo pico; o bien son de intensidades muy bajas para ser registradas.

Por estas razones es que para los elementos medianamente pesados y pesados comunmente sólo se pueden resolver los picos K_α y K_β para la serie K; en el caso de los rayos L se pueden resolver 6 picos de manera predominante.

La eficiencia del tipo de detectores con los que trabajamos disminuye drásticamente para energías fuera del rango entre 5 y 25 keV; es esta característica entre otras la que nos dictamina el tipo de series que pueden emplearse en un análisis, por ejemplo, para elementos con un número atómico entre 20 y 50 es preferible usar la serie K, mientras que para elementos cuyo número atómico sea mayor que 50, es más fácil observar a la serie L.

Un espectro PIXE común se muestra en la figura 2.2.2 la cual corresponde al obtenido en nuestros experimentos para una energía de bombardeo de 700 keV; todos los picos se encuentran montados en un fondo continuo de radiación el cual explicaremos a profundidad más adelante. Para poder calcular las concentraciones elementales en la muestra bombardeada se debe obtener el área de cada pico, sin embargo, debido al apilamiento de los picos y a su interferencia, una deconvolución correcta requiere de programas de computadora diseñados para ello (como el AXIL o el GUPIX)

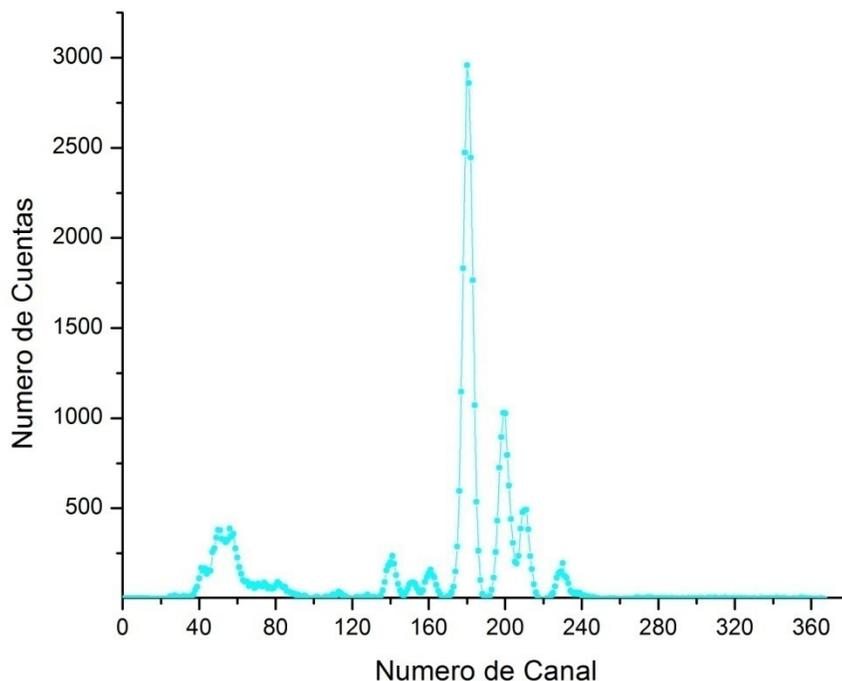


Figura 2.2.2 En la imagen se observa un espectro PIXE obtenido al bombardear a la muestra de GdF_3 con protones de 700 keV, en este espectro se grafica el número de cuentas contra el número de canal.

El tiempo de cálculo de estos programas, así como su precisión, dependerá del grado de aproximación que quiera obtenerse y de otros factores como el límite de detección del instrumento de medición, la corriente del rayo, la eficiencia del detector y la cantidad de cuentas obtenidas para cada pico.

Como dijimos arriba, los rayos X característicos de los elementos que componen una muestra provienen de la desexcitación de las vacantes producidas por la ionización a través de la interacción eléctrica del rayo de protones incidentes con los electrones de las capas internas. Existen varias teorías dedicadas a describir las secciones transversales de ionización para las capas electrónicas, siendo una de las más comunes para la capa K la que se conoce como PWBA, que mencionaremos más adelante, y su versión corregida por efectos relativísticos, de ligadura, polarización y deflexión Coulombiana llamada ECPSSR; la cual considera que la deflexión de las partículas y su cambio de velocidad se deben al campo eléctrico nuclear, a la perturbación de los estados estacionarios atómicos, a los efectos relativistas del protón incidente y a la pérdida de energía durante la colisión. [10]

Se requiere un estudio más complejo para la capa L , ya que las secciones de ionización cambian y dependen de la energía de bombardeo para cada una de las 3 subcapas presentes, es por ello que para la obtención de dichos valores se utiliza el programa *ISICS*; como las vacantes pueden migrar de una subcapa a otra antes de que se emita un rayo X las secciones eficaces deben de ser corregidas como se indicará más adelante; todo esto es la causa principal de que las intensidades de las líneas L cambien con la energía de los protones.

El espectro de rayos X K , L y M para un elemento está comprendido por las líneas de diagrama provenientes de las transiciones de las capas internas, junto con dos tipos de satélites. Los satélites Auger Radiativos suceden a energías ligeramente menores a aquellas de las líneas de diagrama y surgen por el intercambio de la energía de excitación entre el rayo X y un electrón simultáneamente expulsado de la capa más externa del átomo.

El satélite más predominante es el de la serie K llamado la línea KMM , cuyas mediciones son dos tercios de lo esperado teóricamente debido a que la estructura radiativa Auger no puede ser resuelta por el traslape de las líneas K_β .

La ionización simultánea de un electrón K y uno L resulta en una vacante L espectadora durante la desexcitación de la capa K , y por ello los rayos X producidos resultan con mayor energía; este fenómeno, aunque no común, no es despreciable y el cambio en energía debe estimarse de algún modelo teórico. Para átomos con números atómicos entre 20 y 30, la intensidad del satélite KL es sólo de un pequeño porcentaje con respecto a la línea de diagrama y depende de la energía del protón incidente; cuando el número atómico supera el valor de 30 la energía del satélite supera a la energía de amarre haciendo que la línea del satélite sea absorbida cuando existe una gran población del elemento en cuestión lo que altera la proporción entre K_α y K_β . Existen también satélites para los rayos X L pero su estructura se vuelve mucho más complicada debido a la presencia de las 3 subcapas.

Nos dedicaremos ahora a determinar la relación que existe entre las intensidades de los rayos X y la concentración de un elemento. Ya que la energía de los protones que componen el haz disminuye muy ligeramente en cada colisión inelástica con los átomos, su recorrido prácticamente no se ve desviado; el perfil de energía sobre el camino del protón puede aproximarse utilizando el poder de frenado de la matriz [11]:

$$S_M(E) = \frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx} \quad (2.2.1)$$

Para un análisis simple comencemos con la excitación causada por los rayos X K , si tomamos que los elementos están distribuidos homogéneamente y tienen un número atómico Z , una masa atómica A_Z , una concentración C_Z , y un número de vacancias en la capa K dN_K se tiene que: (refiérase a [11]):

$$dN_K = \frac{N_p N_{av} C_Z \sigma_Z(E)}{A_Z S_M(E)} dE \quad (2.2.2)$$

El número de rayos para una línea K en particular se obtiene utilizando la producción de fluorescencia $\omega_{K,Z}$ y la fracción de intensidad de la línea $b_{K,Z}$. Si llamamos α al ángulo de incidencia de los protones y Θ_{T_0} al ángulo formado por la dirección de los rayos X respecto a la superficie del material, entonces la intensidad de los rayos X del elemento en el camino indicado sufre un factor de transmisión [11]:

$$T_Z(E) = \exp \left[- \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_{Z,M} \frac{\cos \alpha}{\sin \Theta_{T_0}} \int_{E_0}^E \frac{dE}{S_M(E)} \right] \quad (2.2.3)$$

Si llamamos E_0 y E_f a las energías de entrada y salida del protón, mientras que $t_{K,Z}$ es la transmisión a través de los materiales absorbentes colocados entre la muestra y el detector, se puede obtener integrando sobre todo el camino del protón la intensidad de cada rayo X K [11]:

$$Y(Z) = \frac{N_{av} \omega_{K,Z} b_{K,Z} t_{K,Z} \mathcal{E}_Z^i \left(\frac{\Omega}{4\pi} \right)}{A_Z} N_p C_Z \int_{E_0}^{E_f} \frac{\sigma_Z(E) T_Z(E)}{S_M(E)} dE \quad (2.2.4)$$

Para el caso de los rayos X L debemos de incluir a las tres subcapas y a las tres probabilidades f_{12} , f_{13} y f_{23} para los procesos Coster – Kronig, lo que genera cambios no radiativos de las vacantes de una subcapa a una superior sin la emisión de un rayo X L , cambiándose por esto la subcapa de la cual el rayo X es característico; además existe también la probabilidad de una transferencia radiativa de una vacancia de L_1 a L_3 f'_{13} . Comenzamos definiendo secciones transversales efectivas que ya incluyan estos efectos y la cantidad R_n para cada subcapa L_n [11]:

$$\sigma_{L_1,Z}^{eff} = \sigma_{L_1,Z} \quad (2.2.5)$$

$$\sigma_{L_2,Z}^{eff} = \sigma_{L_2,Z} + f_{12} \sigma_{L_1,Z} \quad (2.2.6)$$

$$\sigma_{L_3,Z}^{eff} = \sigma_{L_3,Z} + f_{23} \sigma_{L_2,Z} + (f_{13} + f_{12} f_{23} + f'_{13}) \sigma_{L_1,Z} \quad (2.2.7)$$

$$R_n = \frac{N_{av} \omega_{L_n,Z} b_{L_n,Z} t_{L_n,Z} \mathcal{E}_{L_n,Z}^i \left(\frac{\Omega}{4\pi} \right)}{A_Z} \quad (2.2.8)$$

Entonces, para cada serie L_n la intensidad de los rayos X es [11]:

$$Y(Z) = R_n N_p C_Z \int_{E_0}^{E_f} \frac{\sigma_{L_n, Z}^{eff}(E) T_Z(E)}{S_M(E)} dE \quad (2.2.9)$$

La absorción de los rayos X inducidos por los protones dentro del material origina la ampliación de las fluorescencias secundarias de los rayos X característicos de algún elemento; su efecto puede calcularse usando las ecuaciones anteriores junto con la sección eficaz fotoeléctrica de varias subcapas.

Observemos ahora lo que pasa cuando se analizan películas delgadas como fue nuestro caso. Las ecuaciones obtenidas anteriormente pueden ser simplificadas cuando el material es muy delgado, ya que el coeficiente de transmisión se vuelve 1, la sección eficaz depende sólo de la energía inicial del protón, el factor $\frac{dE}{S_M(E)}$ cambia por $\frac{dx}{\rho}$, reduciendo toda la

integral a $\frac{t}{\cos \alpha}$ siendo t el grosor de la muestra. Si $m_a(Z)$ es la densidad de superficial de elementos la intensidad se vuelve [11]:

$$Y(Z) = \frac{N_{av} \sigma_Z(E_0) \omega_Z b_Z t_Z \epsilon_Z^i \left(\frac{\Omega}{4\pi} \right)}{A_Z \cos \alpha} N_p C_Z \rho t \quad (2.2.10)$$

$$Y(Z) = \frac{N_{av} \sigma_Z(E_0) \omega_Z b_Z t_Z \epsilon_Z^i \left(\frac{\Omega}{4\pi} \right)}{A_Z \cos \alpha} N_p m_a(Z) \quad (2.2.11)$$

Continuemos ahora con una descripción del fondo presente en los espectros. El fondo continuo que determina el límite de detección PIXE, en nuestro rango de energías, puede explicarse por tres tipos de procesos radiativos, los cuales son:

- Bremsstrahlung Atómico (AB por sus siglas en Inglés)
- Bremsstrahlung por electrones secundarios (SEB)
- Bremsstrahlung por electrones semilibres (QFEB)

En el presente texto describiremos a estos tres procesos como los causantes del fondo del espectro, también mencionaremos la dependencia del fondo con la energía y carga del protón así como su dependencia angular; hablaremos a su vez de otros efectos que causan el fondo como el de la dispersión de Compton, los rayos cósmicos, el fondo debido a la dispersión de Rutherford, el apilamiento de señales, los efectos del cargado del material así como los fondos naturales.

En un espectro normal PIXE puede observarse un fondo continuo además de los picos de rayos X de los elementos presentes en la muestra que se bombardea, y ya que dicho fondo

fluctúa con la energía esto limita a la medición forzando a que un pico sea al menos 3 veces más intenso que el ruido de fondo para poder ser detectado como un pico característico de rayos X.

En el espectro puede notarse un fondo continuo que se extiende en las regiones de alta energía (para nuestro caso esto sucedió de los canales 400 en adelante), dicho fondo es producido por el efecto de apilamiento entre los protones que sufrieron dispersión de Rutherford y los rayos X, y la dispersión de Compton debida a los rayos gamma producidos por las reacciones nucleares (ya que estos últimos no se presentaron en nuestra experiencia, pues trabajamos con energías muy chicas, sólo los mencionaremos)

Comenzaremos la descripción de los fenómenos que causan el fondo continuo por colisiones ión – átomo, y luego mencionaremos aquellos fondos inducidos por otros orígenes. El primer punto a tratar es el Bremsstrahlung por electrones secundarios (SEB).

Para entender este fenómeno supongamos que el protón incidente expulsa a un electrón del átomo blanco en un punto A, luego el electrón expulsado pasa a través del material perdiendo su energía; en un punto B, el electrón secundario es dispersado por la interacción Coulombiana debido al campo del núcleo produciéndose así el Bremsstrahlung.

Pasemos ahora al Bremsstrahlung producido por electrones semilibres (QFEB), ya que este fenómeno aparece predominantemente para energías del protón extremadamente altas en comparación a las manejadas, sólo lo mencionaremos brevemente. Cuando la velocidad del proyectil es muy grande en comparación a la velocidad de los electrones en los orbitales, los electrones pueden considerarse como libres y en reposo; la energía cinética de los electrones T_e puede ser dispersada por el campo eléctrico del proyectil y producir Bremsstrahlung, a este proceso lo llamamos QFEB.

El tercer proceso que contribuye al fondo continuo mediante interacciones ión – átomo, el Bremsstrahlung Atómico (AB). En este fenómeno el protón entra excitando a un estado continuo a uno de los electrones de las capas internas de los átomos que forman al blanco; cuando el electrón vuelve a su estado base emite un fotón de espectro continuo; ya que la emisión del fotón se debe a la estructura interna del átomo, se le llama AB.

Mencionaremos ahora otros tipos de orígenes para el fondo continuo; algunos de ellos, como el ruido electrónico y el apilamiento de señales pueden ser corregidos mediante ajustes en la electrónica del sistema, otros sin embargo, son fenómenos que no pueden retirarse con ajustes simples y por ello deben de considerarse en el análisis espectral. Entre estos tipos tenemos la dispersión Rutherford, la dispersión de Compton y la función de respuesta del detector Silicio Litio así como orígenes naturales como la radiación de fondo.

Comenzamos por la dispersión de Rutherford, la cual se da cuando los protones incidentes son dispersados por los átomos pesados que forman el material y alcanzan a llegar a la zona

de detección del detector; dicha señal es enorme en comparación con los rayos X, esto acompañado por el amplio rango del ancho de señales genera apilamiento de las señales de rayos X y un fondo continuo.

Esta situación puede resolverse colocando un frenador de protones enfrente del detector, aunque esto reduzca la capacidad para medir líneas K para elementos ligeros.

En lo que toca a la función de respuesta del detector hacemos notar que un pico se encuentra formado por (como se dijo en la sección anterior) una función Gaussiana, y una función de cola, además existen una función escalón (cuya causa aún no ha sido descrita) y una función uniforme. Ya que las colas no pueden evitarse al momento de hacer las mediciones y el ruido que estas generan puede dificultar el medir las trazas de elementos poco intensos que estén al lado del pico que genera a la cola, resulta de vital importancia tomar en cuenta a la función de respuesta del detector empleando alguna técnica de ajusta y un espectro calibrado de rayos X.

Si el material blanco se encuentra hecho de un aislante, la región bombardeada por los protones se carga positivamente; dicha carga genera un campo eléctrico que acelera a los electrones fuera del material, creándose así un Bremsstrahlung electrónico. El fondo creado se puede neutralizar con el uso de un filamento emisor de electrones que anule la carga del material.

Finalmente, los rayos gamma y cósmicos que llegan al detector forman un fondo continuo que sueña dar unas 3 cuentas por keV por lo que deben de tomarse en cuenta, sobre todo para picos muy pequeños o en caso de bajas estadísticas.

Con todo lo que hemos dicho puede obtenerse el límite de detección PIXE como una función de la energía incidente y del número atómico del elemento a detectar; así como de las condiciones experimentales y los elementos matriciales. [12]

Para concluir con esta sección, mencionaremos un poco sobre la aproximación PWBA referida anteriormente como la base para el cálculo de las secciones eficaces de producción de rayos X. Supongamos que una partícula colisiona con un átomo con el momento inicial \mathbf{p}_0 y que es dispersada con un momento final \mathbf{p} , si analizamos dicha colisión desde el marco de referencia del centro de masa, ya que la masa de la partícula incidente es muy chica puede considerarse que el centro de masa está en del núcleo del átomo.

Como la colisión es inelástica las energías del protón incidente y del átomo cambio, por lo que el sistema tendrá energías iniciales y finales dadas por [12]:

$$E_0 = \frac{p_0^2}{2m} + E_0 \quad (2.2.12)$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + E_n \quad (2.2.13)$$

Con E_0 y E_n las energías electrónicas iniciales y finales del átomo colisionado, y m la masa reducida del sistema. En [13] se muestra que la probabilidad por unidad de tiempo de que el sistema sufra una transición del estado inicial ν_0 a los estados en el rango $\nu + d\nu$ es [13]:

$$dP_{\nu_0\nu} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\nu_0\nu}|^2 \delta(E_\nu - E_{\nu_0}) d\nu \quad (2.2.14)$$

En donde $V_{\nu_0\nu} = \langle \nu | V | \nu_0 \rangle$. Aplicando la diferencia de energías del sistema en (2.2.14) se tiene que (confróntese con [16]):

$$dP_{pE_n p_0 E_0} = \frac{4\pi m}{\hbar} |V_{pE_n p_0 E_0}|^2 \delta(p^2 - p_0^2 + 2m(E - E_0)) dp_x dp_y dp_z \quad (2.2.15)$$

$$V_{pE_n p_0 E_0} = \iint \varphi_p^*(\mathbf{R}) \Psi_n^*(\mathbf{r}) V \varphi_{p_0}(\mathbf{R}) \Psi_0(\mathbf{r}) d^3 r d^3 R \quad (2.2.16)$$

Con φ las funciones para el protón incidente y Ψ para los electrones del átomo. Supondremos a la función de estado del protón como una onda plana en el momento previo a la colisión, y después de la colisión, a distancias suficientemente grandes, se puede seguir considerando como una onda plana; ambas funciones quedan dadas por (refiérase a [16] para las siguientes expresiones):

$$\varphi_{p_0} = \sqrt{\frac{m}{p_0}} e^{ip_0 \cdot \mathbf{R} / \hbar} \quad (2.2.17)$$

$$\varphi_p = \frac{1}{(2\hbar\pi)^{3/2}} e^{ip \cdot \mathbf{R} / \hbar} \quad (2.2.18)$$

De aquí puede expresarse a la sección eficaz de dispersión como:

$$d\sigma_n = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{p}{p_0} \left| \iint e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} V \Psi_n^* \Psi_0 d^3 r d^3 R \right|^2 d\Omega \quad (2.2.19)$$

En donde $\mathbf{q} = \frac{\mathbf{p} - \mathbf{p}_0}{\hbar}$. Para el caso de nuestro protón incidente el potencial puede darse como:

$$V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \frac{Ze^2}{R} - \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_j|} \quad (2.2.20)$$

$$d\sigma_n = \frac{m^2 e^4}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{p}{p_0} \left| \sum_{j=1}^Z \iint \frac{e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_j|} \Psi_n^* \Psi_0 d^3 r d^3 R \right|^2 d\Omega \quad (2.2.21)$$

Al integrar el elemento de volumen sobre todo el espacio se obtiene que:

$$d\sigma_n = \frac{4m^2 e^4}{q^4 \hbar^4} \frac{p}{p_0} \left| \sum_{j=1}^Z \int e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} \Psi_n^*(\mathbf{r}) \Psi_0(\mathbf{r}) d^3 r \right|^2 d\Omega \quad (2.2.22)$$

Se puede expresar a la probabilidad de que el protón sufra un cambio de momento entre \mathbf{q} y $\mathbf{q} + d\mathbf{q}$, pasando el átomo de un estado E_0 a E_n como:

$$d\sigma_n = 8\pi \left(\frac{e^2}{\hbar v_1}\right)^2 \frac{dq}{q^3} |F_{no}(q)|^2 \quad (2.2.23)$$

En donde el factor de forma atómico inelástico está descrito por:

$$F_{no}(q) = \sum_{j=1}^Z \int e^{-iq \cdot r_j} \Psi_n^*(r) \Psi_0(r) d^3r \quad (2.2.24)$$

Los factores de forma, pueden calcularse analíticamente como lo han hecho *Walske* [14] para la capa L total, y *Choi* [15] para cada una de las subcapas L_i . [16]

2.3 Tasas de Emisión de Rayos X Inducidos por Partículas

En este punto mencionaremos un poco acerca de las intensidades relativas de emisión de rayos X inducidos por partículas, así como las tasas de emisión de los mismos. Es importante conocer las probabilidades de transición en un átomo entre sub estados atómicos individuales; un átomo puede interactuar con los rayos X en 3 modos distintos:

1. Emisión Espontánea: Por la emisión de un fotón, un átomo que se encuentra en un estado excitado j de energía E_j desciende a un estado de energía i con energía E_i ; de modo que la energía del fotón es igual a la diferencia en la energía de los estados, lo cual corresponde a una línea espectral cuyo número de onda es, como se dice en [17]:

$$k_{ji} = \frac{1}{\lambda_{ji}} = \frac{E_j - E_i}{\hbar c} \quad (2.3.1)$$

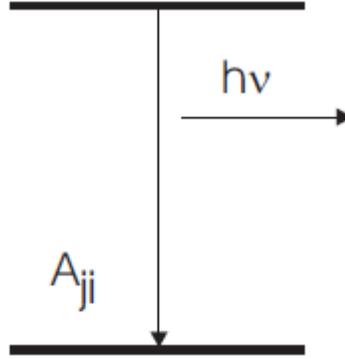


Figura 2.3.1 En la figura se observa un diagrama que ilustra la emisión espontánea de fotones con una probabilidad de transición A_{ji} .

La probabilidad de transición por unidad de átomo del estado inicial al final llamada a_{ji} , considera que para un campo aislado libre de átomos en el cual existe un momento angular total J_i hay $2J_i + 1$ estados degenerados con energía E_i , de modo que la probabilidad de transición espontánea para que el átomo pase del estado inicial a uno de los degenerados es [17]:

$$A_{ji} = \sum_{M_i} a_{ji} \quad (2.3.2)$$

2. Absorción: La absorción de un cuanto de rayo X se da al excitarse a un electrón de un estado fuertemente amarrado a uno más débil. La probabilidad de que se cambie a este estado por la absorción de un fotón con energía $h\nu_{ji}$ es [17]:

$$B_{ij} = \frac{c^3}{8h\pi\nu^3} A_{ji} \quad (2.3.3)$$

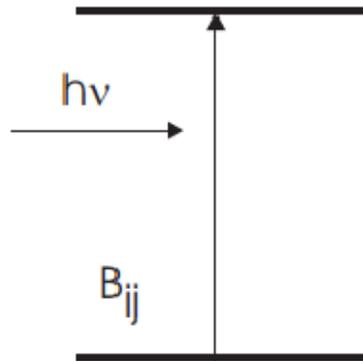


Figura 2.3.2 En la figura se observa un diagrama que ilustra la absorción de fotones por un átomo con una probabilidad de transición B_{ij} .

3. Emisión Inducida: Aquí los átomos excitados son estimulados con un fotón a descender a un estado de menor energía mediante la emisión de un fotón con la misma probabilidad que en el caso anterior, saliendo el fotón que se había ingresado al sistema.

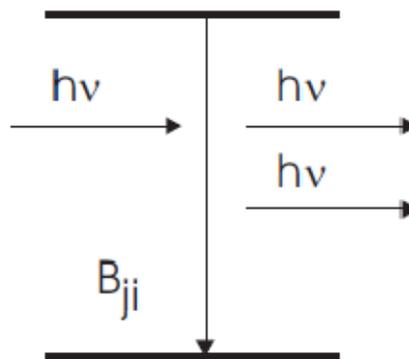


Figura 2.3.3 En la figura se observa un diagrama que ilustra la emisión inducida de fotones por un átomo con una probabilidad de transición B_{ji} .

Se le llama *vida media* al periodo de tiempo necesario para que un átomo emita su energía de excitación, el cual se vuelve más corto a medida de que la amplitud, y por ende la intensidad de la línea, aumentan. Si $N_j(t)$ es el número de átomos excitados en un tiempo t , la tasa de transición total como resultado de transiciones espontaneas, se expresa como se dice en [17]:

$$\frac{dN_j(t)}{dt} = -N_j(t) \sum_i A_{ji} \quad (2.3.4)$$

$$N_j(t) = N_j(0)e^{-t/\tau_j} \quad (2.3.5)$$

Con $\tau_j = \frac{1}{\sum_i A_{ji}}$ la vida media natural de cada átomo en cada uno de los estados del nivel j . Se deduce del principio de incertidumbre, que para una vida media finita existe un ancho natural para la línea espectral. Otra cantidad que caracteriza una probabilidad de transición es la conocida como *fuerza de oscilador* que se define como, según [17]:

$$f_{ji} = \frac{\pi \epsilon_0 m_e c^3 \hbar^2 A_{ji}}{e^2 E_{ji}^2} \quad (2.3.6)$$

Esta cantidad es adimensional y su significado es el número efectivo de electrones emitiendo radiación con la misma energía en el átomo. Si se desea tener una visión sistemática de las tasas de emisión de rayos X y las intensidades relativas entre líneas de transición individuales (factores de acoplamiento), comúnmente es insuficiente analizar los datos publicados en la literatura, pues existen diferentes anchos para las tasas de transición individuales.

Una imagen más completa puede obtenerse con los cálculos modernos que consideran que todas las aportaciones multipolares para la interacción entre el campo electromagnético y cada momento multipolar del átomo hacen posible la tasa de transición.

La tasa de emisión para fotones con energía $\hbar\omega$ e impulso $\hbar k$ en el ángulo $d\Omega$ y un vector de polarización ϵ , dentro de un átomo que pasa de un estado j a un estado i , resulta en la perturbación de primer orden [17]:

$$\Gamma_{ji} = \frac{\alpha\omega}{2\pi} |\langle \Psi_1 | \sum_j \alpha \epsilon e^{ikr} | \Psi_2 \rangle|^2 d\Omega_k \quad (2.3.7)$$

Debido a que por (2.3.7) se requiere conocer la función de onda atómica para deducir la tasa de emisión, buscamos obtener una expresión analítica para ella sin embargo, en los átomos con muchos electrones, esto sólo es posible de manera aproximada con métodos iterativos como el de *Hartree – Fock*.

La existencia de vacantes adicionales en diferentes subcapas atómicas influencia las probabilidades de emisión de transiciones de electrones radiativos, lo que se observa como variaciones en la intensidad de las transiciones de rayos X y en diferentes fluorescencias atómicas. Para describir dicho efecto se emplea un proceso de pesado estadístico que permite describir a las fluorescencias como fuerzas de oscilador en múltiples átomos ionizados, basándose en transiciones de una sola vacante y fuerzas de oscilador.

Si una subcapa, que puede contener un máximo de n_0 electrones, se encuentra ocupada por n electrones entonces la tasa de transición para dicha subcapa se ve reducida en comparación con la de la capa completamente llena, por un factor n/n_0 en el caso de

transiciones de un solo electrón, o $n(n-1)/n_0(n_0-1)$ si la transición comprende dos electrones. [17]

Capítulo 3: *Procedimiento Experimental*

En este capítulo presentaremos una descripción sobre el montaje experimental utilizado así como nuestro procedimiento llevado a cabo para la obtención de los espectros PIXE de la muestra de Fluoruro de Gadolinio. Se presentan ilustraciones de los tipos de espectros obtenidos como resultado de nuestro trabajo.

3.1 Descripción del Dispositivo Experimental

Comenzaremos con un breve resumen de las partes del acelerador involucradas en nuestro trabajo. La primera es la fuente de iones, que consiste en una botella de cuarzo la cual puede llenarse de distintos gases a ionizar mediante el empleo de una señal en la región de las radiofrecuencias, la botella está rodeada por dos barras magnéticas y posee en su interior dos electrodos RF, en un extremo de la botella está un ánodo que tiene cerca a un colector de electrones, en el otro extremo de la botella hay un canal para la entrada del gas a la botella y un canal de salida para el gas ionizado; como deseábamos bombardear a la muestra con protones, el gas que se encontraba dentro de la botella era hidrógeno.

Una vez que el gas se encuentra en su estado ionizado y se ha convertido en un plasma, éste debe de ser empujado fuera de la botella, con este fin se aplica una diferencia de potencial eléctrico entre el ánodo y un cátodo fuera de la botella; con la misma idea, se genera un campo magnético entre las barras afuera de la botella.

En la base del acelerador se instala una fuente de alto voltaje en la base del mismo la cual a su vez está unida a un electrodo en la forma de un peine de metal con las puntas muy afiladas; cerca de este peine se encuentra una polea, la cual, junto con otra polea, hace girar a una banda de material dieléctrico.

La otra polea está dentro de una esfera de metal a la que se encuentra pegado otro electrodo similar al primero, a medida de que la cinta se aleja de la polea superior (la cual suele estar hecha de acrílico) jala algunos de los electrones de la polea dejándola con una carga positiva y a la cinta con una negativa; esto hace que los electrones se concentren intensamente en el electrodo inferior a medida de que la banda sigue girando. Mientras dicha acción continua, el gas dentro del acelerador comienza a ionizarse (en nuestro caso hexafluoruro de azufre), causando que los electrones pasen a la polea cargada positivamente; ya que para ello deben de cruzar primero por la banda, terminan llegando al electrodo superior neutralizando un poco la carga dentro del domo, a este efecto se le denomina *Efecto Corona*.

En el momento en el que la corriente que asciende hacia el domo del acelerador se estabiliza con las corrientes que lo descargan (la de corona y la de resistencias de carga

entre otras) se adquiere la carga final acumulada en el domo, la cual permitirá obtener un potencial eléctrico determinado por la capacitancia del domo; es el potencial generado en el domo lo que causa que se aceleren los protones con las energías que nosotros deseamos.

La salida de la fuente de iones se ubica de manera que los protones pasen por el *tubo del acelerador* el cual está conectado con una serie de anillos equipotenciales (unidos entre sí por resistencias iguales, para hacer que cada uno tenga un potencial eléctrico distinto) y con el domo; esto permite que los protones sean acelerados en pasos mediante su trayecto por el tubo en vez de recibir la diferencia de potencial directamente.

A la salida del tubo se coloca un electroimán selector de energías, para asegurarnos que sólo los protones con la energía deseada y un ángulo determinado pasen al resto del acelerador. Un conjunto de rejillas colimadoras a la salida del tubo permiten definir la trayectoria del haz así como corregir algunas variaciones en la terminal del acelerador.

Con el fin de que las partículas no colisionen con otras durante su trayecto por el tubo, se requiere vaciar al mismo por medio de una bomba turbomolecular y una difusora ayudadas por bombas mecánicas; esto permite obtener vacío cercanos a los 10^{-6} torr. Una vez que los protones han pasado por todos los componentes del tubo llegan a la *cámara de análisis* en donde se realizará nuestro experimento. [18], [19] La Figura 3.1.1 (obtenida de [18] y [19]) indica un esquema de la fuente de iones empleada, mientras que la Figura 3.1.2 (obtenida de [18] y [19]) muestra el esquema simplificado del Acelerador Van de Graaff empleado.

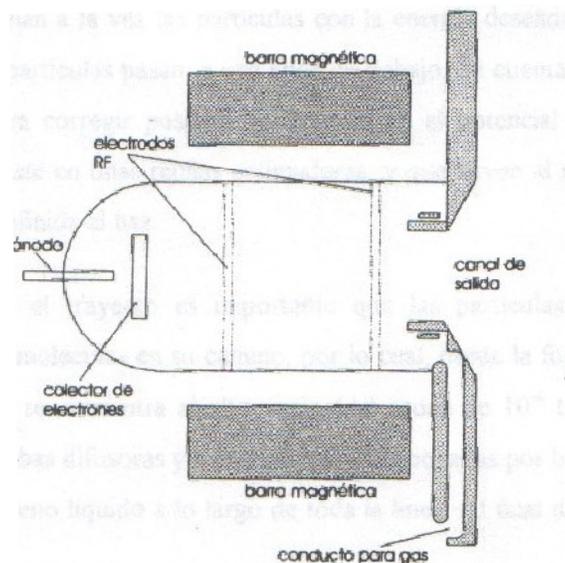


Figura 3.1.1 En la ilustración se muestra un esquema de la fuente de iones empleada en nuestro experimento.

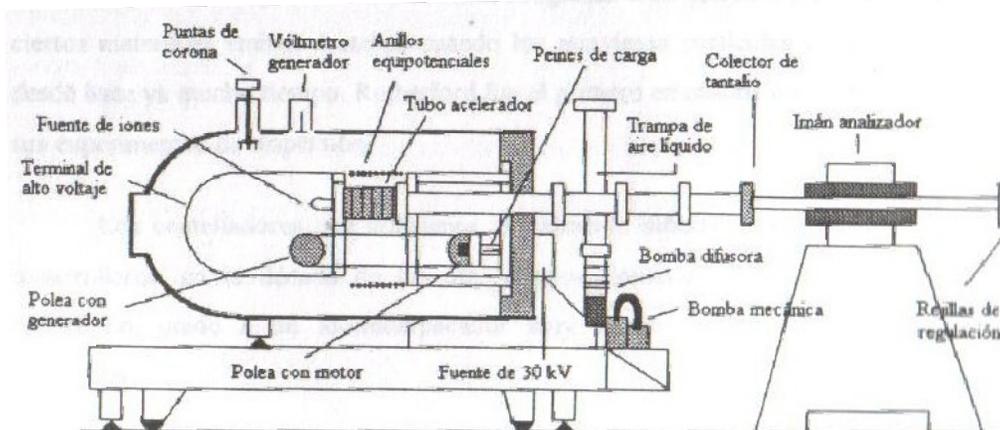


Figura 3.1.2 En la ilustración se muestra un esquema del acelerador Van de Graaff.

En la cámara de análisis se encuentra ubicado un detector de Si(Li) (el cual será especificado más adelante) conectado a un conjunto de preamplificadores y amplificadores, que procesan y envían las señales recogidas a un ordenador. El proceso por el cual esto se lleva a cabo es indicado en la siguiente sección.

3.2 Descripción Experimental

Comenzaremos esta parte del texto describiendo el método por el cual se preparó nuestra muestra de GdF_3 . En el Laboratorio del Acelerador Van de Graaff de 700 keV del Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México fueron colocadas varias pastillas de Grafito dentro de una evaporadora, en el cual se dispuso Fluoruro de Gadolinio bajo una rejilla de metal; dichas muestras fueron colocadas en un alto vacío y calentadas hasta el punto de evaporación de la sustancia de nuestro interés.

El material evaporado se depositó sobre los sustratos de Carbono pirolítico de modo que se formaron películas de Fluoruro de Gadolinio con un color plateado uniforme lo que revela un grosor relativamente constante en toda la muestra.

Dentro de la cámara se colocó la muestra de GdF_3 manteniéndose el mismo vacío que en la línea del haz, a un ángulo determinado, se colocó el detector de Silicio – Litio para que recibiera los rayos X producidos; el modelo del detector empleado es CANBERRA SL30165, con una ventana de Berilio, una capa muerta de $0.03 \mu m$, una profundidad activa de 3 mm una capa de contacto de Oro de $0.02 \mu m$, y una ventana de $25 \mu m$. La longitud del camino durante el experimento fue de 3.5 cm, la energía de excitación primaria fue de 16.5 keV.

Dicho detector tenía conectado un preamplificador, un amplificador y un analizador de un canal en donde los pulsos son registrados por un contador esclavo manejado por un contador maestro conectado a un integrador de corriente.

Una vez que los pulsos generados por el detector salen de él requieren ser amplificados para su posterior análisis, es por ello que al detector se le conectan una serie de circuitos electrónicos que permiten dar forma a las señales y amplificarlas; el primer circuito con el que trabajaremos es el *preamplificador* del cual se espera (al igual que con el resto de los circuitos) una respuesta lineal a los impulsos recibidos.

La función del preamplificador es la de recoger el pulso de voltaje entrante proveniente del detector e incrementar el tamaño del pulso para que sea manejable por el amplificador, así como proporcionar los voltajes de polarización necesarios para el detector; este instrumento debe de instalarse de modo que se reduzca al máximo posible la impedancia capacitiva del circuito total.

Los *amplificadores* toman la señal que viene del preamplificador e incrementan su tamaño de modo que la amplitud esté en el rango dinámico del resto de los instrumentos, además de proveerle una cierta forma que evite en lo más posible los apilamientos de los picos y controlar la proporción entre señal y ruido.

De ahí, la señal pasa a una tarjeta electrónica que convierte la señal de analógica a digital y que canaliza a la información para que pueda ser procesada por una computadora, la cual está conectada a dos de los canales de salida de la tarjeta (uno de ellos para el estudio RBS y el otro para el PIXE) cuya información será interpretada por los programas de computadora pertinentes.

Nuestro montaje experimental consistió de un arreglo PIXE tradicional. Se instaló a la muestra junto con su sustrato en la cámara de colisiones del Acelerador de 700 keV antes mencionado, teniendo las precauciones adecuadas y comunes a este tipo de análisis, es decir, asegurarse que el haz a incidir no tuviera ningún tipo de obstrucción en su camino hacia la muestra y colocar un colimador para el mismo de un milímetro de grosor, de manera que se redujera el ángulo sólido que habría de observar el detector; a su vez la muestra se dispuso de manera que la normal formada de la superficie formara un ángulo de 45 grados con respecto a la dirección de incidencia del haz y se montó un detector de Silicio Litio (mencionado en la sección anterior) a 90 grados de la dirección del haz para registrar a los fotones de rayos X que serían producidos dentro de la muestra para nuestro análisis.

Se bombardeó a la muestra con protones de varias energías en un intervalo de 300 keV hasta 750 keV, para estudiar dos fenómenos en ella, la producción de rayos X inducida por partículas y la retrodispersión de Rutherford de los protones entrantes, con objeto de registrar los eventos producidos y así obtener espectros representativos de cada evento, se

conectaron los circuitos electrónicos ya mencionados anteriormente. Una de las ventanas del Multicanal se eligió para estudio PIXE y la otra para dispersión de Rutherford; para el caso del estudio RBS se colocó al detector de partículas a 10 grados respecto a la normal, de manera que pudiera recibir a los protones que rebotaban en los átomos constituyentes de la muestra.

Una vez que se había generado el vacío necesario dentro del acelerador de partículas y la fuente de protones estaba lista, comenzó a regularse desde la sala de control, la energía a la cual aceleraría a los protones nuestro instrumento comenzando por la energía más alta de la que era capaz el acelerador (es decir 750 keV), ya que el indicador de la sala de control no se encuentra calibrado registramos el campo magnético producido para utilizarlo con una calibración previamente realizada y así asegurarnos que la energía de incidencia fuera la deseada; anotamos también la carga eléctrica registrada para que, conociendo el ángulo sólido, pudiésemos estimar el número de protones que inciden sobre la muestra.

Arrancamos el acelerador y con el software diseñado para estos análisis ya incluido en la computadora, iniciamos la captura de datos para los dos procesos a analizar. Con el conocimiento previo de la forma del espectro generado por el Gadolinio (adelante explicaremos porqué sólo nos enfocamos en este elemento y no en el compuesto para esta parte) ubicamos la línea L_I de rayos X y definimos en ese pico nuestra región de interés (*ROI* por sus siglas en inglés) dado que es una de las líneas menos intensas y si se tiene una buena estadística en esa zona, se obtendrán datos más fiables para todo el espectro.

Los experimentos se detenían al alcanzar un valor de la integral de este pico relativamente alto para tener una distribución estadística aceptable, sin embargo, dependiendo de las energías de bombardeo, esto resultaba o no una tarea sencilla; esto debido a que para energías altas el área de pico deseado aumentaba muy rápido de valor llegando a las 1000 unidades en pocos minutos, pero para energías bajas (alrededor de 300 keV) no se llegaba a las 200 unidades durante horas de experimentación. Fue por esto que se decidió dejar baja el área deseada para energías pequeñas de modo que el experimento pudiese ser terminado en cierto momento y continuado en un día posterior, para luego sumar los espectros y obtener los valores deseados.

Lo anterior ocurre porque las secciones de producción de rayos X dependen de la energía y, a medida de que la energía de bombardeo disminuye, resulta menos probable que se produzcan los fotones que deseamos registrar y por ello se debe de esperar una mayor cantidad de tiempo para tener un número de fotones que nos permitan observar una distribución estadística de los mismos. Por otro lado, cuando el protón tiene menos energía, un menor número de ellos alcanza a penetrar a la capa deseada y así generar la vacancia necesaria para la producción del rayo X.

Una vez que la integral en la ROI alcanzaba el valor deseado deteníamos el registro dentro de la computadora y mediamos el campo magnético y la carga acumulada referentes a la energía de bombardeo usada, para luego guardar los espectros obtenidos y convertirlos al formato ASCII para su posterior análisis. Después de esto se cambiaba la energía de bombardeo y repetíamos el proceso para una energía 50 keV menor, obteniendo al final 10 espectros PIXE y 10 para retrodispersión Rutherford. La Figura 3.2.1 muestra un espectro PIXE obtenido.

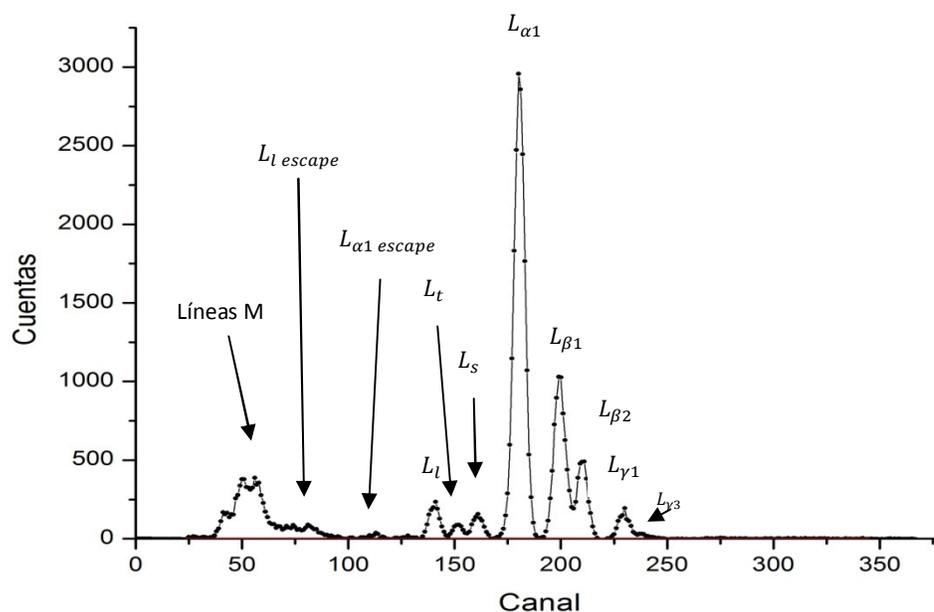


Figura 3.2.1 En la Ilustración se muestra el espectro PIXE de 750 keV, nótese los distintos picos correspondientes a diferentes líneas del Gadolinio.

Se necesitaba entonces determinar en primera instancia el valor promedio del grosor de la película con la que trabajamos y de ahí estimar si se trataba de una película delgada, mediana o gruesa (lo que nos indica si es que los protones incidentes ven reducida su energía o son frenados dentro del material). Con este fin utilizamos el programa SIMNRA con cada uno de los espectros Rutherford; el proceso fue como se indica a continuación:

Se insertaron en el programa los datos del espectro ASCII formándose de inmediato la gráfica correspondiente, al observarla notamos que la información importante se encontraba solamente dentro de los canales 1 al 600 y atribuimos el resto a ruido de fondo; una vez restringido nuestro rango de trabajo comenzamos a plantear dentro del software las condiciones del experimento. En la sección de *SETUP: EXPERIMENT* indicamos el tipo de proyectiles usados (H), así como la energía de incidencia de los mismos en keV, después de esto era necesario recurrir a la configuración de la geometría del experimento, anotando los ángulos de incidencia, salida y dispersión que fueron usados; respetando la resolución del

detector como 30 keV y dejando momentáneamente el *OFFSET* de calibración como 0, pasamos a la siguiente sección de ajustes.

Ya que se han registrado las condiciones del experimento debe de pasarse a la determinación del blanco. Ya que suponíamos desde un inicio que se trataba de un material altamente puro y delgado, definimos en un inicio sólo dos capas dentro de él, la primera conteniendo sólo GdF_3 cuya composición por estequiometría fue supuesta como un 75 % de Flúor y un 25 % de Gadolinio, ambos en sus formas isotópicas más comunes; respecto al grosor lo estimamos como 200×10^{15} átomos por centímetro cuadrado, pues será la tarea del posterior ajuste el regular este grosor.

Se definió después una capa muy gruesa (infinita en términos atómicos) de Carbono en su isótopo más común, que corresponde al sustrato de grafito de la muestra. Una vez que todo esto había quedado determinado se cambió a la sección de *REACTIONS* en la cual podríamos indicar qué tipo de reacciones estaban presentes al momento del experimento y así señalar las secciones eficaces correspondientes a ellas para cada elemento; empleamos las secciones RBS 11C (1H, 1H) 11C, 12C (1H, 1H) 12C, 13C (1H, 1H) 13C, 14C (1H, 1H) 14C para el Carbono, la 19F (1H, 1H,) 19F para el Flúor y las 152Gd (1H, 1H) 152Gd, 154Gd (1H, 1H) 154Gd, 155Gd (1H, 1H) 155Gd, 156Gd (1H, 1H) 156Gd, 157Gd (1H, 1H) 157Gd, 158Gd (1H, 1H) 158Gd, 160Gd (1H, 1H) 160Gd para el Gadolinio. [20]

Habiéndose señalado ese último punto presionamos el botón *CALCULATE SPECTRUM*, con lo cual el programa comenzó a calcular el espectro correspondiente a las indicaciones que le hicimos en nuestro trabajo; buscamos que el resultado sea lo más similar posible a nuestro espectro para de ahí deducir el grosor real de la película. En la mayoría de los casos, el espectro obtenido tenía una forma muy cercana a lo deseado pero se encontraba ensanchado y desfasado; para corregir el desfase cambiamos los valores del *OFFSET* hasta que los picos teóricos y experimentales se correspondieran entre sí, esto dentro de la primera ventana que abrimos al iniciar el programa.

Corregir el ancho y la forma de los picos fue nuestra siguiente labor, para ello presionamos en la sección *CALCULATE: FIT SPECTRUM* en donde indicamos la región de nuestro ajuste y el criterio por el cual se realizaría el ajuste (la composición y grosor del blanco en nuestro caso), además de la capa a ajustar, la precisión del ajuste y el número de iteraciones a usar. Variando todos estos parámetros obtuvimos un promedio del grosor estimado para las películas que fue de 380×10^{15} átomos por centímetro cuadrado, que mediante el uso de la densidad del Fluoruro de Gadolinio se notó que corresponde a $1.356 \times 10^2 \mu g/cm^2$.

Consultamos el poder de frenado (dE/dx) para el Fluoruro de Gadolinio para distintas energías de bombardeo mediante el programa TRIM, y con ello hicimos uso de los grosores estimados de las muestras para saber cuál era el promedio de energía perdida por los

protones; notamos que dicho valor ronda en los 21 keV, por lo cual, al compararlo con la energía de incidencia, notamos que la pérdida era considerablemente pequeña y podíamos llamar a nuestra película como delgada.

La figura 3.2.2 muestra un ejemplo de los ajustes realizado por medio del programa SIMNRA al los espectros RBS, en este caso para los 650 keV.

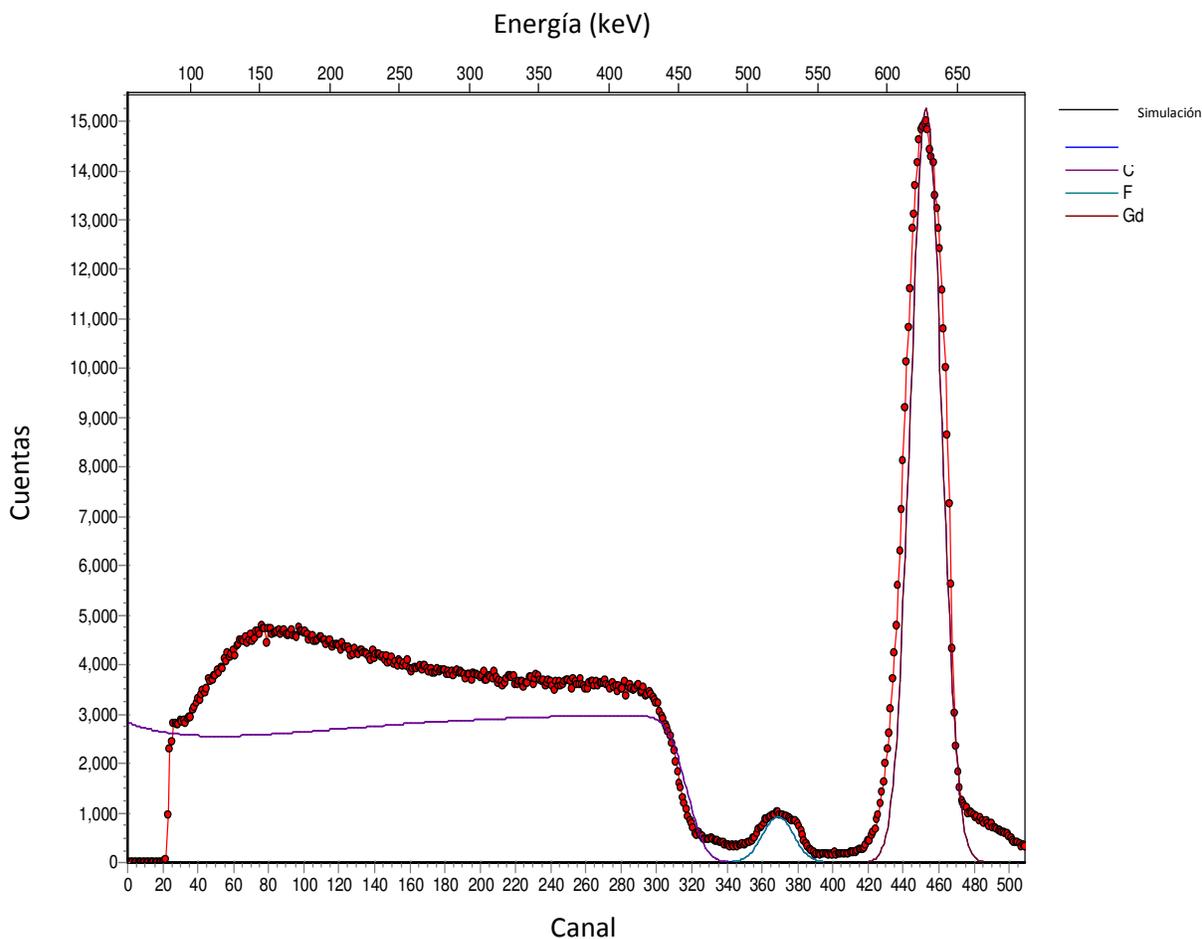


Figura 3.2.2. En la ilustración se muestra un ajuste de los espectros RBS hecho por el programa SIMNRA para la energía de bombardeo de 650 keV, y usado para determinar el grosor promedio de las muestras. Nótese la semejanza entre el espectro real y el simulado, así como las aportaciones de cada elemento al espectro total; se procuró el ajuste sólo en el pico alrededor del canal 450 por ser el producido por los protones retrodispersados.

El resto de los procesos seguidos, como corresponden a un manejo de los datos obtenidos en la labor experimental, los incluiremos en la siguiente sección.

Capítulo 4: *Análisis de Resultados*

Buscamos describir en esta sección todos los detalles del análisis de los espectros obtenidos, así como en la deducción de los resultados derivados de ellos, mediante el uso de programas de computación especializados y diseñados para este tipo de trabajos; entre ellos tenemos al GUPIX que utilizamos para obtener las áreas de los picos de rayos X L para cada una de las tres subcapas existentes (L_1 , L_2 y L_3), WINQXAS que fue empleado para obtener todas las gráficas aquí presentadas, SIMNRA con el cual se pudo estimar el grosor de la película de GdF_3 , obtener el número de partículas retrodispersadas en la calibración del detector, así como poder definir algunos parámetros requeridos por GUPIX.

4.1 Descripción del Análisis Matemático de los Resultados

El programa EXCEL fue usado para realizar todos los cálculos matemáticos y ordenar los datos obtenidos por los otros tres programas, finalmente, se empleó al programa ORIGIN para desarrollar las gráficas resultantes de nuestra labor experimental.

Continuando con lo establecido en el capítulo anterior, una vez que se conoció el grosor de nuestra película se tuvo todos los parámetros necesarios para que el programa GUPIX [21], [22], [23], [24] hiciera un estimado de las áreas de los picos de los rayos X L presentes en nuestro espectro PIXE; esto se hace mediante el siguiente procedimiento:

Nuestra labor con este programa comenzó ejecutando el comando *CONTROL + N* lo que nos dio la oportunidad de leer alguno de los espectros de rayos X obtenidos durante el experimento; una vez seleccionado el deseado el programa lo graficó inmediatamente permitiéndonos elegir en su opción *CHANNEL RANGE* el rango de canales en el cual trabajaríamos, limitándonos a los 300 primeros canales para este tipo de espectro.

El siguiente paso consistió en definir en la sección *SETUP* el tipo de elementos que se buscarían, ya fueran como elementos traza de una matriz conocida, o como elementos de una matriz iterativa, siendo esta última opción la elegida. Después en la subsección del mismo nombre que la sección principal, ingresamos los valores de los parámetros de cada uno de los experimentos, como lo fueron los ángulos de los rayos X y de incidencia del haz con respecto a la normal del material, la energía de incidencia así como el tipo de proyectiles, y la carga total integrada respecto al ángulo sólido observado por el detector que llega a este.

Como ya lo definimos correctamente con el programa anterior, en la sección *SAMPLE: SAMPLE STRUCTURE* tomamos a nuestra muestra como delgada, y en la sección *SAMPLE: MATRIX ELEMENT SOLUTION: DEFINE FIT ELEMENTS* colocamos al Gadolinio como nuestro elemento de trabajo, pidiéndole al programa que divida la línea L

en las 3 subcomponentes L_1 , L_2 , y L_3 ; después se nos pide que definamos los elementos invisibles presentes.

Ya que para un análisis PIXE, la eficiencia del detector Silicio Litio resulta ser muy baja en el caso de las energías características de los fotones producidos por el Flúor (como puede comprobarse de una tabla de energías de rayos X característicos para cada elemento y de la curva de eficiencia que presentaremos más adelante), supusimos que los picos en nuestro espectro PIXE son debidos al Gadolinio únicamente; lo anterior fue comprobado ya que al calibrar respecto a dos picos, el resto de las líneas pertenecientes al Gadolinio se ajustaban adecuadamente. Es por esta razón que definimos al Flúor como elemento invisible, con una valencia igual a -1 y presente en una sola capa.

En la sección *FIT: SPECTRUM DETAILS* se nos pide que indiquemos los parámetros de calibración y ajuste de nuestro espectro incluyendo la región de ajuste, el tipo de filtro, el número de apilamientos de picos y los cinco parámetros de calibración que deben de definirse mediante la selección de dos picos bien definidos cuyas energías son conocidas.

Nuestras elecciones fueron el pico más intenso $L_{\alpha 1}$, y el pico $L_{\beta 1}$ del Gd, cuyas energías fueron consultadas en tablas y corresponden a 6.05737 keV y 6.71320 keV respectivamente; esto determina tres de los cinco parámetros de calibración, los otros dos restantes se obtienen mediante un par de ecuaciones simples especificadas dentro del manual del programa, y que son funciones de los otros tres parámetros.

Una vez que todos los datos fueron determinados, ordenamos al programa comenzar el ajuste en la opción *RUN* esto nos da algunos picos separados del espectro, correspondientes a las líneas $L_{\alpha 1}$, $L_{\beta 1}$, $L_{\beta 2}$, $L_{\gamma 1}$, $L_{\gamma 3}$ y L_I del Gadolinio; también se mostraron los residuos del espectro sin el ajuste realizado para determinar a estas líneas sin embargo, el resultado principal que buscábamos es el área total de todas las líneas que llegan a las subcapas L_1 , L_2 , y L_3 , para cada una de las energías de bombardeo. El significado de estos valores así como su comportamiento respecto a la energía de incidencia y a su proporción con respecto a la intensidad de la línea L (la suma de las tres) será mencionada un poco más adelante, de momento incluiremos la tabla de energías de los rayos X del Gadolinio, pues fue empleada en el desarrollo de la siguiente sección.

Este mismo procedimiento se siguió para la segunda ronda de datos tomados, hecha con el fin de mostrar que nuestros datos son reproducibles, también se buscó encontrar una mejor descripción a energías pequeñas en donde la estadística obtenida originalmente fue muy baja.

Ya que explicamos el procedimiento para la determinación de las áreas de los picos correspondientes a las transiciones a las tres subcapas de la capa L, requerimos mencionar

el cómo obtuvimos las áreas de las otras transiciones distinguibles dentro de nuestros espectros PIXE mediante el uso de los programas WINQXAS y ORIGIN [25].

Para cada una de las energías de bombardeo se ubicaron los máximos de los picos visibles en el espectro y se les asoció con una transición específica, y por ello, con una energía dada; esto nos permitió reconocer las transiciones presentes en el espectro, pero para saber si nuestra deducción era correcta, graficamos la energía de los picos contra el número de canal, si todo era correcto deberíamos obtener una recta; la curva obtenida para los 750 keV, así como la tabla de valores que la generó (consúltese en [17]), se presentan en la Figura 4.1.1 y en la Tabla 4.1.1

Línea	Transición	E (eV)	I (eV/ \hbar)
Serie L			
$L_{\gamma 3}$	L_1N_3	8105.20 ± 1.6	0.0432
$L_{\beta 1}$	L_2M_4	6713.4 ± 1.6	0.153
	L_2M_5	6743.40 ± 0.74	0.0000105
$L_{\gamma 1}$	L_2N_4	7785.9 ± 1.4	0.0970
	L_2N_5	7788.91 ± 0.63	
L_1	L_3M_1	5362.09 ± 0.69	0.0208
$L_{\alpha 1}$	L_3M_5	6057.37 ± 0.88	0.451
$L_{\beta 2}$	L_3N_5	7103.10 ± 0.55	0.0766
Características de los Niveles			
Nivel	E_B (eV)	ω_{nlj}	Γ (eV)
L_1	8375.60 ± 0.50	0.00790	5.05
		0.00765	4.60
		0.00830	3.80
L_2	$7.930.30 \pm 0.40$	0.158	4.72
		0.174	3.71
		0.175	3.87
L_3	7242.80 ± 0.40	0.155	4.01
		0.164	3.55
		0.167	3.72

Tabla 4.1.1 En la tabla se indican las energías de los rayos X característicos del Gadolinio para la capa L, así como las características de cada nivel, incluyéndose las tres subcapas pertenecientes a la línea L que forman nuestro interés central. En la primera parte superior se indica el nombre de la línea así como la transición de la que proviene, la energía de los fotones de cada línea y la intensidad de los picos, Γ es el ancho de la línea. En la segunda parte de la tabla E_B indica la energía de amarre de los electrones y la segunda columna la fluorescencia de cada capa.

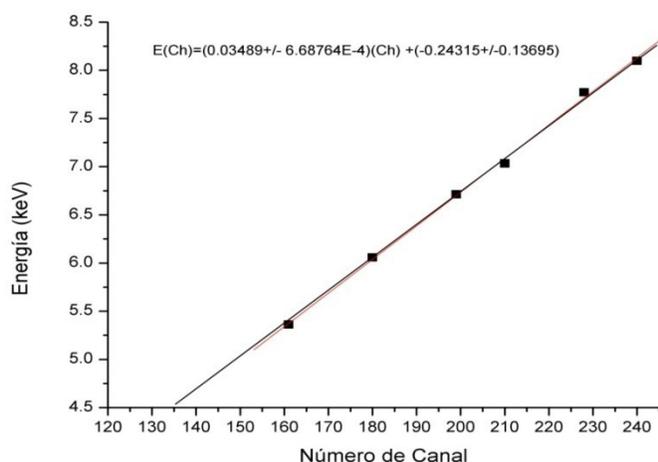


Figura 4.1.1 En la ilustración se observa el ajuste realizado al espectro PIXE de 750 keV, su cercanía con una recta nos indica una correcta suposición de los picos presentes en el espectro, dicha cercanía se determinó realizando un ajuste por mínimos cuadrados (también incluido) y observando que el factor R del mismo es 0.999.

Línea Identificada	Número de Canal	Energía (keV)
L_l	161	5.362
$L_{\alpha 1}$	180	6.058
$L_{\beta 1}$	199	6.713
$L_{\beta 2}$	210	7.034
$L_{\gamma 1}$	228	7.772
$L_{\gamma 3}$	240	8.102

Tabla 4.1.2. En la tabla se muestran las líneas identificadas en los espectros PIXE, ejemplificadas para los 750 keV de energía de bombardeo de la primera ronda de experimentos; estos datos fueron los utilizados para hacer a la Figura 4.1.1

Una vez que comprobamos que la ubicación de los picos L era consistente, realizamos lo mismo para cada espectro, pues esto nos daría la posibilidad de ajustar dicha curva por mínimos cuadrados y así obtener los parámetros de calibración del detector en cada caso, es decir, la *Ganancia* y el llamado *Offset*, valores necesarios para la labor que seguimos a continuación.

Buscamos ahora conocer las áreas de los picos presentes en cada espectro, para ello recurrimos a un programa que analizara el fondo de cada uno y que fuera capaz de modelarlo de manera que tomara en cuenta a todos los fenómenos descritos en los capítulos

anteriores. WINQXAS fue nuestra elección por estas razones y el procedimiento que seguimos dentro del programa comenzó abriendo la pestaña *FILE* y seleccionando en ella la opción *IMPORT IAEA SPECTRA*, en donde seleccionamos a algún espectro *PIXE* con el que deseáramos trabajar.

Una vez que hicimos eso el programa abre al espectro y lo grafica, lo que nos permite observar los lugares en donde aparecen los picos identificados anteriormente; en la pestaña *MODEL* seleccionamos la opción *EDIT MODEL* dentro de la cual se determinarán los parámetros correspondientes al experimento y al detector.

Dentro de la ventana abierta comenzamos con la pestaña *BACKGROUND PARAMETERS* en donde debemos de determinar el tipo de modelo matemático para el fondo del espectro, seleccionamos la forma exponencial con un orden para el polinomio lineal de 2 y para el exponencial de 3, también se le pidió que inicializara los parámetros automáticamente; es importante que estos parámetros permanezcan iguales para el resto de los espectros, para poder asegurar que todos fueron analizados con el mismo procedimiento y aproximaciones.

En la pestaña *CALIBRATION PARAMETERS*, seguimos las instrucciones en pantalla e ingresamos los valores obtenidos con el programa *ORIGIN* para conseguir la relación entre número de canal y energía. En la pestaña *DETECTOR CHARACTERISTICS* seleccionamos el tipo de detector como de Silicio, la ventana de Berilio, la capa de contacto de Oro; las dimensiones del detector fueron de 0.03 μm de capa muerta, 3 mm de profundidad activa, 0.02 μm para la capa de contacto, 25 μm de la ventana y un tiempo de resolución de apilamiento de picos de 2 μs , todos estos datos obtenidos del manual del detector empleado.

En la pestaña *EXPERIMENTAL CONDITIONS* se determinó el tipo de experimento realizado, así como las condiciones de excitación siendo la energía primaria de 16.5 keV, el ángulo de incidencia de 45 grados igual al de recolección. El medio en el que viajaron los protones se determinó como vacío y la longitud del camino se midió como 3.5 cm.

Finalmente, en la pestaña *SAMPLE ABSORPTION*, se inscribió el grosor de la muestra usada, así como la presencia de cada elemento dentro de ella. Una vez que se definió el modelo del experimento cerramos la ventana y seleccionamos el botón *ROI* para determinar la región de interés de nuestro ajuste a realizar, la cual incluyó los picos observados; después de ello se seleccionó la pestaña *SPECTRA* y la opción *MARK X – LINES FOR FIT* lo cual abre una ventana en donde se agregan las líneas que correspondan a las energías de los picos observados.

Una vez que esto se realizó y se han ubicado a todos los picos resolubles, presionamos el botón *DO FIT* para que el programa calcule las áreas de los picos presentes; después de ello se presiona el botón *RESIDUALS* que nos indica si existe la presencia de líneas espectrales que superen nuestra tolerancia (es decir, líneas que formen parte de algún pico y que no hayamos tomado en cuenta), incluyendo a estas últimas volvemos a realizar el ajuste y

presionamos el botón FULL REPORT que presenta las áreas de los picos definidos (cuando aparecía algún área negativa era indicio de que tal línea no pertenecía al pico y la removíamos del cálculo)

Esta tabla reporta los datos que buscamos, por lo cual fueron ingresados a una hoja de EXCEL y guardamos el archivo para futuras referencias. El mismo procedimiento fue repetido para todos los espectros PIXE de ambas rondas con lo que se generaron las Tablas 4.3.1 y 4.3.2

4.2 Cálculo de la Eficiencia del Detector

También deseamos determinar la eficiencia de nuestro detector como función de la energía con el fin de conocer la respuesta de nuestro instrumento en el rango de energías que trabajamos; para esto empleamos la ecuación descrita en el capítulo anterior:

$$\varepsilon(E) = \frac{N_X \sigma_R(E_0) \Omega_R F_R}{N_R \omega_K \sigma_K(E_0) F_X} \quad (4.2.1)$$

En donde N_R el número de protones dispersados que son detectados por el detector de barrera de superficie, mientras que N_X es el número de fotones que llegan al detector y Ω_R su ángulo sólido; $\sigma_K(E_0)$ y $\sigma_R(E_0)$ son las secciones transversales de ionización para la capa K y la de la retrodispersión de Rutherford; ω_K es la producción de fluorescencia de la capa K . Los términos F son correcciones debidas a la dependencia con la energía de las secciones transversales; ya que estos últimos factores dependen del grosor del material podemos ignorarlos en nuestro análisis.

Para poder determinar todas las variables de (4.2.1) se realizaron estudios PIXE y RBS a un conjunto de muestras de grosor conocido certificadas por *Micromater* de Seleniuro de Cadmio CdSe ($45.2 \mu\text{g}/\text{cm}^2$), Sulfuro de Cobre II CuS ($55.4 \mu\text{g}/\text{cm}^2$), Vanadio V ($48.2 \mu\text{g}/\text{cm}^2$), Germanio Ge ($45.8 \mu\text{g}/\text{cm}^2$), Fluoruro de Calcio CaF₂ ($49.0 \mu\text{g}/\text{cm}^2$), Cromo Cr ($44.0 \mu\text{g}/\text{cm}^2$) y Cobalto Co ($46.4 \mu\text{g}/\text{cm}^2$), (todas bombardeadas con protones de 600 keV y depositadas en una película de Mylar) los cuales fueron analizados con los programas GUPIX y SIMNRA de manera similar a la muestras de Fluoruro de Gadolinio. Las áreas obtenidas con esta labor nos permitieron obtener valores para el número de protones dispersados y el número de fotones recibidos.

Para obtener las secciones eficaces de ionización de cada elemento así como las fluorescencias asociadas, introdujimos los datos requeridos en el programa *ISICS* [26] el cual calcula mediante la aproximación ECPSSR los valores de dichas variables. Para el caso de la sección de Rutherford empleamos a la siguiente ecuación [27]:

$$\sigma_R(\theta, E_0) = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_0} \right)^2 \left(\frac{4}{\sin^4 \theta} \right) \frac{\left(\sqrt{1 - \left(\frac{M_1}{M_2} \sin \theta \right)^2} + \cos \theta \right)^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{M_1}{M_2} \sin \theta \right)^2}} \quad (4.2.2)$$

Aquí θ representa el ángulo de detección de los fotones dispersados, Z_1 y M_1 son el número atómico y la masa de los protones, mientras que los que tienen subíndice 2 corresponden a las mismas variables para cada uno de los elementos colisionados; E_0 es la energía de bombardeo (600 keV). Por otra parte, el ángulo sólido del detector fue medido dando el valor de 66.000 msr +/- 8.124 msr.

Con este conjunto de datos se obtuvieron valores para la eficiencia en función de la energía de los fotones de cada elemento como se presenta en la siguiente tabla:

Energía del fotón de Rayos X-K recibido (keV)	Elemento	Datos para la obtención de la eficiencia					
		Número de Protones detectados N_R	Número de fotones de Rayos X-K detectados N_K	Fluorescencia de la capa K ω_K	Sección Transversal de Ionización de la capa K $\sigma_K(E_0)$ (b)	Sección Transversal de Retrodispersión de Rutherford $\sigma_R(E_0)$ (b)	Eficiencia $\varepsilon(E)$
2.308	S	684340 ± 828	31330 ± 207	0.078 ± 0.016	110.050 ± 22.010	148.697 ± 29.739	0.00523 ± 0.000806
3.691	Ca	551640 ± 745	11051 ± 177	0.163 ± 0.033	26.661 ± 5.332	232.441 ± 46.488	0.00707 ± 0.00109
4.952	V	364170 ± 603	3255 ± 67	0.243 ± 0.049	9.466 ± 1.893	307.493 ± 61.499	0.00789 ± 0.00122
5.415	Cr	912290 ± 955	6755 ± 109	0.275 ± 0.055	6.842 ± 1.368	334.819 ± 66.964	0.00870 ± 0.00137
6.930	Co	1088810 ± 1043	3437 ± 232	0.381 ± 0.076	2.617 ± 0.523	423.799 ± 84.760	0.00886 ± 0.00137
8.048	Cu	1309180 ± 1144	2594 ± 55	0.446 ± 0.90	1.408 ± 0.282	488.933 ± 97.787	0.0102 ± 0.00157
9.887	Ge	2588240 ± 1609	1906 ± 661	0.535 ± 0.107	0.557 ± 0.112	595.367 ± 119.073	0.00970 ± 0.00150

Tabla 4.2.1 En la tabla se indican los datos requeridos por la ecuación (4.2.1) para calcular el valor de la eficiencia como función de la energía de los rayos X – K producidos por cada uno de los elementos del blanco.

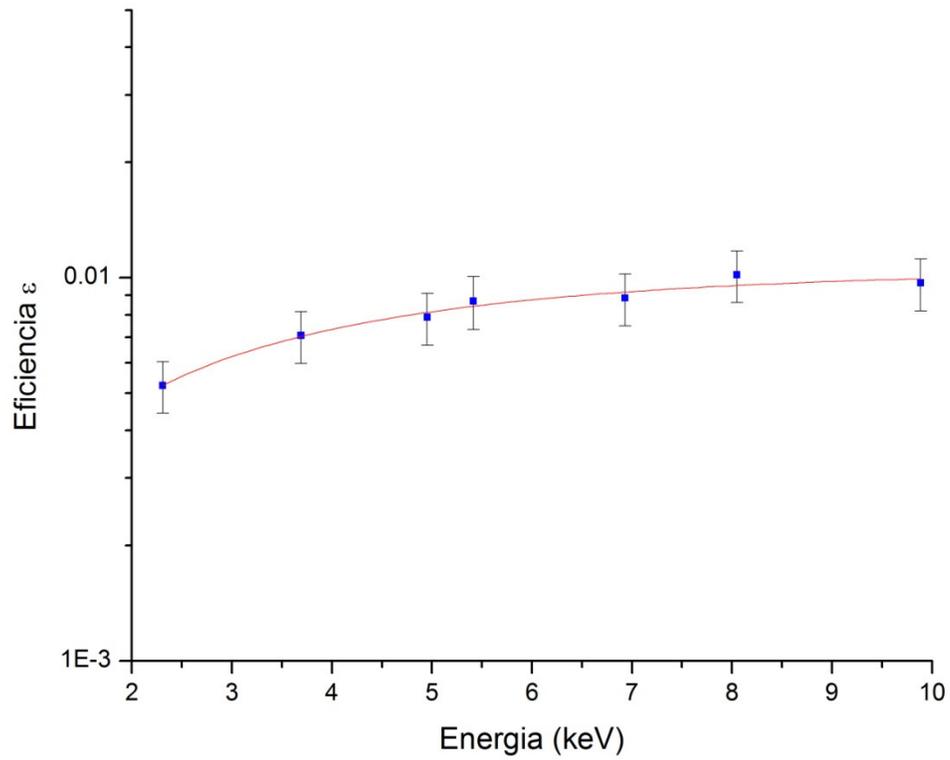


Figura 4.2.1 En la figura se muestra la gráfica semi – logarítmica de la eficiencia del detector de Silicio – Litio como función de la energía.

4.3 Determinación de las Áreas de los Picos Identificados

En esta subsección comenzamos a mostrar los datos que se obtuvieron para las intensidades de las líneas ubicadas en nuestros espectros mediante los procedimientos descritos anteriormente; se observan también las fracciones calculadas en base a estos datos y las gráficas que de ellas emanaron.

Energía de Bombardeo (keV)	Área de los picos resueltos en la primera ronda de experimentos					
	L_l	$L_{\alpha 1}$	$L_{\beta 1}$	$L_{\beta 2}$	$L_{\gamma 1}$	$L_{\gamma 3}$
750	873 ± 36	13828 ± 2782	5306 ± 194	2443 ± 455	968 ± 75	165 ± 17
700	1397 ± 103	18544 ± 465	6860 ± 213	3275 ± 214	1095 ± 38	188 ± 21
650	1176 ± 40	18096 ± 170	6763 ± 89	3296 ± 64	1089 ± 38	263 ± 23
550	1253 ± 40	15812 ± 129	6367 ± 290	2859 ± 59	945 ± 36	232 ± 22
500	1308 ± 40	15553 ± 127	6169 ± 226	2736 ± 207	921 ± 68	227 ± 25
450	1241 ± 40	14295 ± 144	5754 ± 82	2573 ± 156	811 ± 34	292 ± 20
400	1399 ± 43	15733 ± 125	7032 ± 183	2864 ± 60	928 ± 58	426 ± 26
350	1369 ± 78	14186 ± 106	6783 ± 157	2640 ± 58	758 ± 77	430 ± 27
300	538 ± 28	5417 ± 74	2709 ± 54	955 ± 35	292 ± 21	246 ± 20

Tabla 4.3.1 En la tabla se muestran las áreas de los picos resueltos en los espectros PIXE para todas las energías de bombardeo de la primera ronda de cálculos junto con sus incertidumbres asociadas.

Energía de Bombardeo (keV)	Área de los picos resueltos en la segunda ronda de experimentos					
	L_l	$L_{\alpha 1}$	$L_{\beta 1}$	$L_{\beta 2}$	$L_{\gamma 1}$	$L_{\gamma 3}$
700	973 ± 37	14100 ± 123	5367 ± 78	2585 ± 56	853 ± 35	113 ± 19
600	984 ± 36	13911 ± 146	5431 ± 135	2299 ± 57	865 ± 34	227 ± 20
500	1519 ± 44	18595 ± 145	7260 ± 96	3242 ± 69	1110 ± 40	343 ± 28
400	1163 ± 41	13760 ± 122	5995 ± 94	2457 ± 62	774 ± 35	355 ± 25
300	424 ± 25	4242 ± 68	2211 ± 91	747 ± 36	199 ± 22	199 ± 19
250	78 ± 12	777 ± 29	379 ± 21	130 ± 13	39 ± 8	22 ± 8

Tabla 4.3.2 En la tabla se muestran las áreas de los picos resueltos en los espectros PIXE para todas las energías de bombardeo en el caso del segundo conjunto de experimentos.

El área de cada uno de los picos, implica en cierta medida la probabilidad de que se emita un fotón de rayos X correspondiente a esa línea espectral, para poder obtener la intensidad relativa de cada línea, debe dividirse el área de estos picos entre el área de toda la línea L , es decir, la suma de las áreas de las tres subcapas, que calculamos mediante el GUPIX,

para que de esta manera podamos ver cómo varía la probabilidad de emisión de cada línea con respecto a la energía de bombardeo (como ya definimos que es una película delgada, no consideramos la energía instantánea del protón incidente pues suponemos que esta no varía considerablemente)

Las Tablas 4.3.3 y 4.3.4 muestran las áreas correspondientes a las líneas L_1 , L_2 y L_3 , para cada energía de bombardeo, estos datos son necesarios para calcular la probabilidad de emisión de cada línea como una función de la división entre el área de ese pico y la suma de las tres líneas de esta tabla.

Energía de Bombardeo (keV)	Suma de las áreas de las líneas correspondientes a cada subcapa L para la primera ronda de experimentos		
	L_1	L_2	L_3
750	356.1 ± 18.9	4727.9 ± 68.8	12150.5 ± 110.2
700	476.3 ± 21.8	5853.1 ± 76.5	16168.4 ± 127.2
650	602.1 ± 24.5	5825.5 ± 76.3	15865.4 ± 126.0
600	602.0 ± 24.5	5825.1 ± 76.3	15865.6 ± 126.0
550	470.7 ± 21.7	5309.0 ± 72.9	13840.0 ± 117.6
500	725.2 ± 26.9	4818.7 ± 69.4	13588.5 ± 116.6
450	736.6 ± 27.1	4502.7 ± 67.1	12532.6 ± 111.9
400	1247.4 ± 35.3	4805.8 ± 69.3	13850.4 ± 117.7
350	1289.1 ± 35.9	4345.8 ± 65.9	12157.3 ± 110.3
300	704.1 ± 26.5	1526.0 ± 39.1	4525.8 ± 67.3

Tabla 4.3.3. En la tabla se muestran las áreas de las líneas L_1 , L_2 y L_3 en los espectros PIXE para todas las energías de bombardeo para el primer conjunto de experimentos.

Energía de Bombardeo (keV)	Suma de las áreas de las líneas correspondientes a cada subcapa L para la segunda ronda de experimentos		
	L_1	L_2	L_3
250	116.9 ± 10.8	176.0 ± 13.3	634.0 ± 25.2
300	407.8 ± 20.2	1260.6 ± 35.5	3502.5 ± 59.2
400	860.6 ± 29.3	4396.7 ± 66.3	11679.8 ± 108.1
500	908.9 ± 30.1	5713.6 ± 75.6	16071.1 ± 126.8
600	446.2 ± 21.1	4325.0 ± 65.8	12061.4 ± 109.8
700	265.7 ± 16.3	4571.3 ± 67.6	12222.3 ± 110.6

Tabla 4.3.4 En la tabla se muestran las áreas de las líneas L_1 , L_2 y L_3 en los espectros PIXE para todas las energías de bombardeo para el segundo conjunto de experimentos realizados.

Se calcularon las proporciones entre las áreas de los picos individuales y la de toda la línea de emisión L para estimar las probabilidades de emisión relativas como función de la energía de bombardeo y así poder estimar la forma en la que varía la intensidad relativa de emisión de rayos X. En las Tablas 4.3.5 y 4.3.6 se muestran los valores de las fracciones junto con sus incertidumbres, graficadas en las Figuras posteriores.

Energía de Bombardeo (keV)	Fracciones entre las áreas de cada línea resuelta y el área total de la línea L					
	$\frac{L_l}{L}$	$\frac{L_{\alpha 1}}{L}$	$\frac{L_{\beta 1}}{L}$	$\frac{L_{\beta 2}}{L}$	$\frac{L_{\gamma 1}}{L}$	$\frac{L_{\gamma 3}}{L}$
750	0.0507 ± 0.00212	0.802 ± 0.0225	0.308 ± 0.0115	0.142 ± 0.00367	0.0562 ± 0.00437	0.00957 ± 0.00099
700	0.0621 ± 0.00460	0.824 ± 0.0214	0.305 ± 0.00968	0.146 ± 0.00356	0.0487 ± 0.00172	0.00836 ± 0.000940
650	0.0528 ± 0.00183	0.812 ± 0.00937	0.303 ± 0.00448	0.148 ± 0.00304	0.0489 ± 0.00174	0.0118 ± 0.00103
550	0.0639 ± 0.00209	0.806 ± 0.00874	0.325 ± 0.0150	0.146 ± 0.00318	0.0482 ± 0.00187	0.0118 ± 0.00112
500	0.0684 ± 0.00215	0.813 ± 0.00666	0.322 ± 0.0120	0.143 ± 0.0109	0.0481 ± 0.00357	0.0119 ± 0.00131
450	0.0698 ± 0.00231	0.804 ± 0.0101	0.324 ± 0.00521	0.145 ± 0.00886	0.0456 ± 0.00195	0.0164 ± 0.00113
400	0.0703 ± 0.00222	0.790 ± 0.00864	0.353 ± 0.00953	0.144 ± 0.00318	0.0466 ± 0.00294	0.0214 ± 0.00132
350	0.0769 ± 0.00442	0.797 ± 0.00835	0.381 ± 0.00928	0.148 ± 0.00341	0.0426 ± 0.00434	0.0242 ± 0.00153
300	0.0796 ± 0.00426	0.801 ± 0.0143	0.401 ± 0.00927	0.141 ± 0.00546	0.0432 ± 0.00315	0.0364 ± 0.00299

Tabla 4.3.5 En la tabla se indican las fracciones de las áreas de las líneas resueltas entre el área total de L para el primer conjunto de experimentos.

Energía de Bombardeo (keV)	Fracciones entre las áreas de cada línea resuelta y el área total de la línea L					
	$\frac{L_l}{L}$	$\frac{L_{\alpha 1}}{L}$	$\frac{L_{\beta 1}}{L}$	$\frac{L_{\beta 2}}{L}$	$\frac{L_{\gamma 1}}{L}$	$\frac{L_{\gamma 3}}{L}$
700	0.0570 ± 0.00226	0.827 ± 0.0116	0.315 ± 0.00573	0.152 ± 0.00368	0.0500 ± 0.00212	0.00662 ± 0.00112
600	0.0585 ± 0.00225	0.826 ± 0.0131	0.323 ± 0.00888	0.137 ± 0.00375	0.0514 ± 0.00211	0.0135 ± 0.00120
500	0.0669 ± 0.00205	0.819 ± 0.0103	0.320 ± 0.00527	0.143 ± 0.00335	0.0489 ± 0.00183	0.0151 ± 0.00124
400	0.0687 ± 0.00257	0.812 ± 0.0118	0.354 ± 0.00689	0.145 ± 0.00403	0.0457 ± 0.00213	0.0210 ± 0.00150
300	0.0820 ± 0.00521	0.820 ± 0.0253	0.428 ± 0.0240	0.144 ± 0.00797	0.0385 ± 0.00443	0.0385 ± 0.00401
250	0.0842 ± 0.00412	0.838 ± 0.0218	0.409 ± 0.0198	0.140 ± 0.00760	0.0421 ± 0.00433	0.0457 ± 0.00376

Tabla 4.3.6. En la tabla se indican las fracciones de las áreas de las líneas resueltas entre el área total de L para el segundo conjunto de experimentos.

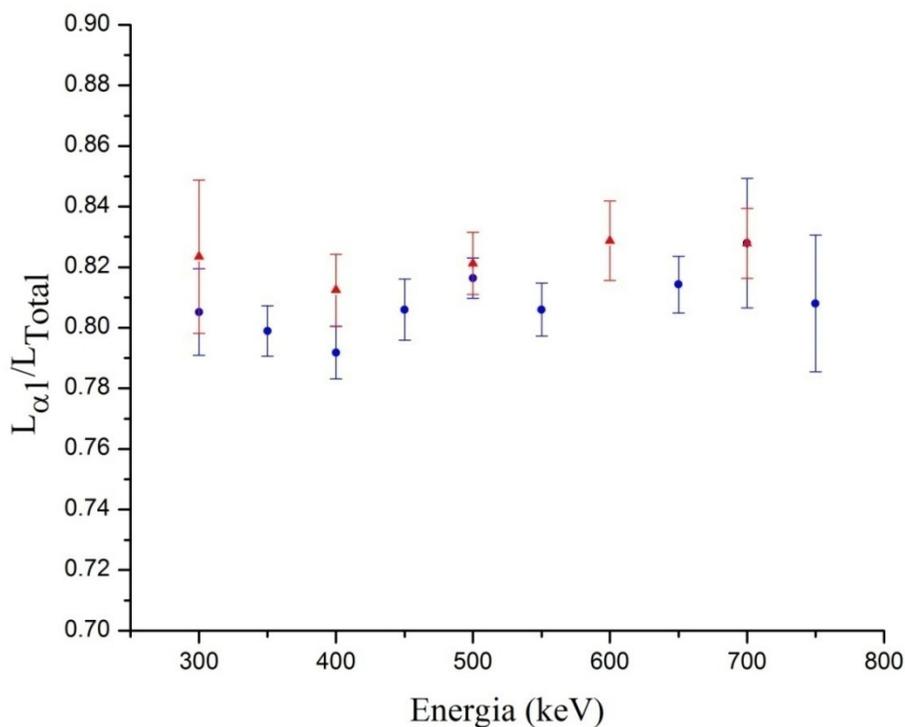


Figura 4.3.1 En la figura se muestran las gráficas de la fracción $\frac{L_{\alpha 1}}{L_{Total}}$ como función de la energía de bombardeo para ambas rondas de experimentos, junto con sus incertidumbres asociadas. Los triángulos corresponden a la segunda ronda, mientras que los círculos corresponden a la primera.

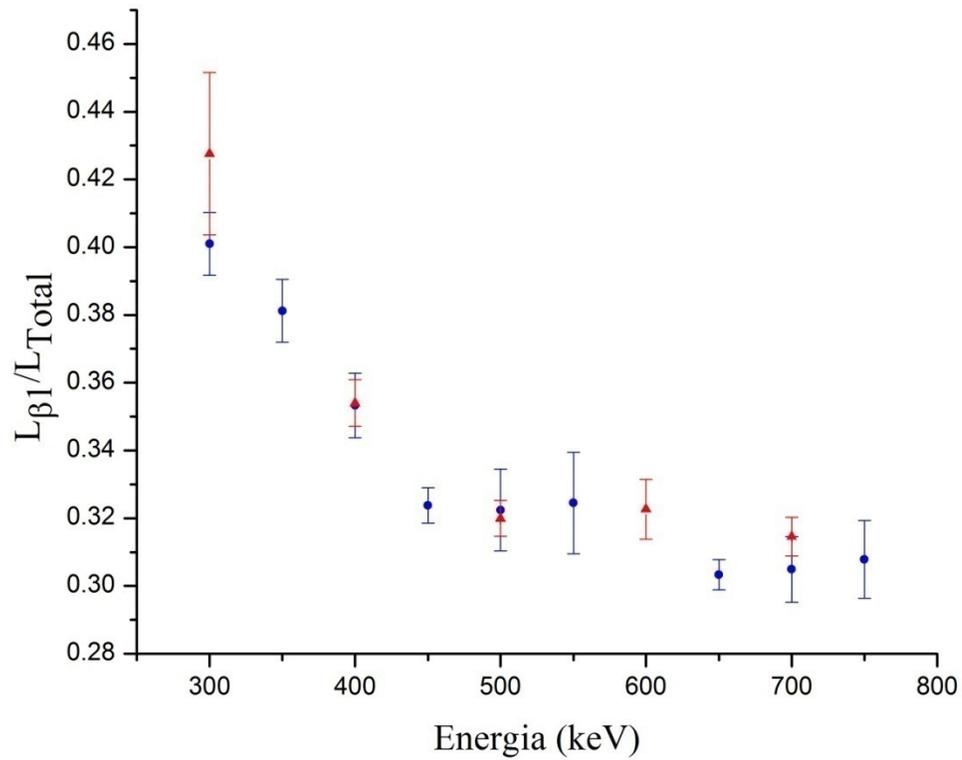


Figura 4.3.2 En la figura se muestran las gráficas de la fracción $\frac{L_{\beta 1}}{L_{Total}}$ como función de la energía de bombardeo para ambas rondas de experimentos, junto con sus incertidumbres asociadas. Los triángulos corresponden a la segunda ronda, mientras que los círculos corresponden a la primera.

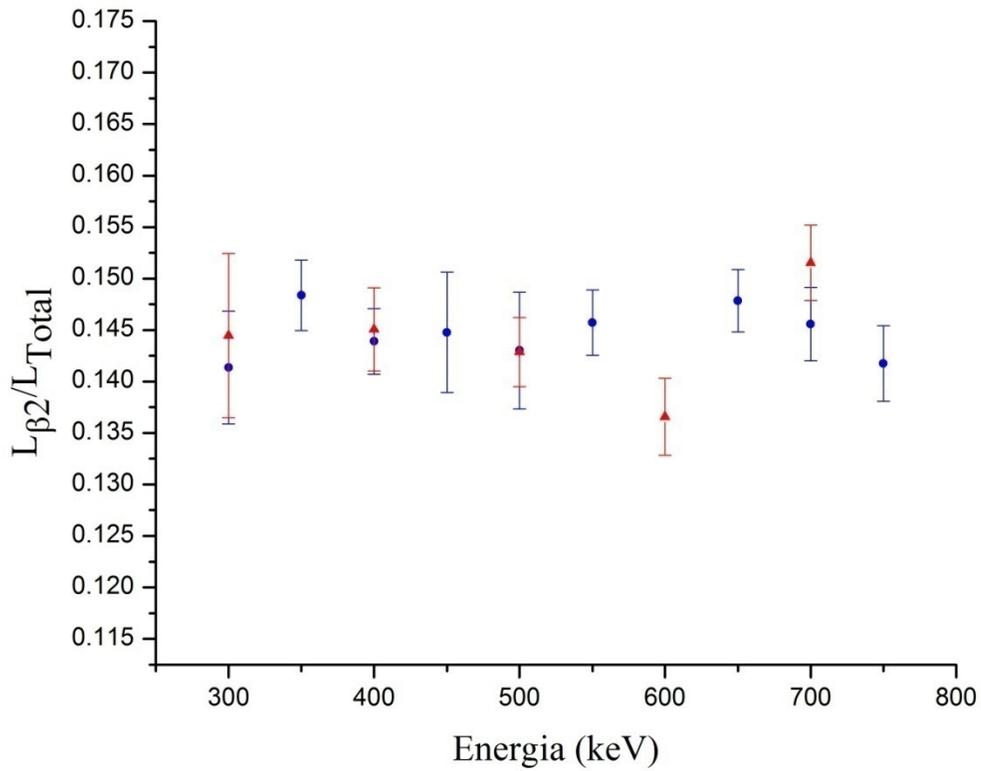


Figura 4.3.3 En la figura se muestran las gráficas de la fracción $\frac{L_{\beta 2}}{L_{Total}}$ como función de la energía de bombardeo para ambas rondas de experimentos, junto con sus incertidumbres asociadas. Los triángulos corresponden a la segunda ronda, mientras que los círculos corresponden a la primera.

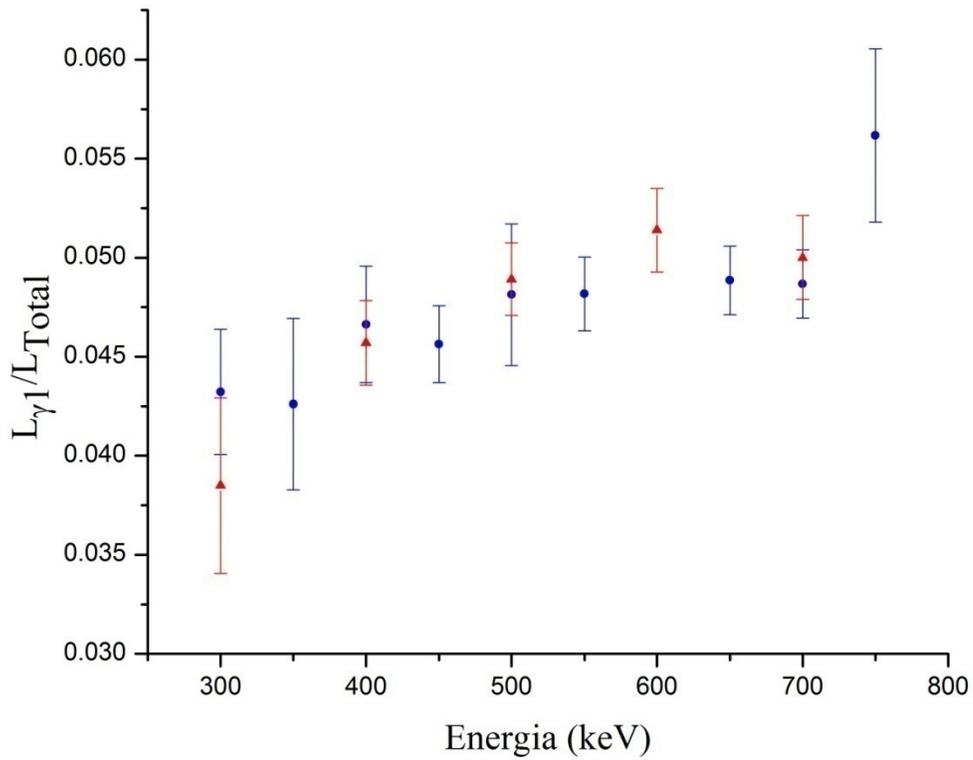


Figura 4.3.4 En la figura se muestran las gráficas de la fracción $\frac{L_{\gamma 1}}{L_{Total}}$ como función de la energía de bombardeo para ambas rondas de experimentos, junto con sus incertidumbres asociadas. Los triángulos corresponden a la segunda ronda, mientras que los círculos corresponden a la primera

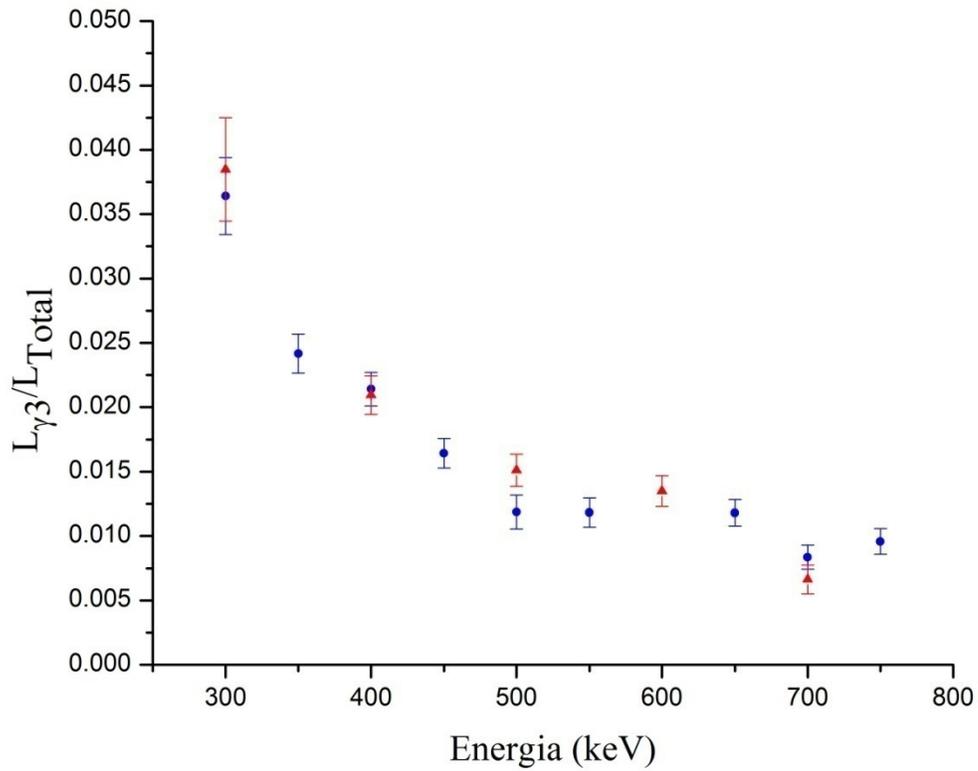


Figura 4.3.5 En la figura se muestran las gráficas de la fracción $\frac{L_{\gamma 3}}{L_{Total}}$ como función de la energía de bombardeo para ambas rondas de experimentos, junto con sus incertidumbres asociadas. Los triángulos corresponden a la segunda ronda, mientras que los círculos corresponden a la primera.

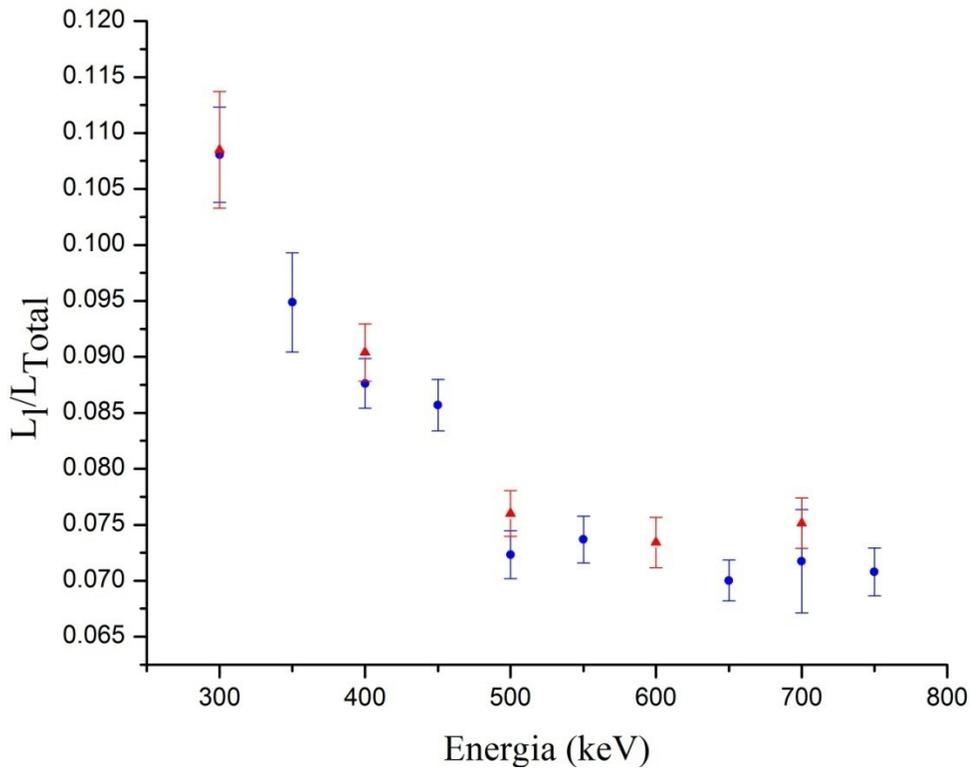


Figura 4.3.6 En la figura se muestran las gráficas de la fracción $\frac{L_l}{L_{Total}}$ como función de la energía de bombardeo para ambas rondas de experimentos, junto con sus incertidumbres asociadas. Los triángulos corresponden a la segunda ronda, mientras que los círculos corresponden a la primera.

De las Figuras 4.3.1 hasta la 4.3.6 se pueden observar los comportamientos de las fracciones respectivas con respecto al incremento en la energía de los protones incidentes, algunas muestran una tendencia creciente, otras decreciente y algunas relativamente constante, esto se asocia a las variaciones en las secciones de producción de rayos X correspondientes a las subcapas hacia las que llegan las transiciones que generan cada línea observada; esto será explicado más adelante una vez que se establezcan las ecuaciones necesarias y se observen las variaciones de cada subcapa L con respecto a la suma de las tres, en función de la energía.

En la Figura 4.3.1 puede notarse que el comportamiento es en promedio constante con respecto a la energía. Esto nos permite determinar que las secciones de producción de rayos X asociadas mantienen la misma proporción a medida de que la energía aumenta, como la línea $L_{\alpha 1}$ corresponde a la transición L_3M_5 , este comportamiento, sumado al de las otras

líneas que provienen de transiciones que llegan a la subcapa L_3 , debe de verse reflejado en el comportamiento de la fracción L_3/L_{Total} que será calculada más adelante.

En la Figura 4.3.2 se nota en el comportamiento que la proporción entre la sección de producción de rayos X asociada a la línea L_{β_1} y la suma de las secciones para cada subcapa L disminuye a medida de que la energía de bombardeo aumenta; ya que esta línea proviene de la transición L_2M_4 , este comportamiento, sumado al de la otra línea que surge de transiciones que llegan a la subcapa L_2 , debe de verse reflejado en el comportamiento de la fracción L_2/L_{Total} que será calculada más adelante.

En la Figura 4.3.3 puede verse que la proporción entre la sección de producción de rayos X asociada a la línea L_{β_2} y la suma de las secciones para cada subcapa L se mantiene relativamente constante a medida de que la energía de bombardeo aumenta; puesto que esta línea corresponde a la transición L_3N_5 , este comportamiento, sumado al de L_{α_1} y al de L_l debe de verse reflejado en el comportamiento de la fracción L_3/L_{Total} que será calculada más adelante, nótese que como las dos líneas que se han mencionado sobre esta subcapa se han mantenido constantes, la forma en que varíe la fracción debe de provenir de L_l .

Dentro de la Figura 4.3.4 se observa que la proporción entre la sección de producción de rayos X asociada a la línea L_{γ_1} y la suma de las secciones para cada subcapa L aumenta a medida de que la energía de bombardeo se incrementa, como esta línea proviene de la transición L_2N_4 , este comportamiento, sumado al de L_{β_1} , debe de contribuir al comportamiento de la fracción L_2/L_{Total} .

De la Figura 4.3.5 es posible notar que el comportamiento de la proporción entre la sección de producción de rayos X asociada a la línea L_{γ_3} y la suma de las secciones para cada subcapa L disminuye a medida de que la energía de bombardeo aumenta. De las líneas identificables en todos los espectros que obtuvimos L_{γ_3} es la única que proviene de una transición que llegue a la subcapa L_l (L_1N_3) por lo que la tendencia observada debe de reflejarse en la de L_l/L_{Total} .

Finalmente, la Figura 4.3.6 muestra que la proporción entre la sección de producción de rayos X asociada a la línea L_l y la suma de las secciones para cada subcapa L disminuye a medida de que la energía de bombardeo aumenta, como esta línea viene de la transición L_3M_1 , la fracción L_3/L_{Total} debe de exhibir el mismo comportamiento decreciente, de no

ser así indicaría que el análisis con el programa *GUPIX* halló más líneas que provienen de esta subcapa de las que pudimos identificar con el programa *WINQXAS*.

Para continuar con el análisis de los espectros y poder observar la manera en que las secciones de producción de rayos X varían respecto de la energía de bombardeo para cada subcapa L , deseamos observar qué porcentaje de la emisión total le toca a cada línea para cada energía.

Calculamos las fracciones pertinentes que, junto con sus incertidumbres, se presentan en las Tablas 4.3.7 y 4.3.8.

Energía de Bombardeo (keV)	Fracciones entre el área de cada subcapa y el área total de la línea L		
	$\frac{L_1}{L}$	$\frac{L_2}{L}$	$\frac{L_3}{L}$
750	0.0207 ± 0.00395	0.274 ± 0.00548	0.705 ± 0.00601
700	0.0212 ± 0.00298	0.260 ± 0.00447	0.719 ± 0.00486
650	0.0270 ± 0.00299	0.261 ± 0.00451	0.712 ± 0.00489
600	0.0270 ± 0.00297	0.261 ± 0.00438	0.712 ± 0.00477
550	0.0240 ± 0.00341	0.271 ± 0.00492	0.705 ± 0.00536
500	0.0379 ± 0.00358	0.252 ± 0.00508	0.710 ± 0.00554
450	0.0415 ± 0.00374	0.253 ± 0.00374	0.705 ± 0.00374
400	0.0627 ± 0.00380	0.241 ± 0.00524	0.696 ± 0.00567
350	0.0725 ± 0.00424	0.244 ± 0.00573	0.683 ± 0.00616
300	0.104 ± 0.00754	0.226 ± 0.0101	0.670 ± 0.0107

Tabla 4.3.7 En la tabla se indican las fracciones de las áreas de subcapas entre el área total de L para la primera ronda de experimentos.

Energía de Bombardeo (keV)	Fracciones entre el área de cada subcapa y el área total de la línea L		
	$\frac{L_1}{L}$	$\frac{L_2}{L}$	$\frac{L_3}{L}$
250	0.126 ± 0.0240	0.190 ± 0.0307	0.684 ± 0.0327
300	0.0789 ± 0.00835	0.244 ± 0.0110	0.677 ± 0.0119
400	0.0508 ± 0.00418	0.260 ± 0.00571	0.690 ± 0.00622
500	0.0401 ± 0.00320	0.252 ± 0.00474	0.708 ± 0.00515
600	0.0265 ± 0.00378	0.257 ± 0.00552	0.717 ± 0.00605
700	0.0156 ± 0.00301	0.268 ± 0.00512	0.716 ± 0.00549

Tabla 4.3.8 En la tabla se indican las fracciones de las áreas de subcapas entre el área total de L para la segunda ronda de experimentos.

También queremos comparar nuestros resultados obtenidos con los descritos por la teoría ya explicada en el capítulo 2, para ello hacemos uso de las ecuaciones (2.2.5), (2.2.6) y

(2.2.7) en donde se corrigen las secciones de producción de rayos X para las subcapas L_1 , L_2 y L_3 mediante los factores de Coster – Kronig:

$$\sigma_{L_1,Z}^{eff} = \sigma_{L_1,Z} \quad (4.3.1)$$

$$\sigma_{L_2,Z}^{eff} = \sigma_{L_2,Z} + f_{12}\sigma_{L_1,Z} \quad (4.3.2)$$

$$\sigma_{L_3,Z}^{eff} = \sigma_{L_3,Z} + f_{23}\sigma_{L_2,Z} + (f_{13} + f_{12}f_{23} + f'_{13})\sigma_{L_1,Z} \quad (4.3.3)$$

Usamos también a la ecuación (2.2.11) que nos describe la intensidad de una línea espectral para las tres subcapas L , como función de la energía de bombardeo y del número atómico del blanco:

$$Y_{L_n}(Z) = \frac{N_{av}\sigma_{L_n,Z}^{eff}(E_0)\omega_{L_n}b_Zt_Z\varepsilon_Z^i\left(\frac{\Omega}{4\pi}\right)}{A_Z \cos \alpha} N_p m_a(Z) \quad (4.3.4)$$

Con las variables definidas para cada una de estas ecuaciones en el capítulo correspondiente. Como deseamos graficar a $\frac{Y_{L_n}}{Y_{L_1}+Y_{L_2}+Y_{L_3}}$ debemos dividir a (4.3.4) entre la suma de (4.3.4) aplicada para cada subcapa, de esta manera, eliminando los términos comunes a las tres subcapas para una energía dada, se obtiene que:

$$\frac{Y_{L_n}}{Y_{L_1}+Y_{L_2}+Y_{L_3}} = \frac{\sigma_{L_n}^{eff} \omega_{L_n}}{\sigma_{L_1}^{eff} \omega_{L_1} + \sigma_{L_2}^{eff} \omega_{L_2} + \sigma_{L_3}^{eff} \omega_{L_3}} \quad (4.3.5)$$

Con el fin de determinar los valores implicados en (4.3.5) investigamos las fluorescencias para el Gadolinio que fueron $\omega_{L_1} = 0.101$, $\omega_{L_2} = 0.175$, $\omega_{L_3} = 0.167$ así como los factores de Coster – Kronig $f_{12} = 0.166$, $f_{13} = 0.287$, $f'_{13} = 0.00096$ y $f_{23} = 0.147$. Para conocer a las secciones de producción de rayos X requeridas, utilizamos el programa *ISICS* que fue mencionado en la sección sobre la eficiencia del detector, éste ofrece las secciones mediante las aproximaciones *PWBA* y *ECPSSR*, estos datos, así como los resultados derivados de ellos se presentan en la Tabla 4.3.9 y 4.3.10 y se representan en las siguientes tres figuras.

Energía de Bombardeo (keV)	Secciones de Producción de Rayos X PWBA (barn)			Secciones de Producción de Rayos X ECPSSR (barn)			Secciones de Producción Efectivas de Rayos X PWBA (barn)		
	σ_{L_1}	σ_{L_2}	σ_{L_3}	σ_{L_1}	σ_{L_2}	σ_{L_3}	$\sigma_{L_1}^{eff}$	$\sigma_{L_2}^{eff}$	$\sigma_{L_3}^{eff}$
200	0.0614	0.0891	0.241	0.0116	0.0166	0.0474	0.0615	0.0993	0.273
225	0.0834	0.136	0.370	0.0205	0.0325	0.0924	0.0834	0.149	0.416
250	0.107	0.195	0.535	0.0321	0.0567	0.160	0.107	0.213	0.598
275	0.133	0.269	0.741	0.0463	0.0908	0.256	0.133	0.291	0.822
300	0.159	0.359	0.990	0.0624	0.136	0.382	0.159	0.386	1.092
325	0.185	0.465	1.282	0.0780	0.194	0.541	0.185	0.496	1.408
350	0.210	0.589	1.619	0.0985	0.265	0.737	0.210	0.624	1.771
375	0.234	0.730	2.002	0.117	0.351	0.971	0.234	0.769	2.182
400	0.257	0.889	2.430	0.136	0.452	1.244	0.257	0.932	2.641
425	0.277	1.066	2.904	0.154	0.568	1.556	0.277	1.112	3.148
450	0.296	1.262	3.423	0.171	0.701	1.910	0.296	1.311	3.701
475	0.312	1.477	3.987	0.187	0.850	2.305	0.312	1.528	4.301
500	0.326	1.709	4.594	0.202	1.0167	2.740	0.326	1.764	4.947
525	0.338	1.961	5.245	0.216	1.199	3.217	0.338	2.017	5.639
550	0.349	2.231	5.937	0.229	1.399	3.734	0.349	2.289	6.374
575	0.358	2.519	6.671	0.241	1.616	4.292	0.358	2.579	7.153
600	0.367	2.826	7.446	0.252	1.851	4.890	0.367	2.887	7.976
625	0.375	3.151	8.260	0.262	2.103	5.527	0.375	3.213	8.840
650	0.382	3.494	9.113	0.272	2.373	6.203	0.382	3.558	9.746
675	0.390	3.855	10.003	0.283	2.660	6.917	0.390	3.920	10.692
700	0.399	4.234	10.931	0.294	2.965	7.670	0.399	4.300	11.678
725	0.409	4.630	11.894	0.306	3.286	8.459	0.409	4.698	12.702
750	0.421	5.044	12.893	0.318	3.625	9.285	0.421	5.114	13.766

Tabla 4.3.9 En la tabla se indican las secciones de producción de rayos X teóricas para ambos tipos de aproximaciones, así como las secciones de producción efectivas teóricas de rayos X para la aproximación PWBA, todos estos datos para distintas energías de bombardeo.

Energía de Bombardeo (keV)	Secciones de Producción Efectivas de Rayos X ECPSSR (barn)			Intensidades Relativas Teóricas PWBA			Intensidades Relativas Teóricas ECPSSR		
	$\sigma_{L_1}^{eff}$	$\sigma_{L_1}^{eff}$	$\sigma_{L_1}^{eff}$	$\frac{L_1}{L}$	$\frac{L_2}{L}$	$\frac{L_3}{L}$	$\frac{L_1}{L}$	$\frac{L_2}{L}$	$\frac{L_3}{L}$
200	0.0116	0.0185	0.0534	0.0896	0.225	0.659	0.0878	0.218	0.669
225	0.0205	0.0359	0.104	0.0810	0.228	0.668	0.0806	0.222	0.674
250	0.0321	0.0621	0.179	0.0734	0.231	0.675	0.0738	0.226	0.679
275	0.0463	0.0985	0.283	0.0665	0.234	0.681	0.0675	0.229	0.684
300	0.0624	0.146	0.421	0.0604	0.236	0.686	0.0616	0.233	0.688
325	0.0780	0.207	0.595	0.0548	0.239	0.690	0.0562	0.236	0.691
350	0.0985	0.282	0.807	0.0498	0.242	0.694	0.0513	0.239	0.695
375	0.117	0.370	1.0589	0.0453	0.244	0.698	0.0467	0.242	0.698
400	0.136	0.474	1.352	0.0412	0.247	0.700	0.0425	0.245	0.700
425	0.154	0.594	1.688	0.0374	0.249	0.702	0.0387	0.248	0.702
450	0.171	0.729	2.0663	0.0340	0.252	0.704	0.0353	0.250	0.704
475	0.187	0.881	2.488	0.0310	0.254	0.706	0.0321	0.253	0.706
500	0.202	1.0493	2.953	0.0282	0.256	0.708	0.0293	0.255	0.707
525	0.216	1.235	3.460	0.0257	0.258	0.709	0.0268	0.257	0.708
550	0.229	1.437	4.0112	0.0235	0.260	0.710	0.0245	0.259	0.709
575	0.241	1.656	4.605	0.0215	0.262	0.711	0.0224	0.261	0.710
600	0.252	1.893	5.240	0.0198	0.264	0.711	0.0206	0.263	0.710
625	0.262	2.147	5.918	0.0182	0.266	0.711	0.0190	0.265	0.711
650	0.272	2.418	6.637	0.0169	0.267	0.711	0.0176	0.266	0.711
675	0.283	2.707	7.397	0.0157	0.269	0.711	0.0164	0.268	0.711
700	0.294	3.0134	8.197	0.0147	0.270	0.711	0.0154	0.269	0.711
725	0.306	3.337	9.0374	0.0138	0.271	0.711	0.0145	0.271	0.711

Tabla 4.3.10 En la tabla se indican las secciones de producción efectivas teóricas de rayos X para la aproximación ECPSSR, así como las intensidades relativas teóricas para ambas aproximaciones, todos estos datos para distintas energías de bombardeo.

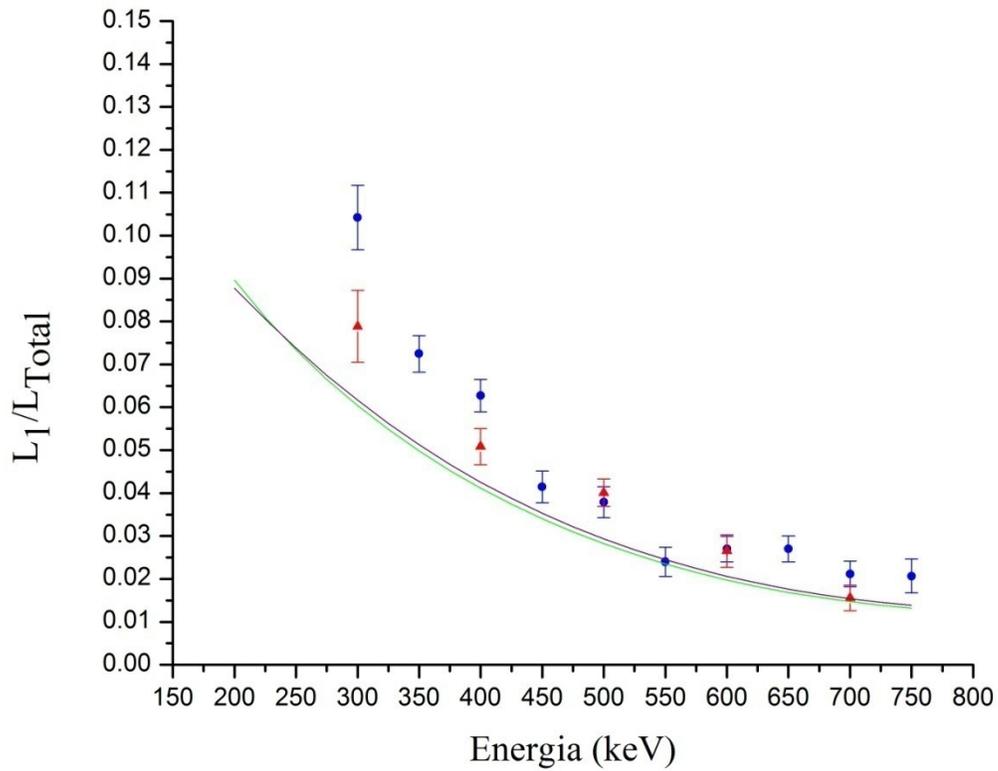


Figura 4.3.7 En la figura se muestra la gráfica de la fracción $\frac{L_1}{L_{Total}}$ como función de la energía de bombardeo, junto con sus incertidumbres asociadas para los dos conjuntos de experimentos; los triángulos representan la segunda ronda y los círculos la primera. Las líneas continuas representan las intensidades relativas teóricas correspondientes, la verde para la aproximación PWBA y la morada para la ECPSSR.

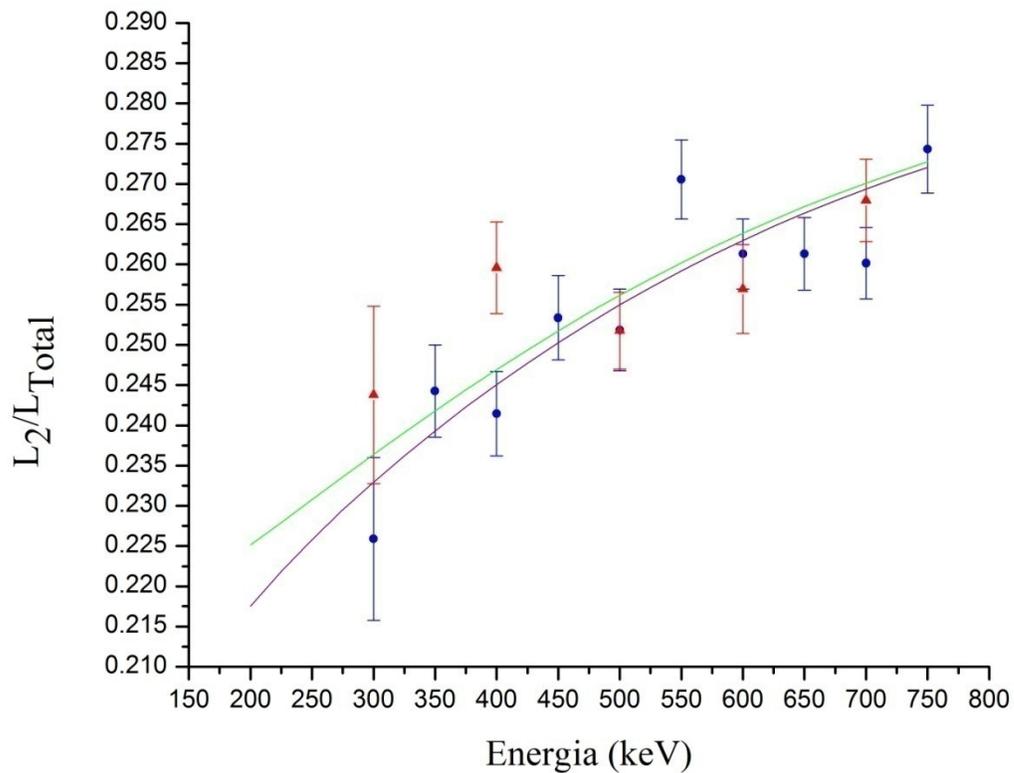


Figura 4.3.8 En la figura se muestra la gráfica de la fracción $\frac{L_2}{L_{Total}}$ como función de la energía de bombardeo, junto con sus incertidumbres asociadas para los dos conjuntos de experimentos; los triángulos representan la segunda ronda y los círculos la primera. Las líneas continuas representan las intensidades relativas teóricas correspondientes, la verde para la aproximación PWBA y la morada para la ECPSSR.

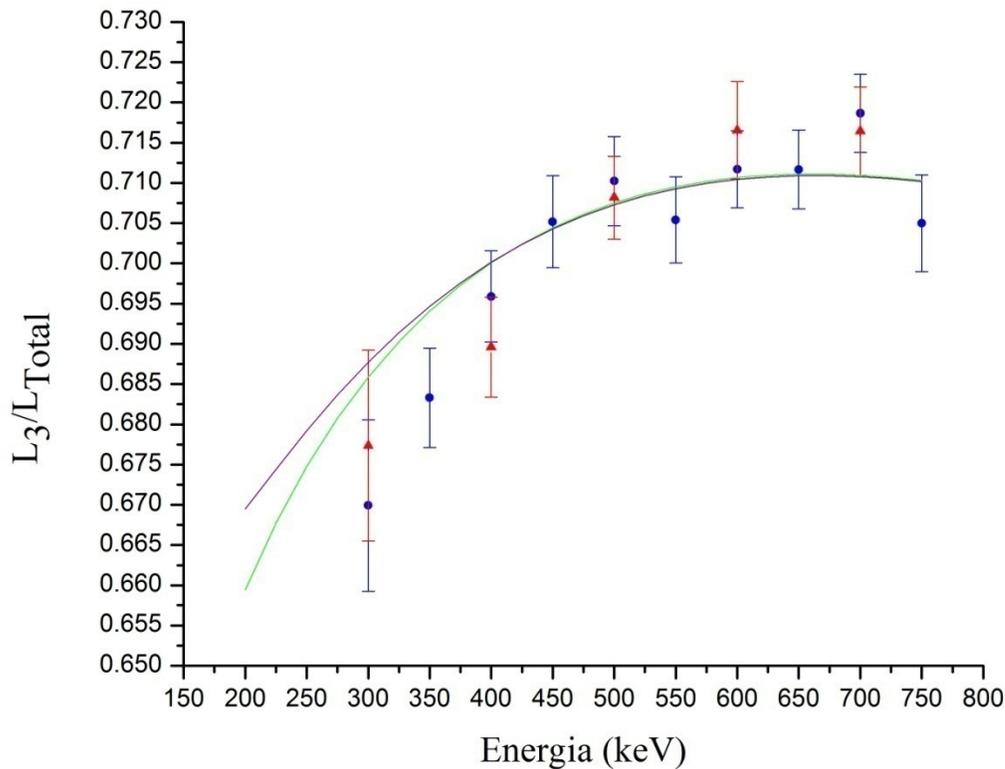


Figura 4.3.9 En la figura se muestra la gráfica de la fracción $\frac{L_3}{L_{Total}}$ como función de la energía de bombardeo, junto con sus incertidumbres asociadas para los dos conjuntos de experimentos; los triángulos representan la segunda ronda y los círculos la primera. Las líneas continuas representan las intensidades relativas teóricas correspondientes, la verde para la aproximación PWBA y la morada para la ECPSSR.

De estas tres gráficas puede observarse que el comportamiento que habíamos logrado notar en el primer conjunto de bombardeos se ve confirmado por el segundo, pues las formas de las curvas se asemejan y las incertidumbres de los puntos correspondientes se intersecan. También se puede notar que nuestros datos compaginan con los predichos teóricamente, sobre todo mientras más aumenta la energía de bombardeo, esto es debido a que a menor energía, nuestra estadística era más baja, y ello podría conllevar a errores en el cálculo de la intensidad relativa.

La Figura 4.3.7 muestra que la fracción L_1/L_{Total} disminuye respecto de la energía, esto compagina con lo que se observó para la línea $L_{\gamma 3}$, ya que al ser la única línea identificada

para esta subcapa, se mantiene la tendencia decreciente. Del este comportamiento y de (4.3.5) se puede notar que lo esperado teóricamente y lo que obtuvimos en el experimento se acercan entre sí a medida de que la energía aumente, también puede notarse que la probabilidad de que se emita un fotón proveniente de la primera subcapa L decrece a favor de las otras dos subcapas.

En la Figura 4.3.8 se nota que L_2/L_{Total} aumenta respecto de la energía, esto nos indica que, como la fracción asociada a $L_{\beta 1}$ disminuye, la de $L_{\gamma 1}$ debe de incrementarse aún más que el decrecimiento de esta para mantener el comportamiento creciente de la fracción total. De esto y de (4.3.5) se puede notar que lo esperado teóricamente y lo que obtuvimos en el experimento se compaginan entre sí, también puede notarse de que la probabilidad de que se emita un fotón proveniente de la segunda subcapa L aumenta en perjuicio de la primera subcapa.

En la Figura 4.3.9 se observa que fracción L_3/L_{Total} aumenta respecto de la energía, esto está en desacuerdo con lo que se esperaba por las líneas identificadas, quizás debido a la presencia de las líneas L_t (L_3M_2) y L_s (L_3M_3) que no fueron incluidas debido a que la estadística obtenida para los experimentos no permitió observarlas para todas las energías. Del comportamiento observado y de (4.3.5) se puede notar que lo esperado teóricamente y lo que obtuvimos en el experimento se acercan entre sí a medida de que la energía aumente (pues es más fácil identificar a las líneas L_t y L_s), también puede notarse de que la probabilidad de que se emita un fotón proveniente de la tercera subcapa L aumenta en perjuicio de la primera subcapa.

Para poder corroborar que nuestros resultados experimentales fueran correctos, se decidió compararlos con las intensidades relativas reportadas en distintos artículos, para diversos rangos de energías, así como para distintos elementos, todos bombardeados con protones. Con este fin investigamos diferentes fuentes en revistas científicas las cuales pueden ser consultadas en las siguientes referencias: [28], [29], [30], [31], [32], [33], [34], [35], [36], [37].

Debido a que en la gran mayoría de trabajos que encontramos, se reportan las intensidades sólo en términos de grupos de líneas (es decir, que sólo se reporta a L_γ en lugar de $L_{\gamma 1}$ y $L_{\gamma 3}$) cambiamos nuestros resultados para poder compararlos con ellos. A su vez, recurrimos a una *velocidad relativa* de los protones en términos de la velocidad promedio de los electrones en la capa L de cada elemento que fuese bombardeado; esto con el fin de poder graficar a todos los elementos registrados mediante una variable común que permitiera la compactación del rango de energías, y con esto observar a todos los datos en una nube compacta en donde sus comportamientos, coincidencias y diferencias pudieran ser registrados.

Dicha velocidad relativa se calcula en términos de la energía de incidencia de los protones, y la energía de amarre de los electrones en cada subcapa L (con lo cual se toma en cuenta cada elemento) recurriendo a la expresión:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 \quad (4.3.6)$$

En donde E es la energía ya sea de los protones o la de amarre de los electrones, m es la masa de los electrones o de los protones y v representa la velocidad de las partículas en cada caso. Consideramos a la velocidad promedio de los electrones en la capa L como:

$$v_L = \frac{1}{4}(v_{L1} + v_{L2} + 2v_{L3}) \quad (4.3.7)$$

Con v_L la velocidad media de los electrones en toda la capa L y las otras variables las velocidades en cada subcapa correspondiente. Con el uso de las dos expresiones anteriores podemos obtener nuestra velocidad relativa VR expresada como:

$$VR = \frac{v_p}{v_L} \quad (4.3.8)$$

Siendo v_p la velocidad de incidencia promedio de los protones sobre los blancos muestra. Esta variable permite confrontar diversos tipos de elementos a la vez, así como poder utilizar a rangos de energías muy grandes y compararlos con nuestro rango de energías.

Debido a la naturaleza de los datos experimentales reportados por otros autores, pudimos registrar en ciertos casos, y deducir en otros, 6 fracciones con las cuales comparamos nuestros resultados, dichas intensidades relativas son: $\frac{L_l}{L_\alpha}$, $\frac{L_l}{L_\beta}$, $\frac{L_l}{L_\gamma}$, $\frac{L_\gamma}{L_\alpha}$, $\frac{L_\beta}{L_\alpha}$ y $\frac{L_\gamma}{L_\beta}$. Las Tablas 4.3.11 y 4.3.12 muestran los valores de nuestras fracciones experimentales correspondientes, obtenidas mediante nuestros datos experimentales; las siguientes figuras indican los comportamientos de dichas intensidades relativas respecto a la velocidad relativa junto con los reportados por las fuentes publicadas en las revistas consultadas.

Energía de Bombardeo (keV)	Fracciones para comparar con otras fuentes					
	$\frac{L_l}{L_\alpha}$	$\frac{L_l}{L_\beta}$	$\frac{L_l}{L_\gamma}$	$\frac{L_\gamma}{L_\alpha}$	$\frac{L_\beta}{L_\alpha}$	$\frac{L_\gamma}{L_\beta}$
750	0.0303 ± 0.0125	0.0908 ± 0.0102	0.517 ± 0.0679	0.0819 ± 0.0078	0.560 ± 0.022	0.146 ± 0.0171
700	0.0372 ± 0.00586	0.114 ± 0.0117	0.753 ± 0.0943	0.0692 ± 0.00362	0.547 ± 0.0268	0.127 ± 0.00790
650	0.0325 ± 0.00229	0.0983 ± 0.00436	0.609 ± 0.0491	0.0747 ± 0.00344	0.556 ± 0.00994	0.134 ± 0.00640
550	0.0396 ± 0.00261	0.114 ± 0.00672	0.745 ± 0.0625	0.0744 ± 0.00372	0.583 ± 0.0226	0.128 ± 0.00793
500	0.0421 ± 0.00266	0.124 ± 0.00844	0.798 ± 0.0987	0.0738 ± 0.00601	0.573 ± 0.0282	0.129 ± 0.0122
450	0.0427 ± 0.00293	0.123 ± 0.00638	0.776 ± 0.0652	0.0772 ± 0.00386	0.583 ± 0.0177	0.132 ± 0.00751
400	0.0435 ± 0.00282	0.116 ± 0.00552	0.708 ± 0.0703	0.0861 ± 0.00538	0.629 ± 0.0162	0.137 ± 0.00913
350	0.0497 ± 0.00555	0.1256 ± 0.00896	0.831 ± 0.123	0.0837 ± 0.00736	0.664 ± 0.0159	0.126 ± 0.0114
300	0.0511 ± 0.00535	0.127 ± 0.00848	0.721 ± 0.094	0.0993 ± 0.00769	0.676 ± 0.0189	0.147 ± 0.0117

Tabla 4.3.11 En la tabla se indican las fracciones de la primera ronda de experimentos, requeridas para comparar con los valores obtenidos de otras fuentes, como función de la energía.

Energía de Bombardeo (keV)	Fracciones para comparar con otras fuentes					
	$\frac{L_l}{L_\alpha}$	$\frac{L_l}{L_\beta}$	$\frac{L_l}{L_\gamma}$	$\frac{L_\gamma}{L_\alpha}$	$\frac{L_\beta}{L_\alpha}$	$\frac{L_\gamma}{L_\beta}$
700	0.0345 ± 0.00269	0.103 ± 0.00509	0.705 ± 0.0681	0.0685 ± 0.00388	0.496 ± 0.0107	0.1215 ± 0.00709
600	0.0354 ± 0.00269	0.107 ± 0.00563	0.631 ± 0.0554	0.0785 ± 0.00397	0.488 ± 0.0150	0.141 ± 0.00782
500	0.0408 ± 0.00245	0.122 ± 0.00477	0.732 ± 0.0575	0.0781 ± 0.00371	0.496 ± 0.00991	0.138 ± 0.00683
400	0.0459 ± 0.00309	0.126 ± 0.00558	0.783 ± 0.0697	0.0820 ± 0.00442	0.540 ± 0.0125	0.134 ± 0.00752
300	0.0560 ± 0.00616	0.135 ± 0.0109	0.835 ± 0.138	0.0938 ± 0.00978	0.613 ± 0.0320	0.135 ± 0.0150
250	0.0592 ± 0.0161	0.152 ± 0.0265	1.056 ± 0.442	0.0785 ± 0.0208	0.576 ± 0.0501	0.120 ± 0.0324

Tabla 4.3.12 En la tabla se indican las fracciones de la primera ronda de experimentos, requeridas para comparar con los valores obtenidos de otras fuentes, como función de la energía.

En la Figura 4.3.10 se observa el comportamiento de la fracción $\frac{L_l}{L_\alpha}$ tanto para nuestros datos experimentales como para los obtenidos de las diversas fuentes mencionadas anteriormente. La imagen muestra a diversos elementos (como Gd, Pb, Pt, W, U, Ho, Pd entre otros) todos graficados juntos para observar el cambio de la intensidad relativa con respecto a la velocidad reducida, lo cual nos permite comparar al mismo tiempo a intervalos muy grandes de energía y cotejarlos con nuestro rango de trabajo.

De esta figura en específico, no podemos decir mucho acerca del comportamiento, ya que nuestros datos no permiten una comparación suficiente con los otros valores experimentales, los cuales indican ser relativamente constantes respecto a la velocidad reducida, para el intervalo tomado.

Los puntos en el extremo derecho de la gráfica que se salen de la nube de datos generada corresponden a una serie de Lantánidos desde el Nd hasta el Yb en donde la energía de bombardeo es de 20 MeV lo cual nos indica que el comportamiento puede ser diferente cuando se entra al rango de altas energías debido a la aparición de otros efectos que influyan en las secciones de producción de rayos X correspondientes. El otro par de puntos que se sale de la nube corresponde a Zn bombardeado a 3 MeV, lo cual indica que la composición electrónica influye para elementos que son muy distintos al Gd.

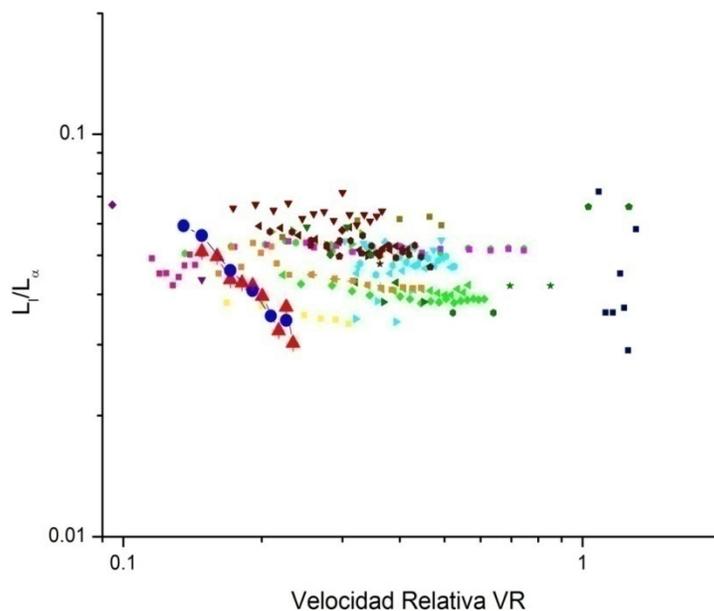


Figura 4.3.10 En la figura se observa el comportamiento de la intensidad de la línea L_l relativa a la intensidad del conjunto de líneas L_α para diversos elementos extraídos de varias fuentes. En la ilustración se grafican distintos elementos en amplios rangos de energía de bombardeo, mostrados juntos gracias a la velocidad reducida. Como en las ilustraciones anteriores, los puntos y los triángulos representan nuestros datos para el Gd.

Cuando se observa a la Figura 4.3.11 (abajo) puede notarse el comportamiento de la intensidad de la línea L_l respecto a la suma de las intensidades del conjunto de líneas L_β , para distintos elementos e intervalos de energías. Se muestra una concordancia con nuestros datos y los mostrados por las otras fuentes citadas anteriormente; la fracción disminuye con el aumento de la velocidad relativa y pareciera llegar a un mínimo alrededor del valor de 0.06 a una velocidad reducida de 0.5 que equivale a 5 MeV para el Pt y a 4.7 MeV para el Ta.

A bajas energías, los datos parecen indicar un comportamiento constante máximo para valores menores a 300 keV por lo que investigación en ese intervalo podría resultar importante, esto se nota a los 300 keV del Gd. Los datos que se salen de la nube generada corresponden al Zr y al Sn para 3 MeV indicado lo mismo mencionado para la fracción anterior en lo que respecta a elementos con Z menor al Gd; los valores indicados por [35] muestran que el comportamiento se mantiene aún cuando aumenta VR y que 0.06 es un límite asintótico para la fracción.

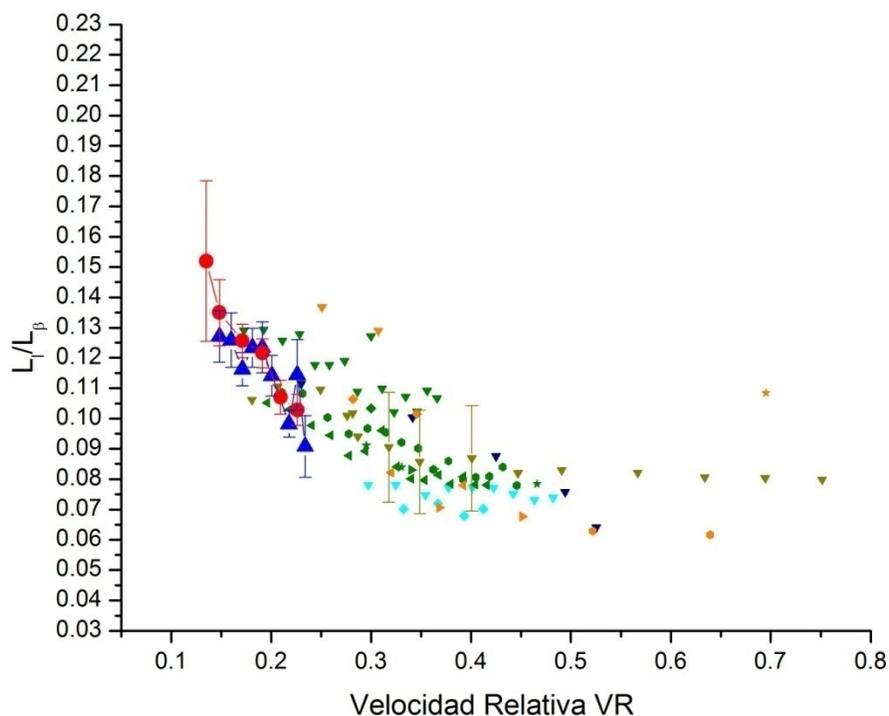


Figura 4.3.11 En la figura se observa el comportamiento de la intensidad de la línea L_l relativa a la intensidad del conjunto de líneas L_β para diversos elementos extraídos de varias fuentes. En la ilustración se grafican distintos elementos en amplios rangos de energía de bombardeo, mostrados juntos gracias a la velocidad reducida. Como en las ilustraciones anteriores, los puntos y los triángulos representan nuestros datos para el Gd.

La Figura 4.3.12 muestra a su vez el comportamiento de la intensidad de la línea L_l respecto a la suma de las intensidades del conjunto de líneas L_γ para varios elementos y energías de bombardeo, todas las muestras siendo impactadas por protones. Nuestros datos coinciden con aquellos reportados por las otras fuentes, comprendiendo los nuestros un intervalo menor para la velocidad relativa. Los puntos mostrados parecen indicar un límite superior a energías menores a 300 keV para el Gd correspondientes a una VR de 0.15, sin embargo faltan más datos en esa zona para comprobar dichas aseveraciones, es por ello que recomendamos más experimentos en esa zona.

Para valores de la velocidad reducida superiores a 0,5 no se observa una disminución de la pendiente generada por los datos, los cuales siguen disminuyendo, como se observa para el Ta a 5 MeV. Un caso aparte es el mostrado por el Pb en todo su intervalo de energías desde 500 keV hasta 14 MeV, pues dicho elemento decrece con respecto a VR pero a una pendiente distinta a los demás datos, y empezando y terminando con valores muy distintos de la intensidad relativa mostrada.

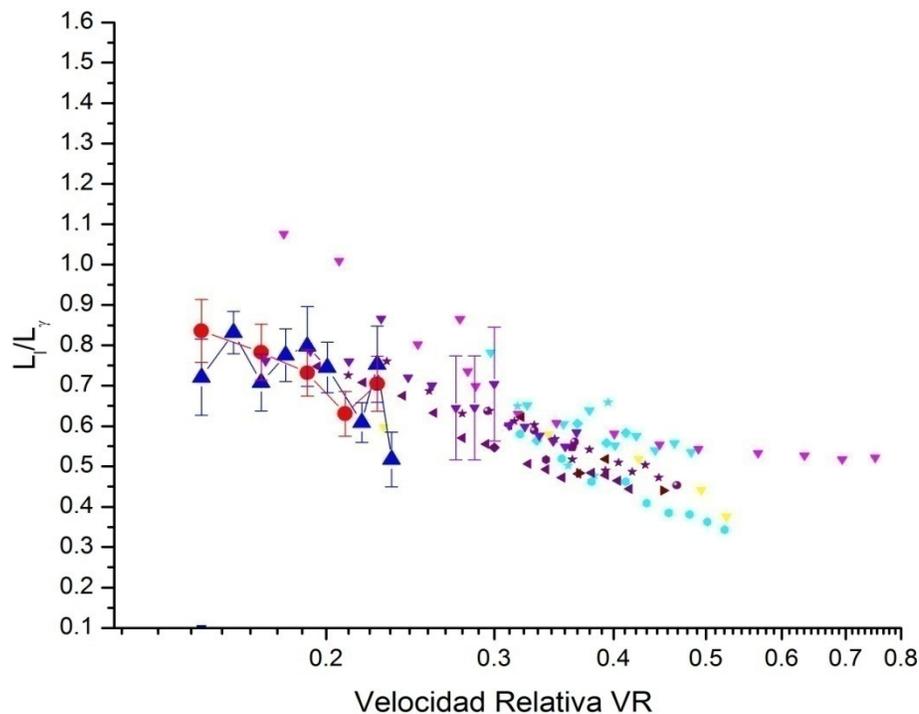


Figura 4.3.12 En la figura se observa el comportamiento de la intensidad de la línea L_l relativa a la intensidad del conjunto de líneas L_γ para diversos elementos extraídos de varias fuentes. En la ilustración se grafican distintos elementos en amplios rangos de energía de bombardeo, mostrados juntos gracias a la velocidad reducida. Como en las ilustraciones anteriores, los puntos y los triángulos representan nuestros datos para el Gd.

A continuación se muestra en la Figura 4.3.13 la suma de las intensidades del conjunto de líneas L_γ relativa a la suma de las intensidades del conjunto de líneas L_α para diversos elementos respecto a la velocidad reducida descrita con anterioridad. Se puede notar que nuestros datos concuerdan con la nube producida por el resto de referencias, el comportamiento es decreciente en un pequeño rango de velocidades reducidas que abarca desde el 0.11 hasta el 0.19 mostrándose esto para elementos como el Gd desde 300 keV hasta 550 keV, el W de 260 keV a 400 keV y el Au de 300 keV a 800 keV. Un estudio a menores energías no pareciera poder revelar nueva información para elementos cercanos a estos.

A los 600 keV para el Gd (una VR de 0.19), así como a los 875 keV del Au se observa un mínimo en el decrecimiento del valor de la fracción, aumentando a una pendiente constante a partir de ese dato. El Ta, que es el elemento con mayor pendiente graficado, no parece mostrar que dicho crecimiento se detenga en el intervalo observado.

De nuevo, el Pb indica el comportamiento similar al resto de la nube pero afuera de ésta, y con una pendiente distinta, al igual que el Dy, W y Th cuando son bombardeados a 3 MeV, observándose lo dicho hace dos gráficas para estos casos.

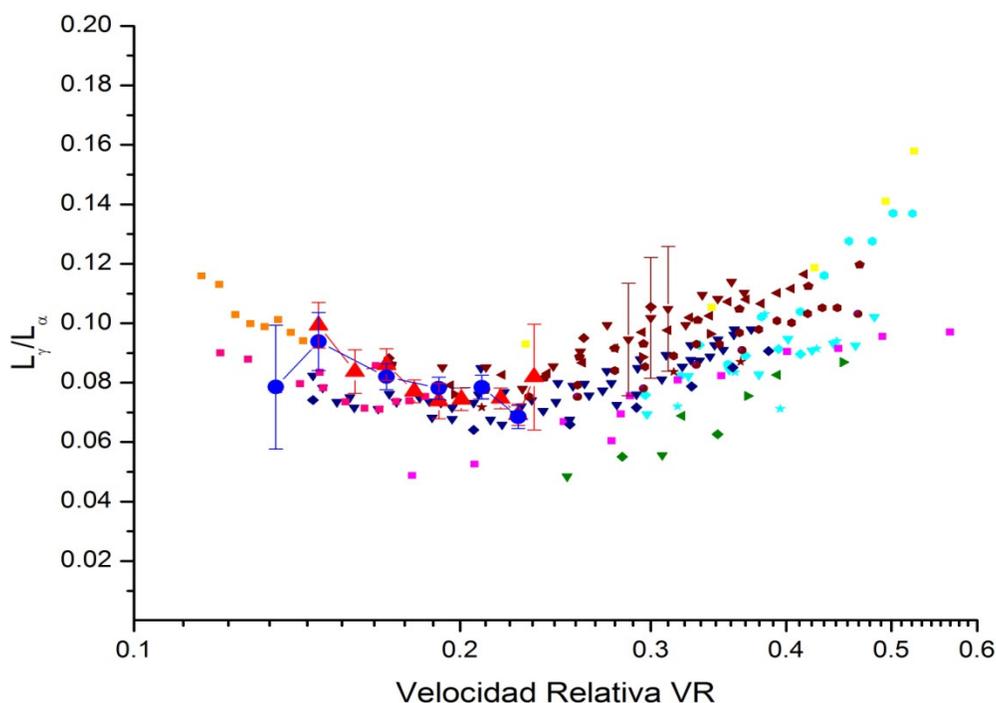


Figura 4.3.13 En la figura se observa el comportamiento de la suma de las intensidades de las líneas L_γ relativa a la intensidad del conjunto de líneas L_α para diversos elementos extraídos de varias fuentes. En la ilustración se grafican distintos elementos en amplios rangos de energía de bombardeo, mostrados juntos gracias a la velocidad reducida. Como en las ilustraciones anteriores, los puntos y los triángulos representan nuestros datos para el Gd.

La siguiente gráfica muestra a la suma de las intensidades del conjunto de líneas L_β relativa a la suma de las intensidades del conjunto de líneas L_α para distintos elementos e intervalos de energía, graficados contra la velocidad reducida. Nuestros datos compaginan con la nube generada por los valores experimentales de otras fuentes consultadas; el comportamiento de la fracción resulta prácticamente igual al de la fracción anterior, es decir, un mínimo en el mismo valor de la VR pero esta vez siendo de 0.47 la intensidad relativa del Gd.

El máximo de bajas energías sigue presente, y esta vez con mayor claridad a un valor de 0.62 en lo que respecta a la fracción y a una VR de 0.12 (250 keV para el W). También siguen presentes los mismos elementos que en la fracción anterior se encontraban fuera de la nube con comportamientos similares a los observados en la gráfica anterior.

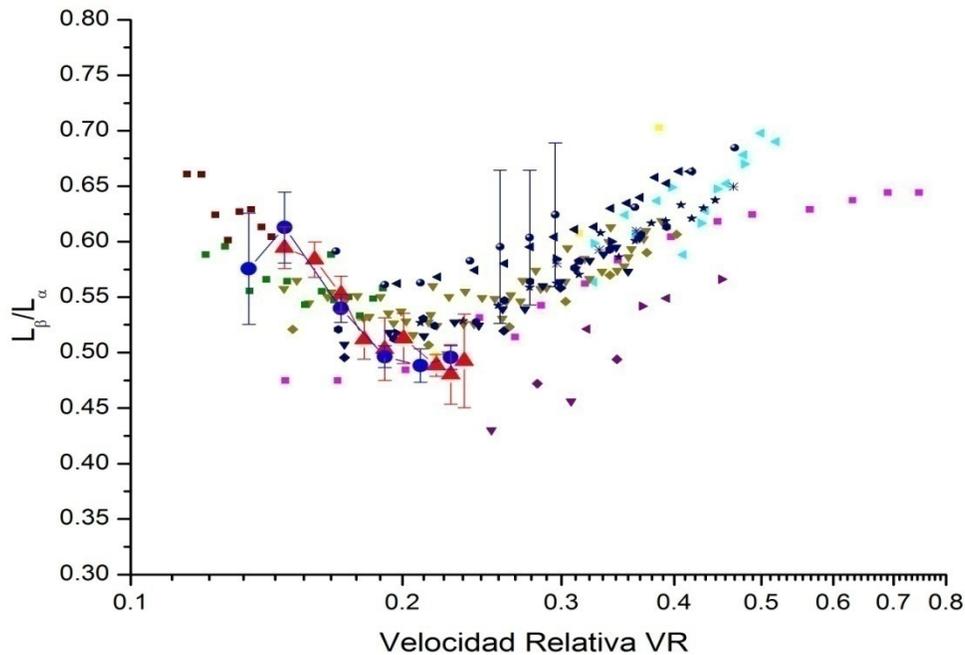


Figura 4.3.14 En la figura se observa el comportamiento de la suma de las intensidades de las líneas L_β relativa a la intensidad del conjunto de líneas L_α para diversos elementos extraídos de varias fuentes. En la ilustración se grafican distintos elementos en amplios rangos de energía de bombardeo, mostrados juntos gracias a la velocidad reducida. Como en las ilustraciones anteriores, los puntos y los triángulos representan nuestros datos para el Gd.

En la gráfica correspondiente a la Figura 4.3.15 se muestra a la suma de las intensidades de las líneas que forman el conjunto L_γ relativa a la suma de las intensidades de las líneas del conjunto L_β graficada contra la velocidad reducida para nuestros datos así como para los obtenidos de otras fuentes. Nuestros datos, aunque consistentes con los demás, no parecen suficientes para indicar el comportamiento de la fracción, o al menos para corroborarlo, pues la nube se encuentra muy difuminada, y los datos que se encontraban fuera de ella en las dos figuras pasadas siguen estándolo pero de una manera más notable.

Los valores centrales de la nube (que incluyen a los nuestros) muestran un comportamiento similar al de las dos figuras previas, pero menos pronunciado, es decir, un máximo a bajas energías vagamente descrito por el Pt a 0.19, producido a una velocidad reducida de 0.11 (equivalente a 300 keV).

También parece notarse un mínimo a 0.14 generado principalmente para el Gd a 500 keV o 0.2 en VR; a partir de dicho valor las fracciones parecen ser muy ligeramente crecientes, aunque de nuevo el Pb se sale de lo esperado.

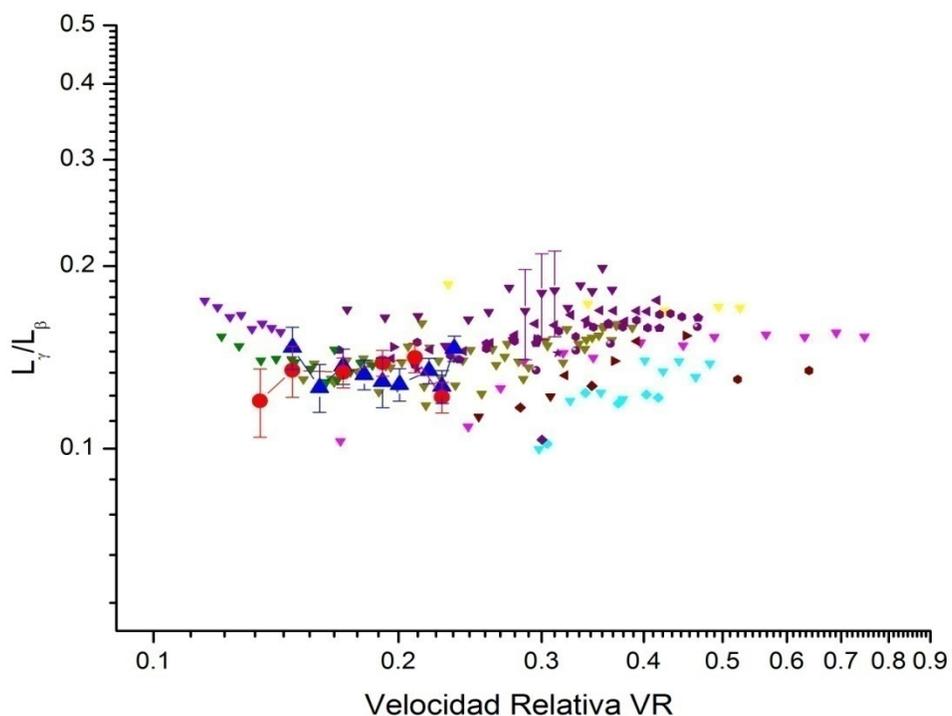


Figura 4.3.15 En la figura se observa el comportamiento de la suma de las intensidades de las líneas L_γ relativa a la intensidad del conjunto de líneas L_β para diversos elementos extraídos de varias fuentes. En la ilustración se grafican distintos elementos en amplios rangos de energía de bombardeo, mostrados juntos gracias a la velocidad reducida. Como en las ilustraciones anteriores, los puntos y los triángulos representan nuestros datos para el Gd.

Conclusiones

Nuestra primera observación radica en que se cumplió el objetivo principal del experimento pues se logró observar el comportamiento de las intensidades relativas respecto a la energía, tanto para algunas líneas separadas (aunque la resolución y la eficiencia del detector en algunas zonas complicó la tarea) como para los conjuntos de líneas L_α , L_β y L_γ .

El procedimiento experimental parece correcto debido a que ambas rondas de experimentos arrojan resultados similares, lo cual nos permite determinar el comportamiento de la intensidad relativa de las líneas ubicadas con respecto a la energía de bombardeo, ya sea como creciente, decreciente o “constante” en nuestro rango de trabajo.

Como comprobación de lo anterior, y como una ampliación de nuestros resultados, se observó el comportamiento de las intensidades relativas de los grupos de líneas (ya que estos son los resultados que más comúnmente se reporta en la bibliografía) respecto a la velocidad de los protones reducida por la velocidad de los electrones promedio en la capa L . Esto nos permitió cotejar los resultados con otros elementos y otros rangos de energías, para poder dar una mayor valía a nuestros resultados y de cierta forma compara con otras maneras de realizar el experimento.

En su gran mayoría, los datos permitieron una similitud aceptable con lo reportado en otras fuentes así como la observación de mínimos y máximos en ciertas regiones de VR que compaginaban con la mayoría de los valores experimentales de otros autores, obteniéndose así una imagen clara de la variación de las fracciones en todo el rango trabajado y sirviendo nuestros datos para aportar puntos en la zona de bajas VR y bajas energías, siendo que esta zona casi sólo tiene valores de intensidades generadas por bombardeos de protones.

La fracción que presentó más problemas en dicha comparación fue la de L_l/L_α , ya que los demás datos mostraban un comportamiento igualmente decreciente pero con una pendiente distinta que la que obtuvimos nosotros; esto lo atribuimos a una baja eficiencia de nuestra parte en la zona correspondiente a las líneas que comprenden dicha fracción. Otra de las razones que pudo originar este cambio en la pendiente es una baja estadística para la línea L_l a pequeñas energías, por lo que un nuevo experimento en esa zona podría clarificar nuestro punto.

Queda la duda del comportamiento de nuestras fracciones para bajas energías, ya que en la gran mayoría de estos valores (respaldado por algunos datos de otras fuentes) en los intervalos de velocidades reducidas correspondientes se observa que las intensidades relativas tienen un comportamiento creciente en esa dirección y podrían llegar a un máximo

en esa zona, lo que podría comprobarse con experimentos a energías alrededor de 50 keV, siendo esto una fuente de información para las secciones de producción de rayos X.

El análisis de los datos obtenidos es consistente consigo mismo, sobre todo en el modelaje del fondo de los espectros, pues permite obtener valores proporcionales de las áreas que, al ser divididas entre la intensidad total de la capa L da como resultado intensidades relativas experimentales similares. Sin embargo, el fondo resulta difícil de describir a energías pequeñas cercanas a la de la línea L_I en donde se requiere hacer consideraciones extra para obtener un valor real de dicha línea que, de otra forma, resultaba demasiado grande; el tipo de modelaje que más se acercaba a un resultado coherente fue el exponencial pero tenía problemas con el intervalo establecido.

La comparación de las intensidades relativas experimentales de cada subcapa L del Gadolinio con lo esperado teóricamente, nos permite observar la aplicabilidad de la ecuación presentada con anterioridad en la que se describe la intensidad relativa en términos de las fluorescencias y las secciones de producción de rayos X de cada subcapa, ya que los resultados son similares para ambos la aproximación ECPSSR y para la PWBA; la similitud aumenta a medida de que se incrementa la energía de bombardeo, lo cual sugiere ya sea un límite en la aplicación de la expresión matemática, o que los resultados experimentales a bajas energías no son totalmente fiables, debido a una baja estadística en los experimentos, o que los picos ubicados en ese rango son difíciles de diferenciar con el ruido de fondo.

Los resultados de estas fracciones muestran también que los rayos X de las subcapas 2 y 3 son favorecidos en comparación con los de la primera subcapa a medida de que la energía aumenta, haciendo que la intensidad de las líneas que llegan a dicha subcapa se vea reducida con respecto a las que llegan a las otras dos subcapas.

Referencias

- [1] Cacheris WP et al., *The relationship between thermodynamics and the toxicity of gadolinium complexes.*, PubMed, USA, 1990, 8(4):467-81.
- [2] Burcham, W. E., W. E., *Nuclear Physics, An Introduction*, Reverté, Barcelona España, 1997 109 - 125 pp.
- [3] Segre, Emilio, *Nuclei and Particles. An Introduction to Nuclear and Subnuclear Physics.*, W. A. Benjamin, Inc. New York, USA, 1965, 17 -19 pp.
- [4] U. W. Arndt, D. C. Creagh, R. D. Deslattes, et. al., *International Tables for Crystallography (2006 Vol. C, ch. 4.2, pp. 191-258*
- [5] “Monitoring the Solidification of Single-Crystal Castings Using High-Energy X-Ray Diffraction” <http://www.tms.org/pubs/journals/JOM/9907/Fitting/Fitting-9907.html>
- [6] Campbell, J. L., *Nucl. Instrum. Methods B* **49**, 115 (1990)
- [7] Oilver, A., et. al., *Characterization of a Si(Li) Detector for PIXE Analysis*, Journal of X-ray Science and Technology **4**, 221 -223 pp. (1994)
- [8] Hansen, J. S., et. al., *Nucl. Instrum. Methods* **106**, 365 p. (1973)
- [9] Miranda, Javier, *Emisión de Rayos X Inducida por Partículas (PIXE)*, IFUNAM, Escuela de Verano en Física / 2001
- [10] Campbell, J. L., et. al., *PIXE*, S. A. E. **49**, 8 – 61 pp. (1995)
- [11] Campbell, J. L., et. al., *CHEMICAL ANALYSIS : a Series of Monographs on Analytical Chemistry and its Applications, Particle – Induced X – Ray Emission Spectrometry (PIXE)*, John Wiley & Sons, Inc., 1995.
- [12] Morita, Susumu, et. al., *Continuous Background in PIXE*, International Journal of PIXE **1**, 1 – 29 pp. (1989)
- [13] Landau, L. D., et. al., *Mecánica Cuántica No Relativista, Curso de Física Teórica*, Vol. 3, Editorial Reverté, Barcelona, 1983.
- [14] Walske, M. C., *Phys. Rev.*, 101 (1956) 940.
- [15] Choi, B. H., *Phys. Rev.*, **A7** (1973) 2056.
- [16] Rodríguez, Luis, *Tesis: Secciones Eficaces de Ionización y Producción de Rayos X en Capas Atómicas L por Incidencia de Protones*, UNAM F. C., D.F. México, 1994, 14 – 24 pp., 165 pp.
- [17] Zschornack, G., *Handbook of X – Ray Data*, Springer – Verlag, Berlin Heilderberg, 2007, 46 – 54 pp., 967 pp.
- [18] De Lucio, O., *Tesis: Desarrollo de un Dispositivo para Análisis con Reacciones Nucleares Resonantes*, UNAM F. C., D. F. México, 1997, 15 – 20 pp. 61 pp.

- [19] Miranda, J., et. al., *A new beam line for characteristics X – ray experiments at the Pelletron accelerator, Instituto de Física, UNAM*, Revista Mexicana de Física 46 (4), 2000 pp 367
- [20] J. F. Zeigler, U.Littmark and H.Biersack. *The Stopping and Ranges of Ions in Matter*, Pergamon Press, New York, 1985.
- [21] J.H. Scofield, *Phys. Rev. A10* (1974) 1507 and (erratum) *Phys. Rev. A12* (1975) 345.
- [22] J.A. Maxwell, J.L. Campbell. *Sub. to X-Ray Spectrom.* in June 2004
- [23] Z. Liu and S.J. Cipolla *Comp. Phys. Comm.* 97 (1996) 315).
- [24] M. H. Chen, B. Crasemann and H. Mark. *Phys. Rev. A24* (1981) 177.
- [25] V. Van Espen, H. Nullens, F. Adams, *Nucl. Instr. And Meth.B* 142 (1977) 243.
- [26] Zhiqiang Liu and Sam Cipolla. *Computer Physics Communications*, 97 (1996) 315.
- [27] “Rutherford scattering 4.8.2”
http://www.kayelaby.npl.co.uk/atomic_and_nuclear_physics/4_8/4_8_2.html, *Kaye & Laby*, Vista por última vez el 15 – 06 - 2009
- [28] Cipolla, Sam., Et. Al., *Nucl. Instr. And Meth. In Physics Research B* 241 (2005) 129 – 133. *Relative Intensities of L X – rays excited by 75 – 300 keV proton impact on element with Z = 39 – 50.*
- [29] Tawara, H., Et. Al., *Physical Review A*, Vol. 11 Number 5 (1975) 1560 – 1570. *L – shell ionizations of Au, Bi, and U in proton and helium – ion impact.*
- [30] Papp, T., Et. Al., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 26 (1993) 4007 – 4017. *Experimental test of Dirac – Fock versus Dirac – Hartree – Slater L X – ray intensity ratios.*
- [31] Jones, B. N., Et. Al., *Nucl. Instr. And Meth. In Physics Research B* 258 (2007) 299 – 307. *L X – ray production cross – section ratios for protons incident on high - Z atoms: A test of ECPSSR theory and newly recommended vacancy de – excitation parameters.*
- [32] Hajivaliei, M., Et. Al., *Nucl. Instr. And Meth. In Physics Research B* 160 (2000) 203 – 215. *K and L X – ray production cross sections and intensity ratios of rare – earth elements for proton impact in the energy range 20 – 25 MeV.*
- [33] Braich, J. S., Et. Al., *Nucl. Instr. And Meth. In Physics Research B* 111 (1996) 22 – 26. *Measurement of L X – ray intensity ratios in tantalum by proton and Si – ion impact.*
- [34] Petukhov, V. P., Et. Al., *Nucl. Instr. And Meth. In Physics Research B* 109/110 (1996) 19 – 22. *L – shell X – ray production cross sections and alignment by proton impact.*
- [35] Busch, C. E., Et. Al., *Physical Review A*, Vol. 7 Number 5 (1973) 1601 – 1606. *Study of L – and M – Shell X Rays of Pb Produced by 0.5 – 14.0 – MeV – Proton Beams.*
- [36] Kennedy, V. John., Et. Al., *Nucl. Instr. And Meth. In Physics Research B* 134 (1998) 165 – 173. *L X – ray production cross sections and their ratios in Ta, W and Pt for proton impact in the energy range 2 – 5.2 MeV.*
- [37] Kamiya, M., Et. Al., *Physical Review A*, Vol. 20 Number 5 (1979) 1820 – 1827. *Projectile – energy dependence of intensity ratio of L_{α} to L_{β} x rays produced by proton and ^3He impacts on Ho and Sm.*