



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

CÁLCULO DE CAMINO LIBRE MEDIO INELÁSTICO
Y PODER DE FRENADO LINEAL DE COLISIÓN
PARA ELECTRONES DE BAJAS ENERGÍAS EN
DISTINTOS COMPUESTOS DE INTERÉS
DOSIMÉTRICO

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

MIGUEL ÁNGEL FLORES MANCERA

TUTORA:

DRA. GUERDA MASSILLON-JL

Ciudad de México, Junio, 2018





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.

Hoja de datos del jurado

1. Datos del alumno
Flores
Mancera
Miguel Ángel
46 16 09 64 48
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
413009719
2. Datos del tutor
Dra.
Guerda
Massillon
Jacques-Louis
3. Datos del sinodal 1
Dra.
María Ester
Brandan
Siqués
4. Datos sinodal 2
Dr.
Alejandro
Reyes
Coronado
5. Datos del sinodal 3
Dra.
María Isabel
Gamboa
de Buen
6. Datos sinodal 4
Dr.
Salvador Antonio
Cruz
Jiménez
7. Datos del trabajo escrito
Cálculo de camino libre medio inelástico y poder de frenado lineal de colisión
para electrones de bajas energías en distintos compuestos de interés dosimétrico
Sin subtítulo
75 páginas
2018

*A mis padres, por su amor, cariño y apoyo incondicional.
Gracias a ustedes todo este trabajo es posible.*

Agradecimientos

A la Dra. Guerda Massillon, por su apoyo y su confianza depositada en mi para la realización de este proyecto.

A la Dra. María Ester Brandan, por sus aportes valiosos a este trabajo, por las charlas amenas y el enriquecimiento de esta tesis.

Al Dr. Alejandro Reyes Coronado por sus observaciones y sugerencias tan profesionales.

A la Dra. Isabel Gamboa de Buen por su paciencia y su tiempo dedicado para revisar este trabajo, por su detalle en la lectura en cada página de esta tesis.

Al Dr. Salvador Cruz Jiménez por su amabilidad, cortesía y profesionalismo a lo largo de este proceso.

Gracias a todo mi comité tutor por enriquecer esta tesis, su trabajo está plasmado en cada página de este escrito. Sin sus observaciones y comentarios este trabajo no estaría completo.

A Laura, por su compañía invaluable, por su comprensión, cariño y amor. A largo de este proceso siempre encontré en su persona el apoyo y el aliento que necesitaba. Nadie más que ella entiende todo el esfuerzo impreso en estas hojas.

A mi familia, por los valores enseñados, porque el apoyo y el cariño que me brindaron fueron fundamentales para llevar a cabo esta tesis.

Al Instituto de Física de la UNAM por proveer el espacio y las condiciones necesarias para la realización de este trabajo

A los proyectos PAPIIT-IN115117 y Royal-Society-Advance-Fellowship-NA150212 por las becas recibidas durante el desarrollo de mi proyecto de tesis

Resumen

Este trabajo investiga el camino libre medio inelástico (*IMFP*¹, por sus siglas en inglés), las secciones eficaces y el poder de frenado lineal de colisión de electrones con energías desde el gap hasta 442 keV en distintos compuestos de interés dosimétrico (H_2O , LiF, CaF_2 y Al_2O_3). Para ello, se usó un código desarrollado en *Mathematica* por Villarrubia del NIST. Dicho código usa una función de excitación a partir del algoritmo simple de Penn (SPA) el cual se basa en la función dieléctrica. El intervalo de cálculo está entre la energía de bandgap² (alrededor de los 10 eV) y 442 keV. Además, a partir del camino libre medio inelástico se calculan las secciones eficaces asociadas a la interacción. Para los cálculos de IMFP se estimó el valor cuadrático medio (RMS³, por sus siglas en inglés) tomando como referencia la FPA (aproximación completa de Penn) para el H_2O y LiF, la TPP-2M (ecuación relativista modificada de Bethe) para el CaF_2 y la RFPA (aproximación relativista completa de Penn) para el Al_2O_3 . Se encontró una incertidumbre del orden del 0.5 % para energías entre 40 eV y 30,000 eV, para energías menores que 40 eV se estimó una incertidumbre hasta del 170 %. El aumento en la incertidumbre a energías menores que 40 eV puede deberse al SPA utilizado en los cálculos. También, se estimó un valor de incertidumbre RMS para los cálculos de poder de frenado lineal tomando como referencia el programa ESTAR⁴ del National Institute of Standards and Technology (NIST). Se obtuvo una incertidumbre del 1 % para un intervalo de energía entre 1-55 keV. Para energías menores que 1 keV se estima una incertidumbre RMS del 37 % y para energías mayores que 55 keV del orden del 3 %. De acuerdo con lo observado se considera necesario tomar en cuenta los efectos relativistas en el método de cálculo utilizado a energías mayores que 55 keV. Dicho método puede considerarse un método robusto si se incluyen los efectos relativistas y se toma en cuenta la FPA.

¹Inelastic Mean Free Path.

²En la presente tesis se utilizará el término bandgap como sustituto para la “brecha de energía” o banda prohibida.

³Root Mean Square.

⁴Electron Stopping power Tables and Ranges.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Objetivos generales	3
1.1.1. Objetivos particulares	3
1.2. Hipótesis	3
2. Conceptos básicos	4
2.1. Colisiones entre partículas cargadas	4
2.1.1. Colisiones inelásticas	4
2.1.2. Colisiones elásticas	4
2.2. Interacción de electrones con la materia	5
2.2.1. Colisión suave	5
2.2.2. Colisión dura	6
2.2.3. Colisión radiativa	6
2.3. Poder de frenado lineal	7
2.3.1. Poder de frenado lineal de colisión	7
2.3.1.1. El modelo de Bethe	7
2.3.2. Poder de frenado radiativo	10
2.4. La función dieléctrica compleja	11
2.4.1. Función dieléctrica compleja de Lindhard	12
2.5. Factor de dispersión atómica	12
2.6. Función de pérdida de energía	14
2.6.1. Función de pérdida de energía de Lindhard	15
2.7. IMFP - Camino libre medio inelástico	15
2.7.1. El algoritmo simple de Penn	17
2.7.2. Función de excitación de Ding y Shimizu	19
2.8. Sección eficaz	21
2.9. Reglas de auto-consistencia	21
2.9.1. f-sum	21
2.9.2. Suma de Kramers-Kronig (kk-sum)	22
2.10. Materiales dosimétricos	23
2.10.1. Características generales del LiF - fluoruro de litio	23
2.10.2. Características generales del H ₂ O - agua líquida	24

2.10.3. Características generales del CaF_2 - fluoruro de calcio	24
2.10.4. Características generales del Al_2O_3 - óxido de aluminio	24
3. Metodología	25
3.1. Recopilación de los índices de refracción y extinción	25
3.2. Cálculo de la función de pérdida de energía	26
3.3. Evaluación de los datos ópticos experimentales	26
3.4. Cálculo del IMFP	27
3.5. Cálculo del poder de frenado lineal de colisión	28
3.6. Cálculo de la sección eficaz	28
3.7. Comparaciones del IMFP y del poder de frenado lineal de colisión con resultados previos.	29
3.7.1. IMFP	29
3.7.2. Poder de frenado lineal de colisión	30
3.8. Incertidumbre en los cálculos	31
4. Resultados	33
4.1. Función de pérdida de energía	33
4.2. IMFP - Camino libre medio inelástico	34
4.3. Sección eficaz	36
4.4. Poder de frenado lineal de colisión	37
5. Discusión	39
5.1. Función de pérdida de energía	39
5.2. Camino libre medio inelástico	40
5.2.1. Comparaciones con publicaciones previas	41
5.3. Sección eficaz	43
5.4. Poder de frenado lineal de colisión	44
5.4.1. Comparaciones con modelos teóricos y publicaciones previas	44
6. Conclusiones	48
Bibliografía	50
A. Tablas de cálculos	56
A.1. Camino libre medio inelástico	56
A.2. Sección eficaz	60
A.3. Poder de frenado lineal de colisión	64
B. Desarrollos matemáticos	68
B.1. Propiedades de la delta de Dirac	68
B.2. Función de pérdida de energía de Lindhard	68
B.3. Algoritmo de Penn	70
B.4. Función de excitación de Ding y Shimizu	73
B.5. Suma de Kramers-Kronig	74

Introducción

La dosimetría de la radiación ionizante es el área de la ciencia que estudia y mide el depósito de energía en la materia por partículas cargadas y no cargadas mediante interacciones elásticas e inelásticas. Dichas partículas pueden ser iones o electrones, como partículas beta, rayos delta y los producidos como consecuencia de interacción de rayos-x o gamma con la materia. Durante el proceso, las partículas interactúan coulombianamente con los átomos o electrones orbitales del medio en cuestión. Para cuantificar la energía depositada en un volumen dado debido a dichas interacciones, es necesario conocer dos parámetros fundamentales: el camino libre medio inelástico, asociado directamente con la probabilidad de interacción y el poder de frenado de colisión que cuantifica la densidad de ionización producida. El camino libre medio inelástico (IMFP¹, por sus siglas en inglés), λ_{in} , es la distancia recorrida por una partícula cargada entre colisiones inelásticas consecutivas en un medio. Este parámetro está directamente relacionado con la cantidad de excitación e ionización generadas en el medio y permite medir la cantidad de energía perdida a lo largo de su trayectoria. Además de la dosimetría de la radiación ionizante, el conocimiento del camino libre medio de partículas cargadas, sobre todo de electrones, es fundamental en varias áreas de la ciencia como espectroscopía con rayos-x, espectroscopía Auger, microscopía electrónica y nanotecnología.

Considerando estas necesidades, varios grupos han realizado estudios teóricos relacionados con el camino libre medio inelástico de electrones en elementos sólidos y/o compuestos usando métodos empíricos [1] o modelos basados en la función dieléctrica [2–13]. Cada uno de estos estudios tiene sus limitaciones por lo que no existe un modelo estándar. Los primeros cálculos del IMFP utilizando la función dieléctrica fueron realizados por Penn [12] en el rango de energía desde unos cientos hasta unos miles de electronvoltios. Ashley [1] desarrolló un método basado en una función empírica para calcular el IMFP en un intervalo de 200 eV a 10 keV en diversos elementos y compuestos metálicos. Posteriormente, implementó un modelo de datos ópticos utilizando la función dieléctrica [2] en metales para energías entre 40 eV y 10 keV, en el que incluyó efectos de intercambio de electrones. Por otro lado, Tanuma y col. calcularon el IMFP para 41 elementos sólidos [3, 4], 14 compuestos inorgánicos [5], 15 compuestos orgánicos [6] y recientemente en agua líquida [7] a partir de los 50 eV hasta varios cientos de keV utilizando la función dieléctrica a través del *Full Penn Approximation* (FPA). Este método está basado en una triple integral: la transferencia de momento variable, la transferencia de energía y la frecuencia plasmónica. Esta aproximación completa de Penn es considerada como el modelo más exacto para el cálculo de secciones eficaces

¹Inelastic Mean Free Path.

1. INTRODUCCIÓN

de electrones a bajas energías en materiales arbitrarios. Emfietzoglou y col. [8, 9] han realizado cálculos de IMFP desde 10 eV hasta 100 keV en agua líquida, utilizando una versión teórica de la función dieléctrica a partir de datos experimentales de dispersión de rayos-x (IXS). Su algoritmo más reciente considera efectos de intercambio y de correlación, predominantes a bajas energías. Del mismo modo, Pandya y col. [14], reportaron resultados para algunos compuestos en un intervalo de energía de 20-2000 eV, considerando un potencial de absorción que toma la interacción entre el electrón y el medio. Akkerman y col. [10, 11] obtuvieron valores del IMFP desde los 50 eV hasta los 10 keV en diferentes compuestos, considerando funciones de pérdida de energía ópticas a partir de funciones dieléctricas experimentales. Los resultados de Pandya y col. y Akkerman y col. se diferencian con los resultados de este trabajo entre un 20 % y 150 %, dependiendo del medio en cuestión, a energías por debajo de 300 eV. En la presente tesis se da la primera aproximación en el cálculo del IMFP y del poder de frenado lineal de electrones con energías bajas hasta el bandgap de cuatro compuestos de interés dosimétrico a partir de un modelo basado en el FPA y respaldado por resultados experimentales del National Institute of Standards and Technology (NIST).

El poder de frenado lineal es el segundo parámetro fundamental en la determinación del depósito de energía. Se define como la pérdida de energía de una partícula cargada por unidad de longitud recorrida. Este concepto es la piedra angular en física de radiaciones; con el cual se puede calcular el espectro de electrones, totales y secundarios, el poder de frenado de colisiones restringido, mejor conocido como transferencia lineal de energía (LET, por sus siglas en inglés) y finalmente, la dosis depositada.

Recientemente, Cabrera-Santiago y Massillon-JL [15] calcularon el espectro de electrones secundarios y la LET en LiF:Mg,Ti y agua líquida producido por fotones de distintas energías desde rayos-x de 20 keV hasta emisiones gamma de ^{137}Cs y ^{60}Co usando el código Monte Carlo (MC) EGSnrc. Para ello, se utilizaron las secciones eficaces de fotones proporcionadas por el NIST a través del paquete XCOM, además los paquetes FLURZnrc y DOSRZnrc del código Monte Carlo EGSnrc para modelar la fluencia de electrones. Encontraron que para energías de 1 keV-10 keV, la contribución de los electrones secundarios es del orden de 40 %-90 % de la fluencia total, dependiendo de la energía del haz de fotones incidente. Además, los electrones secundarios contribuyen en un 4.3 %-21 % en la dosis total impartida siendo mayor cuando la energía del haz de fotones aumenta [16]. Con respecto a la LET, usaron una aproximación que considera la falta de fluencia de electrones a energías menores que 1 keV, encontrando que dicha corrección no es suficientemente exacta para resolver el problema. Estos resultados demuestran la importancia que tienen los electrones secundarios y el papel principal que desempeñan en la ionización y por tanto en la dosis.

Existen dificultades para el cálculo del espectro de electrones secundarios para el rango de energías por debajo de 1 keV, debido a una falta de conocimiento preciso a nivel atómico de los procesos fundamentales de la interacción de la radiación con la materia. Ha habido un esfuerzo para contestar a estas preguntas. Shinotsuka y col. [17] calcularon el poder de frenado para electrones en varios elementos a energías por debajo de 50 eV y no en compuestos, usando el algoritmo completo de Penn [18] basado en un modelo dieléctrico. Mientras que Emfietzoglou y Nikjoo [8] calcularon el poder de frenado en agua líquida para energías menores o iguales a 0.1 keV usando su propio modelo, considerando los resultados como los más exactos en aquel momento. Sin embargo, se han reportado recientemente diferencias notables en las secciones eficaces de ionización y excitación al modificar el modelo. Eso sugiere que el problema de

las secciones eficaces a energías bajas (alrededor de los 10 eV) no está resuelto todavía y requiere de una atención particular.

1.1. Objetivos generales

Esta tesis tiene por objetivo calcular el camino libre medio inelástico (IMFP), la sección eficaz y el poder de frenado lineal para electrones en agua líquida, LiF, CaF₂ y Al₂O₃ a energías tan bajas como la banda prohibida hasta 442 keV.

1.1.1. Objetivos particulares

- Obtener la componente real e imaginaria de la función dieléctrica para cada compuesto a partir de datos ópticos experimentales.
- Verificar la auto consistencia de los datos ópticos experimentales mediante reglas ópticas.
- Construir la función de pérdida de energía para cada compuesto.
- Calcular el valor cuadrático medio (RMS) para el IMFP y el poder de frenado lineal de colisión, tomando como referencia la FPA y el programa ESTAR, respectivamente.

1.2. Hipótesis

A través de datos ópticos experimentales es posible el cálculo del IMFP, la sección eficaz y el poder de frenado lineal de electrones en distintos compuestos a energías tan bajas como el bandgap.

Conceptos básicos

2.1. Colisiones entre partículas cargadas

En física, la interacción directa y electrostática entre dos cuerpos es de suma importancia; a partir de una descripción macroscópica adecuada es posible determinar el movimiento, el momento e incluso la energía de los elementos involucrados en todo instante. En física de radiaciones no es diferente; conocer con precisión la energía cinética de las partículas que se mueven en un medio al interactuar con los átomos que lo conforman, posibilita la determinación de la energía depositada en dicho medio.

Para estudiar estas colisiones, como se les denominará a partir de ahora a las interacciones entre dos cuerpos, es necesario clasificarlas de acuerdo con el estado final del sistema, en otras palabras, identificar la condición de las partículas al inicio y al final de la colisión.

2.1.1. Colisiones inelásticas

Se puede considerar como una colisión inelástica a la interacción coulombiana entre un electrón y un blanco, dígase electrón orbital o núcleo atómico, en la que se conservan el momento y la energía total, pero no la energía cinética. Como consecuencia de la transferencia de energía cinética, el estado interno del átomo es alterado produciendo excitaciones nucleares, excitaciones o ionizaciones atómicas, e incluso emisión de rayos-x de frenado (emisión bremsstrahlung) [19].

2.1.2. Colisiones elásticas

En una colisión elástica hay magnitudes que se conservan tales como el momento total, la energía total y la energía cinética total. Además, tanto la partícula incidente como el blanco al interactuar elásticamente, siguen siendo los mismos después de la interacción.

2.2. Interacción de electrones con la materia

Los electrones al transportarse en el interior de la materia interactúan con el campo eléctrico de los electrones orbitales, del núcleo atómico o incluso con el átomo en sí mismo. A este tipo de interacción entre dos cuerpos se le denomina colisión, la cual queda determinada por la relación entre el parámetro de impacto b , y el radio atómico a :

- $b \gg a$, colisión suave
- $b \sim a$, colisión dura
- $b \ll a$, colisión radiativa

En el presente trabajo no hay conflicto entre la longitud de onda de la partícula incidente y el parámetro de impacto b , ya que la energía asociada a dicha longitud de onda de la partícula es lo suficientemente alta.

2.2.1. Colisión suave

Esta clase de colisión ocurre en el caso de que el parámetro de impacto sea mucho mayor que el radio atómico, en otras palabras, cuando el electrón se encuentra alejado del átomo tal como se observa en la figura 2.1. El electrón interactúa elásticamente o inelásticamente con el átomo completo y la pérdida de energía cinética del electrón es a través de una serie de colisiones distantes conforme se transporta en el medio.

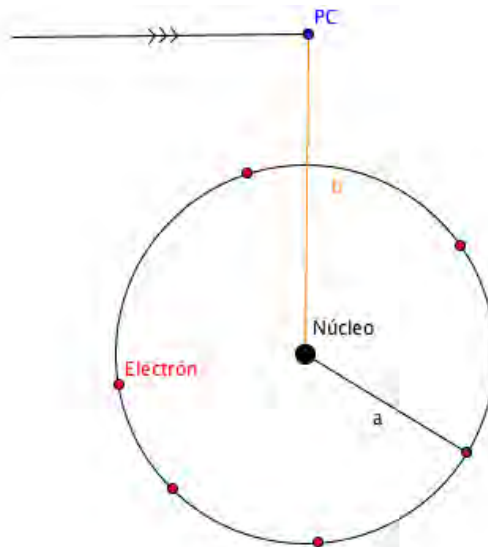


Figura 2.1: Partícula cargada interactuando por medio de la fuerza de Coulomb con un átomo a una distancia mucho mayor que el radio atómico ($b \gg a$).

2.2.2. Colisión dura

En una colisión dura, la distancia que separa la trayectoria del electrón con respecto al radio atómico es comparable (ver figura 2.2). La partícula cargada interactúa coulombianamente con los electrones orbitales del átomo, excitándolo o arrancando electrones de este último. Si un electrón es removido de las capas internas del átomo, da origen a la producción de rayos-x característicos [20].

Las colisiones duras tienen menor probabilidad de ocurrir que las del tipo suave. Sin embargo, la pérdida de energía cinética de la partícula cargada incidente es mayor en cada colisión dura, se estima que las partículas cargadas pierden alrededor del 50% [19] de su energía cinética inicial al tener una colisión dura con los átomos del material.

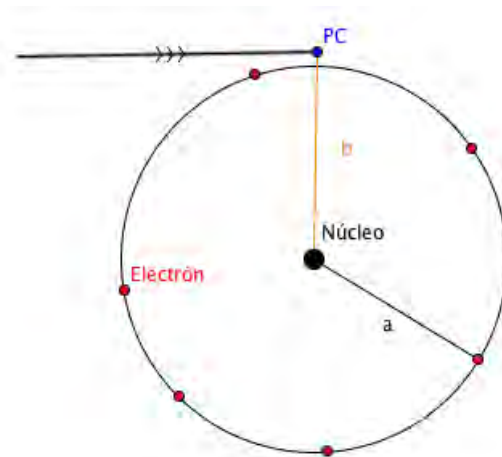


Figura 2.2: Interacción coulombiana entre una partícula cargada y los electrones orbitales del átomo. La distancia que separa la trayectoria del electrón con respecto al radio atómico es comparable ($b \sim a$).

2.2.3. Colisión radiativa

Esta colisión deriva en la emisión de rayos-x de frenado y sucede durante una interacción coulombiana entre la partícula cargada y el núcleo atómico (ver figura 2.3). En el 2%-3% de las ocasiones en que sucede esta colisión se da la emisión de un rayo-x de frenado [20].

La probabilidad de que ocurra la emisión bremsstrahlung es inversamente proporcional al cuadrado de la masa de la partícula incidente, por esto, fuera de electrones y positrones, la probabilidad de que partículas más pesadas emitan rayos-x de frenado es despreciable. También, dicha probabilidad de producción bremsstrahlung queda determinada por la energía cinética de la partícula cargada.

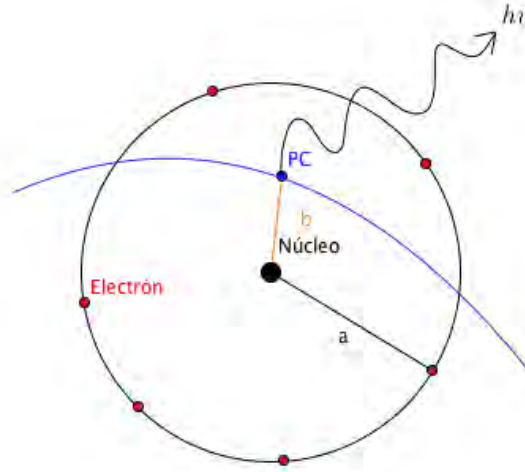


Figura 2.3: Emisión bremsstrahlung de una partícula cargada al interactuar coulombianamente con el núcleo atómico ($b \ll a$).

2.3. Poder de frenado lineal

2.3.1. Poder de frenado lineal de colisión

2.3.1.1. El modelo de Bethe

La pérdida de energía cinética del electrón a velocidades bajas se da mayormente por procesos de excitación y ionización que por emisiones radiativas [21]. Esta caracterización se determina a partir de la probabilidad de que se dé cierta interacción, mejor conocida como sección eficaz σ , sobre la cual se referirá posteriormente.

A la tasa de pérdida de energía por unidad de longitud recorrida por una partícula cargada en un medio en particular, se le conoce como poder de frenado lineal y tiene unidades de eV/nm . El poder de frenado lineal se escribe como

$$S = -\frac{dE}{dx}, \quad (2.1)$$

donde S es el poder de frenado lineal, dE es la diferencial de la pérdida de energía y dx es la diferencial de longitud que la partícula recorre. Además, si se considera la densidad del medio ρ , se obtiene el poder de frenado másico S/ρ , que tiene unidades de $eVcm^2/g$ y se expresa como

$$\frac{S}{\rho} = -\frac{dE}{\rho dx}. \quad (2.2)$$

2. CONCEPTOS BÁSICOS

El poder de frenado depende de las propiedades de la partícula cargada: carga y energía cinética, así como del material en el que se traslada: densidad y número de masa atómica. En resumen, el poder de frenado lineal es característico para cada material.

Se pueden considerar dos clases de poder de frenado:

- Poder de frenado de colisión: pérdida de energía por excitaciones o ionizaciones por unidad de longitud recorrida por la partícula incidente.
- Poder de frenado radiativo: pérdida de energía por emisión bremsstrahlung por unidad de longitud recorrida por la partícula incidente.

La descripción del poder de frenado lineal total S_{total} toma en cuenta la contribución de ambas clases, como se muestra en la ec. (2.3):

$$S_{total} = -\left\langle \frac{dE}{dx} \right\rangle_{col} - \left\langle \frac{dE}{dx} \right\rangle_{rad}, \quad (2.3)$$

donde $\langle dE/dx \rangle_{col}$ y $\langle dE/dx \rangle_{rad}$ son el poder de frenado de colisión y el radiativo, respectivamente. Bethe en 1930 [21, 22], propuso una ecuación para calcular el poder de frenado lineal de colisión tanto de partículas ligeras como pesadas, como el electrón y el protón, respectivamente [23]. El cálculo para electrones se muestra en la ec. (2.4):

$$S_{col} = -\frac{4\pi e^4 N Z}{m v^2} \ln\left[1.166 \frac{m v^2}{2I}\right], \quad (2.4)$$

tomando en cuenta que:

e es la carga del electrón,

m es la masa del electrón,

v es la velocidad del electrón,

Z es el número atómico del núcleo,

$N = \frac{N_a \rho}{A}$ es la densidad atómica,

N_a es el número de Avogadro,

ρ es la densidad del medio en g/cm^3 ,

A es el número de masa atómica del material,

I es potencial promedio de excitación/ionización.

El poder de frenado de Bethe tiene su base en la mecánica cuántica por medio de un tratamiento perturbativo dependiente del tiempo t en donde las probabilidades de transiciones electrónicas determinan los estados internos del blanco. El modelo de Bethe está basado en la descripción entre la interacción de la partícula incidente y los electrones orbitales atómicos, y como resultado de esta interacción existe una fracción de energía perdida por la partícula incidente. Esta aproximación considera a la función de onda

dispersada como una onda plana y es ligeramente diferente de la función de onda incidente.

Por medio de la aproximación de Born se obtiene la probabilidad de interacción entre un conjunto de partículas incidentes y los átomos de un medio, en otras palabras, se describe matemáticamente la sección eficaz [24].

El modelo de Bethe esencialmente utiliza esta sección eficaz definida para una pérdida de energía y la multiplica por la energía perdida y suma sobre todas las posibles pérdidas de energía. Como se muestra en la ec. (2.5):

$$\left\langle \frac{dE}{dx} \right\rangle_{col} = \frac{N_A \rho}{A} \sum_i \Delta E_i \sigma_i, \quad (2.5)$$

además, el modelo de Bethe, toma una serie de consideraciones para obtener la sección eficaz, detalladas enseguida [21]. La velocidad de la partícula es lo suficientemente alta comparada con la velocidad de los electrones orbitales de la capa K y su carga es pequeña en relación a la carga del núcleo atómico:

$$\frac{ze^2}{\hbar v} \ll 1,$$

donde ze es la carga de la partícula incidente y v es la velocidad de la partícula incidente. También, considera que la energía cinética de la partícula incidente es mucho mayor que el potencial de ionización de los electrones orbitales [21]:

$$\frac{E}{I} \gg 1.$$

En caso contrario, el modelo de Born no puede describir la interacción electrón - electrón orbital y como consecuencia, el modelo de Bethe no predice el comportamiento de los electrones a energías cinéticas comparables al potencial de ionización de un átomo en su capa más interna, en donde es mayor.

Por lo tanto, es necesario obtener un modelo que sí describa las interacciones a bajas energías y que considere la interacción con electrones orbitales a energías menores que el potencial de ionización en la capa K . Para ello es necesario obtener una sección eficaz que describa estas dispersiones inelásticas y se pueda determinar la pérdida de energía de los electrones incidentes. Este trabajo ofrece el camino libre medio inelástico para determinar las secciones eficaces asociadas a las interacciones descritas anteriormente.

Además, Bethe propuso una descripción relativista del poder de frenado lineal de colisión a partir de la sección eficaz de Møller en términos de $\beta = v/c$ y la energía cinética T del electrón [21] como

$$S_{col} = -\frac{2\pi e^4 N Z}{mv^2} \left[\ln \left[\frac{mv^2 T}{2I(1-\beta^2)} \right] - (2\sqrt{1-\beta^2} - 1 + \beta^2) \ln(2) + 1 - \beta^2 + \frac{1}{8}(1 - \sqrt{1-\beta^2})^2 \right], \quad (2.6)$$

por otro lado, si se considera la sección eficaz de Møller¹ para el caso relativista, la ec. de Bethe (ec. 2.4)

¹La sección eficaz de Møller toma en cuenta velocidades relativistas, efectos de espín y efectos de intercambio resultado de la indistinguibilidad del electrón incidente y el orbital [25].

2. CONCEPTOS BÁSICOS

se reescribe, como sugiere Evans [26] y como establece el reporte ICRU 37¹ [25], de la siguiente forma

$$S_{col} = \frac{0.153537\rho Z}{A\beta^2} \left(\ln\left(\frac{T}{I}\right)^2 + \ln\left[1 + \frac{T}{2m}\right] + F^- - \delta - \frac{2C}{Z} \right), \quad (2.7)$$

donde δ es la corrección por densidad, $-2C/Z$ es la corrección por capas y F^- se escribe como sigue

$$F^- = (1 - \beta^2) \left[1 + \frac{T^2}{8m^2} - \left(2\frac{T}{m} + 1 \right) \ln(2) \right].$$

La corrección por densidad tiene valores distintos de cero para energías mayores que la masa en reposo de la partícula (511 keV para el electrón) [20]. La corrección por capas considera la sub-estimación del poder de frenado de colisión para partículas cargadas con energías cinéticas bajas, en donde no se cumple la restricción de que la velocidad de la partícula incidente sea mucho mayor a la de un electrón orbital en la capa K .

El potencial promedio de excitación/ionización I , se obtiene al promediar la energía de excitación/ionización de cada capa que compone al átomo en cuestión [19, 27]. El cálculo del potencial promedio de excitación se realiza a partir del conocimiento de las frecuencias de absorción y tensiones de oscilación del medio, pero debido a la falta de información de estos datos su cálculo se realiza de forma empírica. De acuerdo con Podgorsak [19], la ecuación utilizada para su cálculo se describe como

$$I = 9.1Z + 17.29Z^{\frac{1}{3}}. \quad (2.8)$$

2.3.2. Poder de frenado radiativo

El poder de frenado radiativo a bajas energías tiene menos presencia, debido a que la pérdida de energía ocasionada por la interacción entre el electrón y el núcleo atómico tiene una menor probabilidad de ocurrir a bajas velocidades electrónicas. En este caso, el poder de frenado radiativo se calcula en la ec. (2.9) [19] como

$$S_{rad} = N\sigma_{rad}E_t = \frac{\alpha\rho r_e^2 Z^2 N_a E_t B_{rad}}{A}, \quad (2.9)$$

considerando:

N es la densidad atómica,

σ_{rad} es la sección eficaz de producción bremsstrahlung,

E_t es la energía total de la partícula.

α es la constante de estructura fina,

ρ es la densidad del medio en g/cm^3 ,

r_e es el radio clásico electrónico,

¹La ec. (2.7) es utilizada por el programa ESTAR (NIST).

N_a es el número de Avogadro,

Z es el número atómico del material,

A es el número de masa atómica del material,

B_{rad} es un parámetro definido como una constante con valor de $\frac{16}{3}$ a energías no relativistas.

2.4. La función dieléctrica compleja

La función dieléctrica compleja $\epsilon(\vec{q}, \omega)$ describe la respuesta electrónica del medio al interactuar con una onda electromagnética de frecuencia ω y vector de onda \vec{q} [28].

Si se considera el caso en el que $\vec{q} \rightarrow 0$, la función dieléctrica describe las excitaciones atómicas del mar de Fermi¹, así como las excitaciones superficiales y de plasmon² de volumen. En cambio, si la función dieléctrica no depende de la frecuencia de oscilación se describe el apantallamiento electrón-electrón, electrón-red y electrón-impureza en un cristal [29]. Este trabajo se centra en la descripción de las pérdidas de energía de los electrones libres al moverse en un medio material, es decir, en las interacciones inelásticas que produce el paso del electrón en el medio, por lo que la primera condición servirá para dichos propósitos.

La función dieléctrica consta de dos componentes, una real y una imaginaria (ec. 2.10):

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = \epsilon_1(\vec{q}, \omega) + i\epsilon_2(\vec{q}, \omega), \quad (2.10)$$

la componente real describe la polarización del medio como respuesta a la interacción con la onda electromagnética [30], mientras que la componente imaginaria está relacionada con la pérdida de energía. La función dieléctrica depende de la presión y la temperatura [31].

Además, estas componentes se describen en términos de los coeficientes reales de refracción (n) y extinción (k) [32]. Considerando el caso en que la longitud de onda de la onda incidente es grande³ (en el límite óptico), entonces $\vec{q} \rightarrow 0$ y la función dieléctrica depende solamente de la frecuencia. Tomando en cuenta estos puntos, las componentes de la función dieléctrica compleja se expresan en las ecs. (2.11a) y (2.11b) como

$$\epsilon_1(\omega) = n^2(\omega) - k^2(\omega), \quad (2.11a)$$

$$\epsilon_2(\omega) = 2n(\omega)k(\omega). \quad (2.11b)$$

Se utilizan diversos experimentos para determinar la función dieléctrica compleja. Generalmente, se obtienen los coeficientes de refracción y extinción ópticos a través de interferometría, medición de transmitancia en películas de diferentes grosores y medición de refracción [33]. “The handbook of optical

¹Electrones que no interactúan entre sí que conforman el estado base del sistema.

²Un plasmón es el cuanto de oscilación de plasma; excitaciones colectivas longitudinales [29].

³Relativo a las dimensiones atómicas.

2. CONCEPTOS BÁSICOS

constants” [33] provee un compendio de estos coeficientes, obtenidos de diversos experimentos para elementos y compuestos en rangos de energía variables.

Debido a que a bajas frecuencias las interacciones predominantes entre la onda incidente y el átomo son foto-absorción y dispersión Compton [34], es más preciso tomar datos experimentales derivados de factores de dispersión atómicos a bajas energías dada la precisión con la que describen los fenómenos previamente mencionados.

2.4.1. Función dieléctrica compleja de Lindhard

Esta función representa un caso particular para expresar matemáticamente la función dieléctrica compleja en un gas homogéneo de electrones. La función dieléctrica de Lindhard está basada en la mecánica cuántica utilizando la “Random-Phase Approximation” (RPA). En términos generales, la RPA modela la interacción del electrón incidente con el campo eléctrico promedio generado por los electrones del medio. Dicha aproximación es considerada de largo alcance y no toma en cuenta los efectos de intercambio por su carácter predominante en el corto alcance [9]. Además, el modelo dieléctrico de Lindhard considera en su expresión el vector de onda \vec{q} y no diverge cuando la frecuencia ω tiende a cero [30]. La función dieléctrica de Lindhard se denota como sigue (ec. 2.12) [35]

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_p(q)^2 - \omega_p^2 - \omega(\omega + i\gamma_q)}, \quad (2.12)$$

donde

$$\omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{m\epsilon_0}}, \quad (2.13)$$

$$\omega_p(q)^2 = \omega_p^2 + \frac{1}{3}[v_F(\omega_p)q]^2 + (\hbar q^2/2m)^2, \quad (2.14)$$

N es la densidad atómica, e la carga del electrón, m la masa del electrón, ϵ_0 la constante dieléctrica en el vacío, ω_p es la frecuencia de oscilación del plasma producto de la perturbación del estado meta-estable del sistema, $\omega_p(q)$ es la relación de dispersión que satisface la onda incidente al interactuar con el medio, v_F es la velocidad de Fermi, q es la magnitud del vector de onda \vec{q} asociado a la transferencia de momento¹, m es la masa del electrón y γ_p es la constante de amortiguamiento que describe la frecuencia de colisión de los electrones orbitales.

2.5. Factor de dispersión atómica

El factor complejo de dispersión atómica (ver ec. 2.15) se define como el parámetro por el cual se multiplica la amplitud de la onda electromagnética dispersada por un solo electrón atómico para determinar la amplitud total de la onda dispersada por el átomo (ver figura 2.4).

¹De acuerdo con De Broglie, se puede relacionar el vector de onda y el momento de una onda-partícula cuántica a través de \hbar .

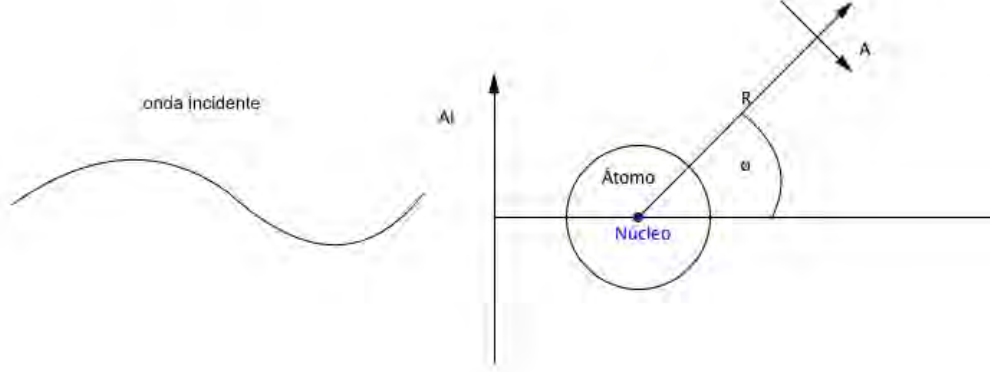


Figura 2.4: La onda incidente es mucho mayor que el radio atómico. A_i representa la amplitud inicial, A la amplitud de la onda dispersada por el átomo.

Además, este factor de dispersión atómica está compuesto de una componente real y una componente imaginaria, como sucede en el caso de la función dieléctrica. Se expresa en componentes como

$$f = f_1 + if_2, \quad (2.15)$$

donde la componente real f_1 está relacionada con la dispersión de los fotones y se asocia directamente con la amplitud de onda dispersada por un sólo electrón atómico como si éste fuera libre. Conforme la energía del fotón aumenta, f_1 tiende a Z , es decir, el átomo dispersa al fotón como si todos sus electrones fueran libres. Por otro lado, la componente imaginaria f_2 es el término asociado a la absorción del fotón incidente [28].

La representación matemática del factor de dispersión complejo en términos de la amplitud de onda dispersada se describe en la ec. (2.16) [34]

$$A = A_i \frac{r_e}{R} P(\phi) f, \quad (2.16)$$

donde A es la amplitud de la onda electromagnética dispersada por el átomo, A_i es la amplitud de la onda electromagnética dispersada por un electrón orbital, r_e representa el radio clásico electrónico ($e^2/4\pi\epsilon_0 mc^2$), R es la distancia del átomo al punto de observación, $P(\phi)$ es el factor de polarización y f es el factor de dispersión atómica [34].

Para longitudes de onda mucho mayores que el radio atómico o para ángulos de dispersión muy pequeños, se considera que los factores de dispersión atómicos pueden relacionarse con una descripción óptica electromagnética (OEM) para predecir la dispersión, es decir, la interacción entre los fotones y la materia puede describirse por medio de constantes ópticas como el índice de refracción complejo N_r , como se muestra en la ec. (2.17)

$$N_r = 1 - \delta + i\beta, \quad (2.17)$$

donde δ y β se definen como

$$\delta = \frac{N_a r_e \lambda^2 f_1(\omega)}{2\pi}, \quad (2.18a)$$

$$\beta = \frac{N_a r_e \lambda^2 f_2(\omega)}{2\pi}. \quad (2.18b)$$

El coeficiente $\delta = 1 - n$, es el índice de decremento de refracción, y como se puede observar está asociado al índice de refracción n , β es igual al coeficiente de extinción k , N_a es el número de Avogadro, r_e es el radio clásico del electrón y λ es la longitud de la onda incidente. Asimismo, Henke y col. calcularon los índices de decremento de refracción y de extinción por medio de datos experimentales de foto-absorción [36].

A partir de factores de dispersión atómicos, que consideran la interacción fotón - electrón de manera individual sin tomar en cuenta el sistema como un condensado, se puede describir adecuadamente la interacción total entre fotones y el medio. Posteriormente, se toman en cuenta las amplitudes de las ondas electromagnéticas dispersadas individualmente y se suman vectorialmente para contabilizar la contribución total del medio. El NIST [37] y Henke y col. han contribuido al cálculo de los factores atómicos de dispersión f_1 y f_2 para 92 elementos a partir de datos de foto-absorción experimentales [34, 38].

2.6. Función de pérdida de energía

La función de pérdida de energía describe la probabilidad de dispersión inelástica y la distribución de pérdida de energía, producto de la interacción de una onda electromagnética con el medio. Esta función es fundamental para el cálculo del camino libre medio inelástico, debido a que determina la energía cinética que pierde una partícula cargada incidente al interactuar inelásticamente con los átomos del material, en función de la respuesta de este. Dicho esto, se puede deducir la función de pérdida de energía partiendo de la función dieléctrica. Se debe considerar el inverso de la función dieléctrica y separarse en componentes, como se muestra a continuación

$$\frac{-1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} = \frac{-1}{\epsilon_1 + i\epsilon_2}, \quad (2.19)$$

multiplicando por el conjugado complejo se tiene

$$\frac{-1}{\epsilon_1 + i\epsilon_2} = \frac{-\epsilon_1 + i\epsilon_2}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}, \quad (2.20)$$

y se separa por componente real e imaginaria

$$\mathbf{Re}\left[\frac{-1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)}\right] = \frac{-\epsilon_1}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}, \quad (2.21a)$$

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)}\right] = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}, \quad (2.21b)$$

donde la ec. (2.21b) es la función de pérdida de energía.

Anteriormente, se explicó que si el ángulo de dispersión del fotón dispersado era pequeño entonces se puede adoptar una descripción de la interacción por medio de factores ópticos electromagnéticos, como lo es el índice de refracción complejo [34]. La función de pérdida de energía se puede obtener con modelos aproximados, por medio de espectros de pérdida de energía o a través de datos ópticos. Para el cálculo por medio de datos ópticos se pueden utilizar las ecs. (2.11a) y (2.11b) para conectar los coeficientes de refracción y extinción con la función de pérdida de energía (ver ec. 2.21b) como se observa

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(0, \omega)}\right] = \frac{2nk}{(n^2 - k^2)^2 + (2nk)^2}, \quad (2.22)$$

la ec. (2.22) se utilizará en este trabajo para el cálculo de la función de pérdida de energía. Además, la ec. (2.22) para el caso de los materiales del tipo “electrones libres”, como los metales, deberían mostrar un máximo absoluto cerca de $\omega = \omega_p$ [18, 39]. Esta condición implica un aumento en la probabilidad de dispersión cuando la frecuencia de la onda incidente es igual a la frecuencia de plasma. Del mismo modo, para materiales no metálicos, la ec. (2.22) muestra diversos máximos locales que corresponden a un incremento en la probabilidad de dispersión inelástica y están relacionados con procesos como la oscilación de plasma o la formación de cuasi-partículas ligadas (excitones), como el par electrón-hueco.

2.6.1. Función de pérdida de energía de Lindhard

Considerando la función dieléctrica de Lindhard (ec. 2.12) derivada en la sección anterior para todo momento q y frecuencia ω , se expresa la función de pérdida de energía de Lindhard a continuación¹

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] = \frac{\omega\gamma_q\omega_p^2}{[\omega^2 - \omega_p(q)^2]^2 + \omega^2\gamma_q^2}, \quad (2.23)$$

donde ϵ_L es la función dieléctrica de Linhard, ω_p es la frecuencia de plasma, $\omega_p(q)$ es la frecuencia de plasma dependiente del momento (relación de dispersión, ver ec. 2.14) y γ_q es la constante de amortiguamiento. La ec. (2.23) se utilizará en las siguientes secciones.

2.7. IMFP - Camino libre medio inelástico

El camino libre medio inelástico (IMFP, por sus siglas en inglés) es el producto de excitaciones y ionizaciones atómicas debido a la interacción de una partícula incidente con los electrones orbitales del medio.

¹Desarrollo matemático de ec. (2.12) a ec. (2.23) en apéndice B.2.

2. CONCEPTOS BÁSICOS

Si se considera un conjunto N de electrones orbitales que conforman un átomo dado, el estado base del sistema está conformado por dichos electrones en orbitales ocupados dentro de una esfera, conocida como la esfera de Fermi. La energía en la superficie de esta esfera es conocida como la energía de Fermi E_F y se puede representar en términos de la magnitud del vector de onda \vec{k}_F . Cualquier partícula que ocupe un orbital dentro de dicha esfera de Fermi tendrá una velocidad directamente relacionada con la magnitud del vector de onda \vec{k} . Por otro lado, dentro del marco de la dualidad onda - partícula, De Broglie propuso una relación entre el vector de onda \vec{k} de una onda y el momento asociado a una partícula cuántica. Entonces, la velocidad de un electrón en un orbital del átomo queda determinada en función del momento. Para las partículas en la superficie de Fermi, su momento es conocido como el momento de Fermi p_F ¹ [29].

Considerando una partícula incidente con cierta energía E y momento $p_1 > p_F$ que interacciona con dicho átomo en el estado base, puede transferir cierto momento a cualquier electrón de la superficie de Fermi, de tal forma que el momento del electrón orbital sea $p_2 > p_F$ y como consecuencia, sea removido de la esfera de Fermi. De esta forma, al interaccionar la partícula incidente con el medio, transfiere parte de su energía produciendo pares excitados: el hueco con carga positiva, producido por la ausencia del electrón orbital en el átomo, y la partícula ionizada [40].

Existen tres procesos relacionados con la creación de pares excitados [40]:

1. **Pares simples excitados:** corresponde a la creación de un solo par de partícula y hueco.
2. **Múltiples pares excitados:** formación mayor que dos pares simples excitados.
3. **Colectivos excitados:** creación de pares excitados de orden N .

Posteriormente, al moverse una partícula en un mar de plasma, como se nombrará al sistema con igual densidad de electrones y huecos, tiende a perturbarlo, moviendo al par electrón-hueco de su posición inicial. Como consecuencia, el par es perturbado por los pares a su alrededor, actuando como fuerza restitutiva, y el electrón vuelve a su posición original. Debido al alcance infinito de la fuerza de Coulomb, el electrón tiende a perturbar continuamente a este par y éste tiende a volver a su posición de equilibrio, oscilando. Así, el IMFP resulta ser la distancia promedio recorrida por dicha partícula de cierta energía cinética entre colisiones inelásticas [41].

Los valores del IMFP pueden derivarse a partir de cálculos teóricos, como es el caso de este trabajo, utilizando datos ópticos experimentales para construir la función de pérdida de energía o determinarse a partir de métodos experimentales tales como película superpuesta y la retrodispersión elástica de electrones. El método de película superpuesta consiste en colocar una película sobre un sustrato de grosor variable y se realizan mediciones de la intensidad de electrones Auger o foto-electrones producidos como función del ángulo de dispersión y del grosor de la película [41]. El método de retrodispersión elástica de electrones consiste en medir el coeficiente de refracción de un haz de electrones de cierta energía que incide sobre una superficie, tomando como referencia una superficie de distinto material de conocido IMFP. Se supone que el material es amorfo o policristalino para desprestigiar efectos de difracción [42]. Powell [42] y Jablonski [43], entre otros, han trabajado con este método. Esta tesis presenta el cálculo de camino libre

¹En el caso de omitir la “ \rightarrow ” sobre la variable se está refiriendo a la magnitud del vector.

medio inelástico utilizando datos ópticos experimentales, a continuación se describirá el procedimiento teórico necesario para este cálculo.

2.7.1. El algoritmo simple de Penn

El cálculo de camino libre medio inelástico utilizando el algoritmo simple de Penn se lleva a cabo por medio de una aproximación estadística derivada por Lindhard¹. En dicha aproximación, para un medio condensado, se considera que los electrones incidentes son dispersados por un gas de electrones en un elemento de volumen d^3r , donde la densidad de electrones $n(r)$ es variable. Se toma el inverso del IMFP λ_L^{-1} en el gas de electrones y se integra sobre todo el volumen del medio. Como se muestra en la ec. (2.24):

$$\lambda^{-1}(k) = \int \frac{\lambda_L^{-1}(k)}{\Omega} d^3r, \quad (2.24)$$

donde Ω es la celda de volumen de Wigner-Seitz, λ_L es el camino libre medio inelástico recorrido en un gas de electrones libres por una partícula con número de onda k y λ es el IMFP recorrido por la partícula incidente en el sólido. λ_L se define en la ec. (2.25) como

$$\lambda_L(k) = \frac{\hbar k}{m} \left[\frac{\hbar}{2|\Delta E(k)|} \right], \quad (2.25)$$

m representa la masa del electrón y $\Delta E(k)$ es la componente imaginaria de la “auto-energía” encontrada por Quinn [44] y se escribe como

$$\Delta E(k) = \frac{e^2}{2\pi^2} \int_0^{E-E_F} d(\hbar\omega) \int \frac{1}{q^2} \mathbf{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)} \right] \delta(\hbar\omega - E + E_{k-q}) d^3q, \quad (2.26)$$

donde e es la carga del electrón, E_F es la energía de Fermi, q es el número de onda asociado a la transferencia de momento y $\mathbf{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)} \right]$ es la función de pérdida de energía en términos de la función dieléctrica. La condición $\hbar\omega = E - E_{k-q}$, en la delta de Dirac, describe el proceso de colisión del electrón libre. E representa la energía cinética inicial del electrón y E_{k-q} es la energía cinética remanente del electrón, por lo que $\hbar\omega$ es la energía cinética perdida por el electrón. La “auto-energía” es consecuencia de la interacción coulombiana entre el electrón incidente y el medio. El electrón polariza el medio a través del campo eléctrico generado por su carga intrínseca y a su vez la repulsión con los electrones orbitales del medio es alterada. La polarización generada por el propio electrón modifica la forma en que el medio actúa sobre él, modificando su energía finalmente [44].

En relación con la ec. (2.26), Penn describe la función de pérdida de energía para cualquier compuesto, considerando aquellos que no son gases de electrones, como los aislantes, en términos de la función de pérdida de energía de Lindhard para un gas de electrones. Físicamente se describe al medio como un conjunto de “particiones” de volumen $\int d^3r$ en las cuales la respuesta del medio a la interacción con

¹Para un desarrollo completo ver el apéndice B.3.

2. CONCEPTOS BÁSICOS

una onda electromagnética incidente es modelada como un gas de electrones libres. Matemáticamente se describe como [18]

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)}\right] = \int \frac{1}{\Omega} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, E(k) - E(k - q))}\right] d^3r, \quad (2.27)$$

$E(k) = E$ es la energía de la partícula antes de la colisión y $E(k - q) = E_{k-q}$ es su energía posterior a la colisión. Considerando el límite óptico $q \rightarrow 0$ en la ec. (2.27), la aproximación de Tung [45] para modificar la variable de integración r en términos de la frecuencia de plasma (ver apéndice B.3) que en última instancia depende de r y utilizando las propiedades de la delta de Dirac (ver apéndice B.1), se escribe la ec. (2.27) de la función de pérdida de energía en términos de la función de pérdida de energía experimental, resultando en

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)}\right] = \int_0^\infty G[\omega_p(r)] \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] d\omega_p(r), \quad (2.28)$$

donde $\omega_p(r)$ es la frecuencia de plasma en función de r , ϵ_L es la función dieléctrica de Lindhard y

$$G[\omega_p(r)] = \frac{2}{\pi\omega_p(r)} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega)}\right]. \quad (2.29)$$

En el algoritmo de Penn se toma este parámetro $G[\omega_p(r)]$ para obtener la función de pérdida de energía a partir de datos ópticos experimentales, siendo este el gran aporte de Penn; manipular la función dieléctrica de Lindhard para un gas de electrones libres y aproximarla a la función dieléctrica con transferencia de momento cero, adaptada para cualquier elemento o compuesto.

La ec. (2.26) se rescribe en términos de la función de pérdida de energía de Lindhard y la función de pérdida de energía experimental, así como la integral de transferencia de momento se reescribe (ver apéndice B.3) utilizando una integral angular que involucra el ángulo entre el vector de onda \vec{k} (antes de la colisión) y el vector \vec{q} (posterior a la colisión). Tomando en cuenta estas consideraciones se tiene

$$\Delta E(k) = \int_0^\infty d\omega_p(r) G[\omega_p(r)] \frac{1}{\pi a_0 k} \int_0^{E-E_F} d(\hbar\omega) \int_{q^-}^{q^+} \frac{dq}{q} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right], \quad (2.30)$$

donde a_0 es el radio de Bohr, k es la magnitud del vector de onda \vec{k} y

$$q^\pm = k[1 \pm \sqrt{1 - (\hbar\omega/E)}]. \quad (2.31)$$

La ec. (2.30) es conocida como la aproximación completa de Penn (FPA), donde la integración se hace sobre la energía, la frecuencia de plasma dependiente de la variabilidad de la densidad electrónica y la transferencia de momento. Por otro lado, para simplificar los cálculos Penn propone una aproximación simple de su método, aproximación conocida como el algoritmo simple de Penn o polo simple [12]. De acuerdo con Penn, esta relación arroja empíricamente los mismos resultados en el cálculo del camino libre medio inelástico que la FPA para energías cinéticas superiores a 200 eV, con una diferencia porcentual del 3%. Además, esta aproximación consiste en simplificar la función dieléctrica de Lindhard y reescribirla en términos de la frecuencia de plasma $\omega_p(r)$ y la frecuencia de plasma asociada a la transferencia de momento $\omega_p(q)$ como

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] = \frac{\pi \omega_p^2(r)}{2 \omega_p(q)} \delta(\omega - \omega_p(q)), \quad (2.32)$$

entonces la FPA se simplifica en

$$\Delta E(k) = \frac{1}{2\pi a_0 k} \int d[\hbar\omega_p(r)] \mathbf{Im}\left\{\frac{1}{\epsilon[\omega_p(r)]}\right\} \times \ln\left[\frac{\bar{\omega}_p + \bar{\omega}_p(q)}{\bar{q}^2} + \frac{2}{3\bar{\omega}_p}\right] \Bigg|_{\bar{q}_2}^{\bar{q}_1}, \quad (2.33)$$

donde

- $\bar{\omega}_p = \omega_p/E_F$.
- $\bar{q} = q/p_F$, p_F es el momento de Fermi.
- $\bar{\omega}_p(q)^2 = \bar{\omega}_p^2 + \frac{4}{3}\bar{q}^2 + \bar{q}^4$.
- \bar{q}_1 y \bar{q}_2 dependen de $\bar{\omega}_k$ y toman sus valores de la intersección con las regiones $\bar{\omega} < 2\bar{k}\bar{q} - \bar{q}^2$ y $\bar{\omega} \geq \bar{k}^2 - 1$.
- v_f es la velocidad de Fermi.

Físicamente, este algoritmo describe la interacción entre electrones libres y el medio. Esta interacción involucra colisiones con los electrones orbitales y también con electrones de capas más internas, a diferencia de la ec. (2.4) derivada por Bethe, donde las interacciones con capas internas no son tomadas en cuenta a bajas energías. El método de Penn involucra excitaciones con los electrones de valencia y con electrones de capas internas [41]. Los métodos de Penn, tanto la FPA como el simple, dependen de tres aspectos:

- Valores experimentales para la función de pérdida de energía.
- Conocimiento de la energía de Fermi del elemento.
- Estructura de bandas como en elementos de electrones libres, por encima de la energía de Fermi.

También, es importante enfatizar que el algoritmo de Penn expresado en las ecs. (2.30) y (2.33) está basado implícitamente en la aproximación de Born, por lo que no incluye efectos de intercambio o de correlación [18].

2.7.2. Función de excitación de Ding y Shimizu

La función de excitación de Ding y Shimizu¹ [35] describe adecuadamente la dispersión inelástica de un electrón al viajar dentro de un medio y se obtiene a partir del algoritmo simple de Penn, descrito en la sección anterior. Sin embargo, a diferencia de Penn, Ding no usa el parámetro de auto-energía de Quinn sino la sección eficaz para la dispersión inelástica del electrón, propuesta por Pines y Nozière [40]:

¹Para una derivación más completa ver apéndice B.4.

2. CONCEPTOS BÁSICOS

$$\frac{d^2\lambda^{-1}}{d(\hbar\omega)dq} = \frac{1}{\pi a_0 E} \mathbf{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)} \right] \frac{1}{q}, \quad (2.34)$$

donde los parámetros involucrados se definieron previamente. Posteriormente se considera la integración sobre la transferencia de momento y la función de paso $\Theta(x)$. Esta función de paso toma en cuenta la transferencia de energía pérdida por una partícula cargada en una colisión inelástica: $\hbar\omega = E - E_{k-q}$. La ec. (2.34) se escribe como [12, 35]

$$\frac{d\lambda^{-1}}{d(\hbar\omega)} = \int_0^\infty \frac{1}{\pi a_0 E} \mathbf{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)} \right] \frac{dq}{q} \Theta \left[\frac{\hbar}{2m} (2kq - q^2) - \omega \right], \quad (2.35)$$

donde $\Theta(x)$ vale uno si $x > 0$ y vale cero si $x < 0$. Las ecs. (2.28), (2.29) y (2.32) se utilizan para reescribir la función de pérdida de energía como

$$\frac{d\lambda^{-1}}{d(\hbar\omega)} = \frac{1}{\pi a_0 E} \int_0^\infty \omega_p \mathbf{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(\omega_p)} \right] d\omega_p \int_0^\infty \frac{dq}{q\omega_p(q)} \delta(\omega - \omega_p(q)) \Theta \left[\frac{\hbar}{2m} (2kq - q^2) - \omega \right], \quad (2.36)$$

en este caso la frecuencia de plasma ω_p se obtiene a partir de la función de dispersión $\omega_p(q)$ [ver ec. (2.14)] con el fin de relacionar la función de pérdida de energía $\mathbf{Im}[-1/\epsilon(\omega)]$ con la dependencia de la transferencia de momento distinto de cero y la transferencia de energía. Al resolver la ec. (2.14) de dispersión, ω_p es variable, para ser precisos, depende de la energía del electrón incidente, la transferencia de energía y la transferencia del momento. A diferencia del algoritmo simple de Penn ω_p no depende de una densidad electrónica variable $n(r)$.

Posteriormente, se utilizan las propiedades de la delta de Dirac (ver apéndice B.1) para desarrollar la ec. (2.36). La función de excitación, ec. (2.34), se escribe finalmente como

$$\frac{d\lambda^{-1}}{d(\hbar\omega)} = \frac{1}{\pi a_0 E} \int_0^\infty \frac{\hbar\omega_p}{(\hbar\omega)^2 - (\hbar\omega_p)^2 + \left[\frac{(\hbar q)^2}{2m}\right]^2} \mathbf{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(\omega_p)} \right] d(\hbar\omega_p) \Theta \left[\frac{\hbar}{2m} (2kq - q^2) - \omega \right]. \quad (2.37)$$

En este trabajo se integra la función de excitación (ec. (2.37)) para el cálculo del IMFP con respecto a la pérdida de energía $\Delta E = \hbar\omega$ [12, 35]:

$$\lambda^{-1} = \int_0^{E-E_F} \frac{d\lambda^{-1}}{d(\Delta E)} d(\Delta E), \quad (2.38)$$

asimismo, para el poder de frenado lineal, la ecuación asociada está dada por

$$-\frac{dE}{dx} = \int_0^{E-E_F} \Delta E \frac{d\lambda^{-1}}{d(\Delta E)} d(\Delta E). \quad (2.39)$$

2.8. Sección eficaz

La sección eficaz diferencial describe la probabilidad de interacción entre el electrón y el medio [41] en función de la energía y se escribe como

$$\frac{d^2\sigma}{d(\hbar\omega)dq} = \frac{1}{\pi N a_0 E} \mathbf{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)} \right] \frac{1}{q}, \quad (2.40)$$

donde a_0 es el radio clásico de Bohr y N es el número de átomos/molécula por unidad de volumen, los parámetros restantes se han definido previamente. Comparando directamente la ec. (2.40) con la ec. (2.34), se observa que se cumple [41]

$$\sigma = (N\lambda)^{-1}. \quad (2.41)$$

La ec. (2.41) se utiliza en este trabajo para el cálculo de la sección eficaz.

2.9. Reglas de auto-consistencia

Las relaciones matemáticas son herramientas útiles que ayudan a modelar la interacción entre la radiación electromagnética y la respuesta del medio. A través de estas relaciones matemáticas es posible evaluar los datos recabados experimentalmente para la construcción de la función de pérdida de energía. Producto de estas evaluaciones se determina si los datos recabados modelan consistentemente la interacción entre la radiación incidente y el medio.

2.9.1. f-sum

La f-sum o regla de suma de Bethe, se denomina así puesto que está relacionada con la tensión de oscilación generalizada (GOS, por sus siglas en inglés¹) y esta se describe habitualmente por la letra $f(q, \omega)$, que depende de la frecuencia ω y el momento asociado al número de onda q transferido de una onda incidente al interactuar con el medio. La GOS describe la probabilidad de transición entre niveles energéticos de un átomo o molécula y está relacionado con la absorción o emisión electromagnética derivada de esta transición [46], además está asociada al número de electrones por átomo que participan en la respuesta a partículas incidentes. Por lo que la denominación de “suma”, se debe a que la contribución de todas las transiciones probables es igual al número de electrones orbitales que pueden participar en la interacción con la partícula incidente. Aunque, es más conveniente describir la GOS de forma diferencial $df(q, \omega)$ por unidad de frecuencia o energía pérdida $d\omega$ en forma integral.

De acuerdo con Bethe, considerando la GOS diferencial sobre todo el intervalo de energía transferida de la partícula incidente (para todo vector de onda q constante), se puede estimar el número atómico como [47, 48]

¹Generalized oscillator strength.

$$\int_0^{\infty} \frac{df(q, \omega)}{d\omega} d\omega = Z, \quad (2.42)$$

donde Z es el número atómico del átomo completo. También, la GOS diferencial se puede relacionar con la función de pérdida de energía como [33, 47, 48]

$$\frac{df(q, \omega)}{d\omega} = \frac{2\omega}{\pi\omega_p^2} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)}\right], \quad (2.43)$$

donde ω es la frecuencia de la onda incidente, $\omega_p^2 = Ne^2/\epsilon_0 m$ es la frecuencia de plasma, $\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)}\right]$ es la función de pérdida de energía y $\epsilon(q, \omega)$ es la función dieléctrica. La ec. (2.42) se escribe en términos de la función de pérdida de energía en el límite óptico $q \rightarrow 0$ y utilizando la ec. (2.43) se obtiene [33, 47, 48]

$$Z = -\frac{2}{\pi\omega_p^2} \int_0^{\omega} \omega \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega)}\right] d\omega, \quad (2.44)$$

la evaluación de la integral en la ec. (2.44) determina el número de electrones que participan en la dispersión inelástica [49], por lo que se espera que conforme la energía de la onda incidente sea mayor, el número de electrones que participen en el proceso aumente, y tienda al número atómico teórico. Dicho valor teórico se considera como la referencia, a la que debe aproximarse la evaluación de la función de pérdida de energía experimental utilizada en este trabajo. La ec. (2.44) se utilizó en este trabajo para la evaluación de los datos recabados.

De lo observado, en diversas evaluaciones realizadas por distintos autores, la evaluación de la integral tiene una fuerte influencia de datos ópticos en un rango de energía de 50 eV en adelante [6].

2.9.2. Suma de Kramers-Kronig (kk-sum)

Las relaciones de Kramers-Kronig (KK) conectan las componentes real e imaginaria de una función compleja. En este caso, se interpretan como la evaluación sobre la correcta emulación de los datos del medio como un dispersor, es decir, si representan la dispersión a bajas frecuencias como respuesta del medio a la onda incidente adecuadamente o no. Estas relaciones están fundamentadas en expresiones puramente matemáticas. En particular, se utiliza el teorema integral de Cauchy, el cual establece que la integral de línea de una trayectoria cerrada de una función analítica es cero [50]. Producto de este teorema, se calcula la componente real de una función compleja en términos de la componente imaginaria¹ como [51]

$$1 - \mathbf{Re}\left[\frac{1}{\epsilon(\omega)}\right] = \frac{2}{\pi} \mathbf{P} \int_0^{\infty} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega')}\right] \frac{\omega' d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}, \quad (2.45)$$

donde ω' es un “polo” en la función y representa la frecuencia de oscilación transferida de la onda incidente, pero se utiliza dicha nomenclatura para evitar el abuso de notación, \mathbf{P} es el valor principal de Cauchy y los parámetros restantes se han definido previamente. En el límite de bajas frecuencias ($\omega \rightarrow 0$) se obtiene [52]

¹Para un desarrollo matemático completo, ver apéndice B.5.

$$1 = \frac{2}{\pi} \int_0^\omega \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega')}\right] \frac{d\omega'}{\omega'} + \mathbf{Re}\left[\frac{1}{\epsilon(0)}\right], \quad (2.46)$$

en este régimen de energías, la componente ϵ_2 de la función dieléctrica tiende a cero ya que $k \rightarrow 0$ [33], y la componente real del inverso de la función dieléctrica se escribe en la ec. (2.47) [33]:

$$\mathbf{Re}\left[\frac{1}{\epsilon(0)}\right] = \frac{1}{\epsilon_1(0)} = \frac{1}{n^2(0)} = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\omega \omega^{-1} k(\omega) d\omega, \quad (2.47)$$

por medio de la ec. (2.46) se evalúan los datos ópticos experimentales utilizados para la construcción de la función de pérdida de energía, suponiendo que el valor final de dicha evaluación tiende a 1 [4, 6, 17].

Caso contrario a la f-sum, la kk-sum es fuertemente influenciada por los datos ópticos obtenidos en un rango de 2 eV-50 eV [6].

2.10. Materiales dosimétricos

Durante los últimos 40 años, la dosimetría termoluminiscente (TL) ha jugado un papel principal en varios campos, tal es el caso de la vigilancia radiológica de personal que trabaja cerca de fuentes de radiación ionizante [53], la radioterapia, el radiodiagnóstico y la medicina nuclear [54]. Estas aplicaciones se derivan de observaciones, investigación y análisis llevados a cabo a través de años de trabajo científico; desde que Becquerel observó en 1899 la respuesta TL del fluoruro de calcio (CaF_2) al ser irradiado con radio, así como la investigación de radiación con fotones en fluoruro de litio (LiF) llevada a cabo por la Universidad de Wisconsin en E.E.U.U. en la década de los cincuenta. Y finalmente, varios autores que señalaron que los rubies y zafiros (Al_2O_3) eran materiales útiles como dosímetros TL desde los años sesenta [55, 56]. La dosimetría es una herramienta esencial para la cuantificación del depósito de energía debido a la radiación ionizante de rayos-x, rayos-gamma, partículas beta y protones.

2.10.1. Características generales del LiF - fluoruro de litio

El fluoruro de litio es un material ampliamente utilizado como dosímetro. Su uso comenzó después de la segunda guerra mundial en la Universidad de Wisconsin en los E.E.U.U. [54]. Es utilizado porque puede ser producido en diversas versiones: dopado con titanio y magnesio (LiF:Ti,Mg) conocido como TLD¹-100 [53], dopado con magnesio, cobre y fósforo (LiF:Mg,Cu,P) conocido como TLD-100H [53], o enriquecido con Li^6 ($^6\text{LiF:Ti,Mg}$) conocido como TLD-600 [53, 57] y enriquecido con Li^7 ($^7\text{LiF:Ti,Mg}$) conocido como TLD-700. Estas versiones muestran un amplio rango de energías en las que pueden utilizarse, alta sensibilidad a bajas dosis y muy poco desvanecimiento sobre el paso del tiempo [53]. Además, se utiliza bastante por su número atómico efectivo ($Z_v = 8.14$) que, por un lado, lo hace tejido equivalente y, por otro lado, le da independencia a la respuesta TL con la energía [54]. El fluoruro de litio tiene un bandgap de 14.3 eV [58], un ancho de 6.1 eV de la banda de valencia [11] y una energía de Fermi de 15 eV [6].

¹Dosímetro termoluminiscente.

2.10.2. Características generales del H₂O - agua líquida

Este material es empleado como maniquí debido a su fácil uso, además, es un material de referencia para distintos protocolos dosimétricos [59] debido a su número atómico efectivo alrededor de 7.5, que lo convierte en tejido equivalente. Por su estado líquido y por sus propiedades químicas, el agua líquida no puede ser utilizada como TLD. Sin embargo, en su estado líquido funciona perfectamente para las necesidades requeridas. Sus aplicaciones están plasmadas en biología, específicamente en dosimetría celular y sub-celular, no hay que olvidar que cerca del 70% de una célula es agua líquida, por lo que utilizar este compuesto como material de referencia dosimétrico es de completa utilidad. El agua líquida tiene un bandgap de 8.2 eV, una afinidad electrónica de 6.45 eV [60] y una energía de Fermi de 15 eV [7].

2.10.3. Características generales del CaF₂ - fluoruro de calcio

El fluoruro de calcio es un compuesto que ha sido utilizado en dosimetría desde 1865. El CaF₂ puede ser utilizado en su forma natural, así como dopado con manganeso y disprosio. Presenta un bandgap grande, el cual experimentalmente vale 12.1 eV, por otro lado, la banda de valencia tiene un ancho de 3.20 eV [61] y la energía de Fermi es de 8.6 eV [62]. Además, no es tejido equivalente ($Z_v = 16.57$), lo que representa una desventaja como dosímetro, también se observa un rápido desvanecimiento lo que representa una pérdida de información dosimétrica [63].

2.10.4. Características generales del Al₂O₃ - óxido de aluminio

El óxido de aluminio dopado con hierro es conocido como zafiro y al doparse con cromo se transforma en rubí, estos compuestos presentan propiedades adecuadas para ser utilizados como dosímetros, debido a que exhiben una alta sensibilidad a bajas dosis y muestran curvas de brillo simples [53]. Entre otras cosas, muestran una alta eficiencia, es decir, la radiación incidente es convertida óptimamente en luz visible. Incluso, tienen una baja pérdida de información dosimétrica con el paso del tiempo. Su número atómico efectivo está alrededor de 11.2, por lo que no clasifica como tejido equivalente. Además, tiene un bandgap de 8.8 eV [64], un ancho de banda de valencia de 7.9 eV [65] y una energía de Fermi de 15 eV [6].

3.1. Recopilación de los índices de refracción y extinción

Para el cálculo de la función de pérdida de energía, el IMFP, la sección eficaz y el poder de frenado, se utilizan los índices ópticos experimentales n y k . Estos índices se recopilan de diversas fuentes. Sin embargo, los datos ópticos experimentales reportados en la literatura son escasos. En su lugar, se recopilan los factores de dispersión atómicos (ver sección 2.5), el índice de decremento δ , el índice de extinción óptico β y las componentes real e imaginaria de la función dieléctrica (ver sección 2.4). En la tabla 3.1 se resumen los parámetros recopilados para cada compuesto.

Compuestos	Rango de energía [eV]	Dato recabado	Referencia
H ₂ O	1.2398E-7 - 6.1992	Índice n y k	[66]
	6.2459 - 48.3609	Componentes ϵ_1 y ϵ_2	[67]
	48.5814 - 30,000.0	Índice δ y β	[36]
	30,014.05 - 432,945.10	Factores de dispersión atómicos f_1 y f_2	[37]
LiF	3.718E-8 - 27.0	Función de pérdida de energía	[68]
	29.3000 - 30,000.0078	Índice δ y β	[36]
	30,014.00 - 432,945.10	Factores de dispersión atómicos f_1 y f_2	[37]
CaF ₂	0.0124 - 0.1240	Índice n y k	[69]
	10.3321 - 30,000.0059	Índice δ y β	[36]
	30,014.05 - 432,945.10	Factores de dispersión atómicos f_1 y f_2	[37]
Al ₂ O ₃	0.0372 - 29.1	Índice n y k	[70]
	30.0000 - 29,999.9961	Índice δ y β	[36]
	30,014.05 - 432,945.10	Factores de dispersión atómicos f_1 y f_2	[37]

Tabla 3.1: Datos recopilados para el cálculo de la función de pérdida de energía.

3.2. Cálculo de la función de pérdida de energía

Para determinar la función de pérdida de energía se escribieron los factores de dispersión atómicos f_1 y f_2 en términos del índice de decremento δ y extinción β , respectivamente. El factor de dispersión atómico f_1 se reescribió utilizando la ec. (2.18a) y el factor de dispersión atómico f_2 se reescribió utilizando la ec. (2.18b). El índice δ está relacionado con el índice de refracción n por medio de la relación (ver sección 2.5)

$$\delta = 1 - n, \quad (3.1)$$

y β es igual al coeficiente de extinción k . Para el cálculo de la función de pérdida de energía a través de los índices n y k se utilizó la ec. (2.22). Para los datos extraídos en términos ϵ_1 y ϵ_2 , componentes de la función dieléctrica, se utilizó la ec. (2.21b).

3.3. Evaluación de los datos ópticos experimentales

Para determinar si los datos recabados modelan la interacción entre la onda incidente y el medio se evaluó la consistencia de los datos ópticos extraídos. Para dicha evaluación se utilizó la f-sum (ver ec. 2.44) y la kk-sum (ver ec. 2.46) a través de la función de pérdida de energía calculada previamente. En la tabla

Compuestos	Z	Error f-sum [%]	kk-sum	Error kk-sum [%]
H ₂ O	9.93	-0.65	1.03	2.97
LiF	12.04	0.32	0.79	-20.60
CaF ₂	38.8	1	1.04	3.79
Al ₂ O ₃	49.8	-0.39	1.02	1.57

Tabla 3.2: Evaluación de auto-consistencia de los datos ópticos experimentales.

3.2 se observa el número atómico y los valores de la suma de Kramers-Kronig calculados a partir de los índices n y k utilizados. Para el cálculo del error, en el caso de la f-sum, se toma como referencia el número atómico teórico del compuesto¹ en cuestión y, para el caso de la kk-sum, se considera que la evaluación debe tender a uno. A partir de los valores de referencia y los calculados se estimó el error para cada suma. Los errores mostrados en la tabla 3.2 contribuyen a la incertidumbre asociada al cálculo del IMFP y del poder de frenado lineal en los intervalos mencionados en secciones previas (ver sección 2.9)².

¹El número atómico teórico corresponde al número total de electrones que constituyen al compuesto. No representa el número atómico efectivo.

²La incertidumbre asociada a los cálculos se describe en términos del valor cuadrático medio (RMS) [71], como se verá en secciones posteriores.

3.4. Cálculo del IMFP

Para el cálculo de camino libre medio inelástico se implementó un código en el programa *Mathematica* (versión 10.0.0.0.) desarrollado por John Villarrubia del NIST [72], basado en la función de excitación [ver ec. (2.37)]. Para el cálculo de la función de excitación se utilizó la ec. (2.14) (ver subsección 2.4.1) definida como la función de dispersión $\omega_p(q)$ y se consideró que era igual a la frecuencia de la onda incidente, es decir, $\omega_p(q) = \omega$. Después se resolvió para la frecuencia de plasma ω_p considerando que la transferencia de momento era mínima, como

$$(\hbar q)^2/2m = 2E - \Delta E - 2\sqrt{E(E - \Delta E)}, \quad (3.2)$$

entonces la frecuencia de plasma ω_p quedó escrita en términos de la transferencia de energía $\Delta E = \hbar\omega$ y la energía cinética de la partícula incidente $E = (\hbar k)^2/2m$ como

$$\omega_p = \Delta E - \frac{0.049\Delta E^{7/3}}{E} \left[\frac{(0.13\alpha + 0.064\alpha)}{\beta} + \frac{\beta}{3 \times 2^{1/3}} \right]^{3/2}, \quad (3.3)$$

donde

$$\beta = [27\Delta E^2 - 27\alpha^2 + 0.12\alpha^3 + \sqrt{-0.014\alpha^6 + (27\Delta E^2 - 27\alpha^2 + 0.12\alpha^3)^2}]^{1/3}, \quad (3.4)$$

$$\alpha = -2E + \Delta E + 2\sqrt{E(E - \Delta E)}. \quad (3.5)$$

Aunque para encontrar la frecuencia de plasma se asumió la transferencia de momento como mínima, en el caso general no se toma esta consideración. Por lo que se utilizó, de nuevo, la ec. (2.37). Se resolvió la ec. de dispersión para $(\hbar q)^2/2m$ y se consideró la solución positiva, por lo que se obtuvo

$$\frac{(\hbar q)^2}{2m} = 0.5[-0.392(\hbar\omega_p)^{2/3} + \sqrt{-4(\hbar\omega_p)^2 + 0.154(\hbar\omega_p)^{8/3} + 4\Delta E^2}]. \quad (3.6)$$

A partir de las ecs. (3.3) - (3.6) se observó que la integral de la función de excitación

$$\int_0^\infty \frac{\hbar\omega_p}{(\hbar\omega)^2 - (\hbar\omega_p)^2 + \left[\frac{(\hbar q)^2}{2m}\right]^2} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega_p)}\right] d(\hbar\omega_p), \quad (3.7)$$

quedó escrita en términos de la pérdida de energía y la energía cinética de la partícula. La función de pérdida de energía calculada en la sección 3.2 se usó en la ec. (3.7) y como los valores de ω_p no coinciden con los valores de la frecuencia de la onda incidente se interpoló exponencialmente¹ la función de pérdida de energía para las soluciones a la ec. (3.3). Posteriormente, se integró respecto a la energía de la partícula incidente, de cero a infinito (o a la máxima energía de la partícula incidente).

Finalmente, se integró la función de excitación respecto de la transferencia de energía ΔE [ver ec. (2.38)]. De acuerdo con el algoritmo de Penn y Ding, los límites de integración requirieron del conocimiento del bandgap para el límite inferior y de la energía de Fermi para el límite superior. En la tabla 3.3 se incluyen los parámetros mencionados.

¹Graficando log-log, energía contra función de pérdida de energía se observa un comportamiento casi lineal.

Compuestos	Bandgap [eV]	E. Fermi [eV]
H ₂ O	8.2 [60]	15.0 [7]
LiF	14.3 [58]	15.0 [6]
CaF ₂	12.1 [61]	8.6 [62]
Al ₂ O ₃	8.8 [70]	15.0 [6]

Tabla 3.3: Valores de bandgap y de la energía de Fermi de los compuestos considerados.

El código permitió la visualización de las funciones de pérdida de energía así como las curvas de camino libre medio inelástico resultantes. Los datos fueron extraídos en un archivo *.csv* siguiendo la función exponencial

$$f(n) = e^{1.8+0.08n}, \quad (3.8)$$

donde $1 \leq n \leq 140$.

3.5. Cálculo del poder de frenado lineal de colisión

Para el cálculo del poder de frenado lineal de colisión se utilizó el mismo código desarrollado en *mathematica* por John Villarrubia del NIST [72]. En el caso del poder de frenado se multiplicó e integró la función de excitación respecto a la transferencia de la energía ΔE de la partícula incidente como se muestra en la ec. (2.39).

En la integral mencionada anteriormente, el límite de integración, al igual que el IMFP, se determinó con el bandgap y la energía de Fermi (ver tabla 3.3). Los datos se extrajeron en formato *.csv* siguiendo la misma función exponencial utilizada para el IMFP.

3.6. Cálculo de la sección eficaz

Las secciones eficaces fueron calculadas usando los datos del IMFP desde el bandgap hasta 442 keV para todos los compuestos a través de la ec. (2.41). Para ello, es necesario utilizar el número de átomos/molécula por unidad de volumen, N . Este valor se calcula a través de la ec. (3.9):

$$N = N_a \frac{\rho}{A}, \quad (3.9)$$

donde N_a es el número de Avogadro, ρ es la densidad del medio en g/cm^3 y A es el número de masa. En la tabla 3.4 se incluyen los valores N que se utilizaron por compuesto.

Compuestos	$N[10^{22}cm^{-3}]$
H ₂ O	3.33671
LiF	6.13825
CaF ₂	2.45512
Al ₂ O ₃	2.35423

Tabla 3.4: Números de densidad de cada compuesto.

Aunque este trabajo está enfocado en el área de la física médica, el uso de estos parámetros no es exclusivo de esta rama de la física y resulta de interés para la microscopía, así como en áreas afines.

3.7. Comparaciones del IMFP y del poder de frenado lineal de colisión con resultados previos.

3.7.1. IMFP

Para las comparaciones de IMFP en agua líquida, se obtuvieron valores originales calculados por Powell y col. [7, 73] con la FPA. También, se consideraron datos publicados por Emfietzoglou y col. [8, 9] en donde se describe el cálculo teórico del IMFP en un intervalo de 100 eV a 100 keV (IXS-D3) [8] y en un intervalo de 10 eV a 100 keV (e-e) [9].

Para LiF, se compararon valores del IMFP con datos publicados por Tanuma y col. [6] basados en la FPA en un rango de energía de 50-2000 eV.

Para CaF₂, dada la falta de valores del IMFP en la literatura se utilizó una ec. teórica desarrollada por Shinotsuka y col. [4] conocida como la ecuación “relativista modificada de Bethe” o TPP-2M (por las siglas de sus autores¹) y se escribe como

$$\lambda_B = \frac{E}{E_p^2 \{ \beta_r [\ln(\gamma E) - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2] - (C/E) + (D/E^2) \}}, \quad (3.10)$$

donde

- λ_B (nm) es el IMFP,
- E es la energía cinética del electrón (eV),
- $\beta_r = -1.0 + 9.44 / \sqrt{E_p^2 + E_g^2} + 0.69 \rho^{0.1}$ (eV⁻¹nm⁻¹),

¹“Tanuma, Powell and Penn modified”.

3. METODOLOGÍA

- E_g es la energía de bandgap (eV),
- $E_p = 28.8\sqrt{N_v\rho/A}$ (eV),
- N_v es el número de electrones de valencia del medio,
- ρ es la densidad del material,
- A es el número de masa del medio,
- $\gamma = 0.191\rho^{-0.5}$ (eV⁻¹),
- $C = 19.7 - 9.1U$ (nm⁻¹),
- $D = 534 - 208U$ (eVnm⁻¹),
- $U = N_v\rho/A$.

Para Al₂O₃, se compararon valores del IMFP con Powell y col. [73] en un intervalo de energía desde 10 eV hasta 200 keV calculados a través de la aproximación completa de Penn relativista (RFPA¹, por sus siglas en inglés). Dichos datos no han sido publicados todavía. Además, para el Al₂O₃, se compararon cálculos del IMFP con Pandya y col. [14] en un intervalo de energía desde 20 hasta 2000 eV. En dicho trabajo se presentan cálculos teóricos tomando en cuenta un potencial esférico complejo. También, se comparan cálculos del IMFP para Al₂O₃ publicados por Akkerman y col. [10] en el intervalo de energía que va desde 50 eV hasta 10 keV.

3.7.2. Poder de frenado lineal de colisión

Para el agua líquida, se realizaron comparaciones con datos publicados por Emfietzoglou y col. (IXS-D3) [8]. En su trabajo calcula el poder de frenado lineal de colisión desde 0.1 keV hasta 10 keV a partir de los valores del IMFP calculados previamente. Para la conversión del camino libre medio inelástico a poder de frenado lineal Emfietzoglou hace uso de la ec. (2.39).

Para LiF, se compararon los valores del poder de frenado lineal publicados por Boutboul y col. [11] en el intervalo de 50 eV a 10 keV. También, se comparan valores publicados por Akkerman y col. [10] en un rango de energía desde 50 eV hasta 10 keV.

Se compararon los cálculos de este trabajo con el modelo clásico de Bethe [ec. (2.4)] y el modelo teórico relativista de Bethe [ver ec. (2.6)], considerando dos valores de potencial de excitación distintos: uno a 78 eV, de acuerdo con el reporte ICRU 90 [74], y otro con un potencial de excitación teórico calculado con la ec. (2.8). También se compararon valores con el modelo utilizado por el programa ESTAR [75], a través del uso de la ec. (2.7). Este modelo se publicó en el reporte ICRU 37 [25], cuyos valores son referentes del poder de frenado lineal de colisión en física de radiaciones.

¹Relativistic Full Penn Approximation.

También, se realizó una comparación con el modelo de Luo y col. [49]. De acuerdo con Luo y col., esta técnica es un procedimiento directo y aproximado para el cálculo de poder de frenado lineal de colisión experimental.

Para los modelos teóricos es necesario conocer ciertos parámetros como la densidad ρ , número atómico Z^1 , masa atómica A y potencial de excitación/ionización promedio I . Estos valores se muestran en la tabla 3.5.

Compuestos	$\rho[g/cm^2]$	Z	A	I [eV]
H ₂ O	0.999 [7]	10	18.0152	78.0 [74]
LiF	2.635 [75]	12	25.9390	94.0 [75]
CaF ₂	3.180 [75]	38	78.0748	166.0 [75]
Al ₂ O ₃	3.970 [75]	50	101.9600	145.2 [75]

Tabla 3.5: Parámetros de los compuestos considerados utilizados por los modelos teóricos.

3.8. Incertidumbre en los cálculos

El valor cuadrático medio (RMS), es considerado como indicador de las incertidumbres en el cálculo del IMFP y del poder de frenado, pero de acuerdo con el NIST debería ser considerado como una incertidumbre mínima ya que no es posible cuantificar las fuentes principales de errores sistemáticos [71]. Este método evalúa la diferencia promedio entre los valores calculados o asociados a una medición y aquellos predichos por un modelo teórico o método de referencia. En este trabajo se presentan cálculos teóricos del IMFP y del poder de frenado lineal, susceptibles al cálculo de RMS. Esta incertidumbre se relaciona con los datos ópticos experimentales recabados y al modelo teórico en el cual se basa el código empleado en este trabajo. Los datos ópticos son evaluados a través de la f-sum y la kk-sum y debido al modelo teórico se estima una incertidumbre de entre el 10-15% del IMFP para energías entre 50 eV y 100 eV [13, 41], ya que no considera efectos de intercambio ni de correlación² [18]. El valor de RMS final ya toma en cuenta ambas contribuciones.

En un estudio previo [6], se estableció una relación entre el promedio del error de la f-sum y kk-sum y el RMS. En dicho estudio se encontró una relación casi lineal entre ambos parámetros. Es importante este resultado ya que se podrían asociar los valores de RMS porcentual calculados con los errores en los datos ópticos experimentales recabados.

El RMS se calcula utilizando la ec. (3.11) [76] como sigue

¹Representa el número total de electrones que constituyen al compuesto. No representa el número atómico efectivo.

²Penn estima que el algoritmo simple difiere en sólo 3% del algoritmo completo para energías superiores a 200 eV.

3. METODOLOGÍA

$$RMS = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2}{n}}, \quad (3.11)$$

donde \bar{y}_i son los valores de referencia, y_i son los valores a comparar y n es el número de elementos que componen la comparación. Además, la ec. (3.11) tiene las unidades de los parámetros a comparar.

En porcentaje, se escribe como [17]

$$RMS_{\%} = 100 \times \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \bar{y}_i}{\bar{y}_i}\right)^2}{n}}, \quad (3.12)$$

en este trabajo se calcula el RMS porcentual para el IMFP y el poder de frenado. Para el IMFP, los valores de referencia para el H₂O y el LiF corresponden a la FPA, para el CaF₂ al modelo relativista modificado de Bethe (TPP-2M) y para el Al₂O₃ a la RFPA. Para el poder de frenado se consideraron los valores de referencia obtenidos a través de la ec. (2.7), utilizada por el programa ESTAR (NIST), para los cuatro compuestos. Se consideró la diferencia porcentual entre este trabajo y el respectivo modelo de referencia para determinar los intervalos de energía en los cuales realizar el cálculo del RMS. El criterio para clasificar dichos intervalos se basó en las diferencias porcentuales menores que 10 %. En los intervalos de energía, donde no se cumplía este criterio, se realizaba otro cálculo del valor RMS.

4.1. Función de pérdida de energía

Los valores de la función de pérdida de energía como función de la energía cinética del electrón calculados en este trabajo se presentan en las figuras 4.1, 4.2, 4.3 y 4.4 para H_2O , LiF , CaF_2 y Al_2O_3 , respectivamente. Como se observa, a lo largo de cada curva, máximos y mínimos locales son observados y determinan un incremento o decremento de la probabilidad de dispersión inelástica, respectivamente, entre el electrón incidente y el medio. En cada gráfica se muestra la distribución de la pérdida de energía del compuesto en cuestión.

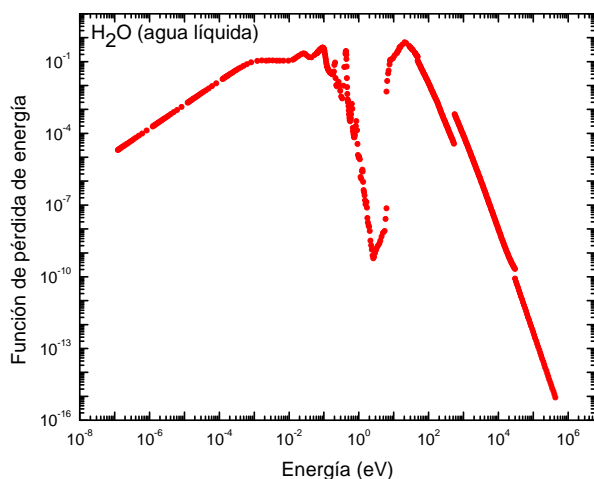


Figura 4.1: Función de pérdida de energía en agua líquida.

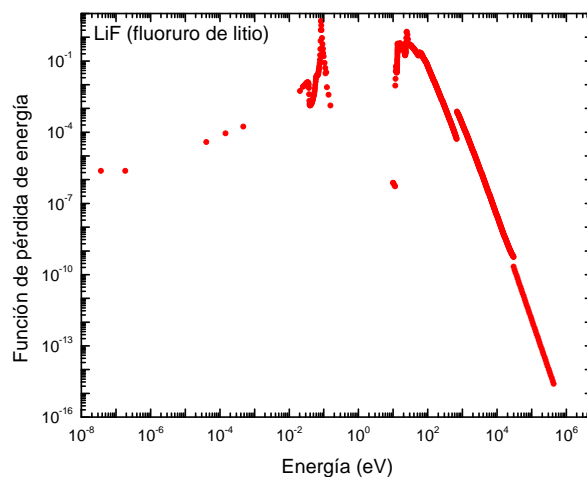


Figura 4.2: Función de pérdida de energía en fluoruro de litio.

4. RESULTADOS

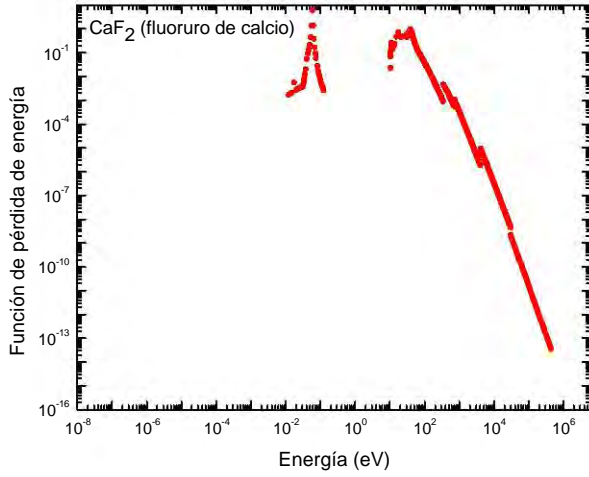


Figura 4.3: Función de pérdida de energía en fluoruro de calcio.

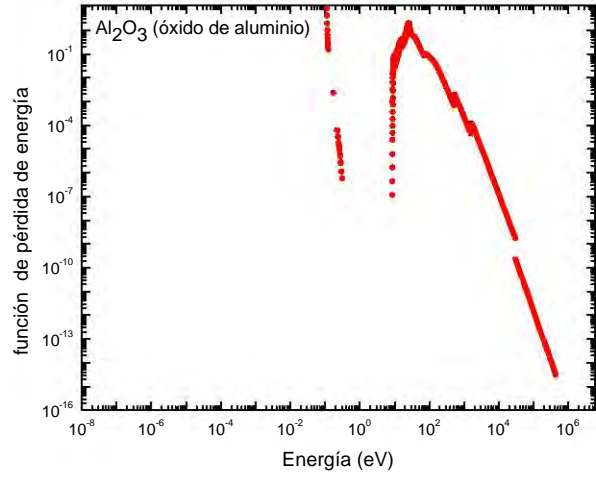


Figura 4.4: Función de pérdida de energía en óxido de aluminio.

4.2. IMFP - Camino libre medio inelástico

Los valores del IMFP como función de la energía cinética del electrón calculados en este trabajo se presentan en las figuras 4.5, 4.6, 4.7 y 4.8 para H_2O , LiF , CaF_2 y Al_2O_3 , respectivamente. Como se observa, a bajas energías el IMFP disminuye como función de la energía hasta alcanzar un mínimo y después aumenta, independientemente del compuesto en cuestión.

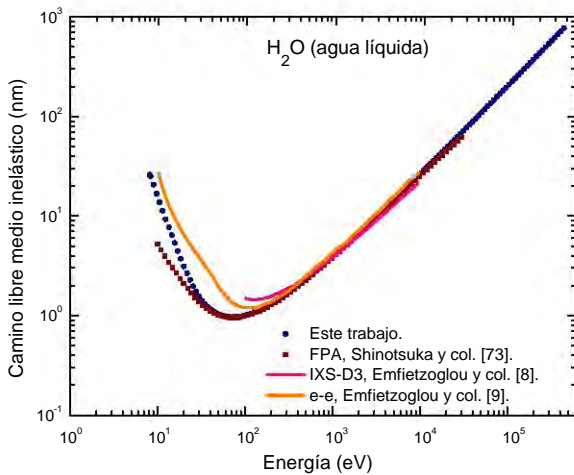


Figura 4.5: IMFP calculado en H_2O .

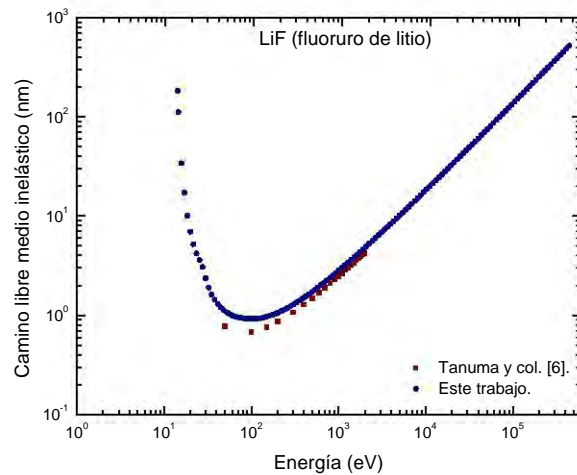


Figura 4.6: IMFP calculado en LiF .

También se incluyen datos reportados en la literatura para agua líquida, fluoruro de litio y óxido de

aluminio donde se puede notar un buen acuerdo para energías mayores que 100 eV. Se nota también para materiales de baja Z (ver tabla 3.5), como el H_2O y el LiF , el IMFP es mayor que para CaF_2 y Al_2O_3 .

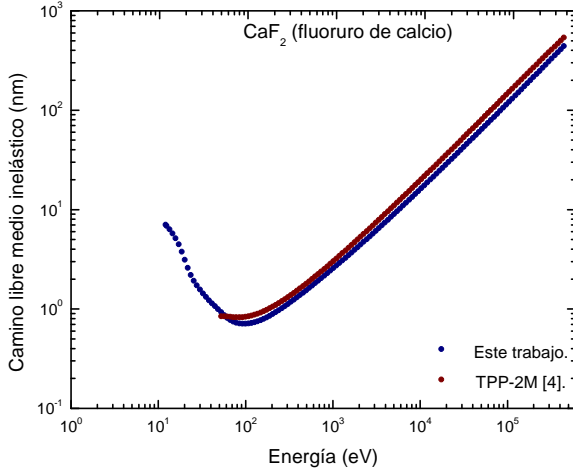


Figura 4.7: IMFP en CaF_2 .

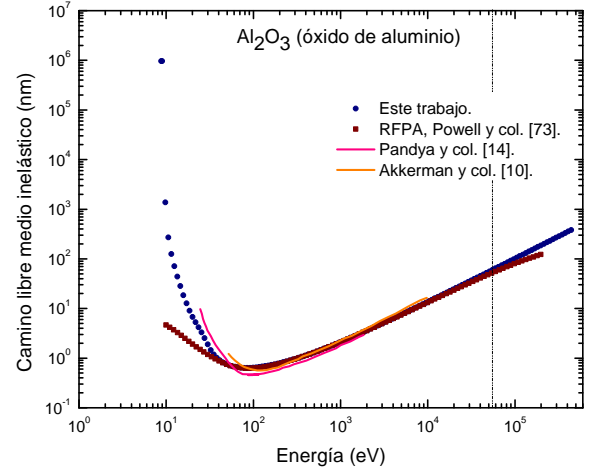


Figura 4.8: IMFP calculado en Al_2O_3 .

Además, en la tabla 4.1 se observan los valores de RMS calculados para cada compuesto. Los valores presentados constituyen la incertidumbre RMS de los valores del IMFP calculados en este trabajo, considerando como referencia los resultados publicados por Shinotsuka y col. [6, 7, 73] utilizando el FPA para el H_2O y el LiF y la RFPA para el Al_2O_3 , en cambio para el CaF_2 se consideró el modelo teórico TPP-2M como referencia [6]. La división del intervalo de energía en cada compuesto depende de las diferencias porcentuales observadas con el respectivo modelo de referencia.

Compuestos	Intervalo de energía [eV]	Incertidumbre RMS [%]
H_2O	10 - 40	8.48
	41 - 30,000	0.45
LiF	50 - 2,000	1.9
CaF_2	50 - 442,000	17.4
Al_2O_3	10 - 40	171
	41 - 40,000	0.31
	40,001 - 200,000	2.88

Tabla 4.1: Incertidumbre RMS asociada al IMFP por compuesto.

4.3. Sección eficaz

En las figuras 4.9, 4.10, 4.11 y 4.12 se muestran las secciones eficaces como función de la energía cinética del electrón incidente en H_2O , LiF , CaF_2 y Al_2O_3 , respectivamente. No se incluyen comparaciones dado que no se encontró datos en la literatura. Dichas curvas se obtuvieron a partir del IMFP calculado previamente. Estas curvas indican la probabilidad de interacción asociada al movimiento del electrón en el interior del material. En este caso, contrario al IMFP, la sección eficaz es mayor para materiales de más alta Z , lo que se comprende puesto que la sección eficaz es el inverso del IMFP.

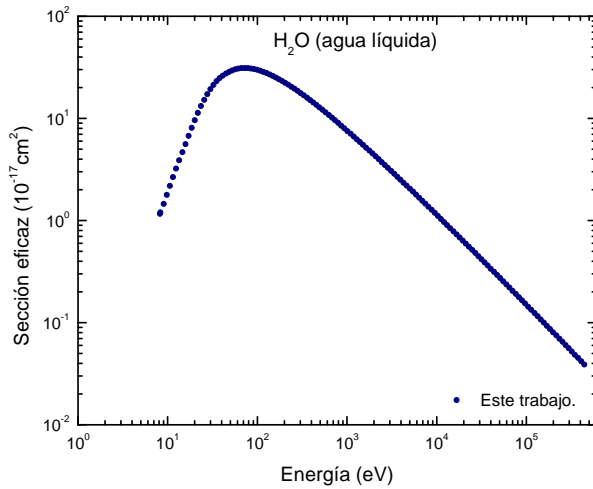


Figura 4.9: Sección eficaz en H_2O .

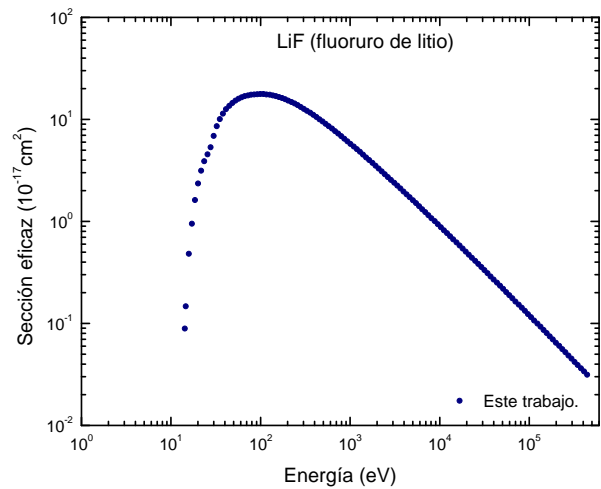


Figura 4.10: Sección eficaz en LiF .

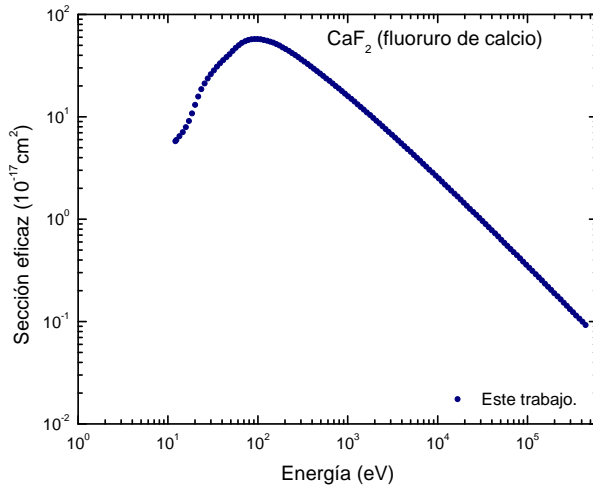


Figura 4.11: Sección eficaz en CaF_2 .

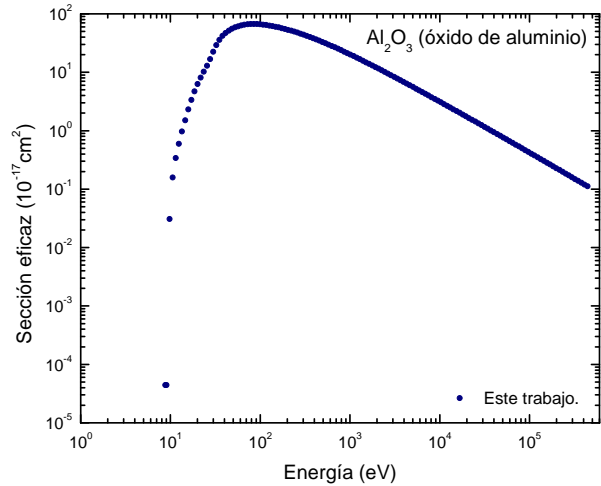


Figura 4.12: Sección eficaz en Al_2O_3 .

En las secciones eficaces calculadas no se obtuvo el RMS porcentual directamente, dado que no se encontró un modelo teórico con el cual comparar los datos. Sin embargo, los valores de las secciones eficaces se

calcularon a partir de los valores del IMFP. Por lo que se puede asociar el RMS porcentual obtenido en el IMFP (en el intervalo de energías considerado en cada caso) a los valores de las secciones eficaces calculados.

4.4. Poder de frenado lineal de colisión

En las figuras 4.13, 4.14, 4.15 y 4.16 se presentan las curvas de poder de frenado lineal de colisión en función de la energía cinética del electrón incidente en H₂O, LiF, CaF₂ y Al₂O₃, respectivamente. A bajas energías se nota un aumento en el poder de frenado lineal hasta alcanzar un máximo. Posteriormente, el poder de frenado lineal de colisión disminuye con la energía. A energías suficientemente altas se pueden apreciar efectos relativistas, como se observa en la curva correspondiente a los valores obtenidos con el programa ESTAR del NIST. También, se incluyen cálculos utilizando el modelo de Bethe relativista y clásico para distintos valores de potencial de excitación. En general, para energías mayores que 1 keV existe un buen acuerdo entre los valores de este trabajo y los reportados en la literatura, independientemente del material en cuestión.

También, se incluyen en la tabla 4.2 los valores estimados de RMS asociados a cada compuesto, considerando los valores obtenidos con el modelo del programa ESTAR como referencia. La clasificación en los intervalos de energías está determinada por las diferencias porcentuales observadas con el programa ESTAR.

Compuestos	Intervalo de energía [eV]	Incertidumbre RMS [%]
H ₂ O	148 - 1,000	2.42
	1,000 - 55,000	0.72
	55,000 - 442,000	3.43
LiF	148 - 1,000	1.46
	1000 - 55,000	0.59
	55,000 - 442,000	3.63
CaF ₂	148 - 1,000	37
	1,000 - 55,000	1.08
	55,000 - 442,000	2.98
Al ₂ O ₃	148 - 1,000	7.25
	1,000 - 55,000	0.73
	55,000 - 442,000	3.29

Tabla 4.2: Incertidumbre RMS asociada al poder de frenado lineal de colisión por compuesto.

4. RESULTADOS

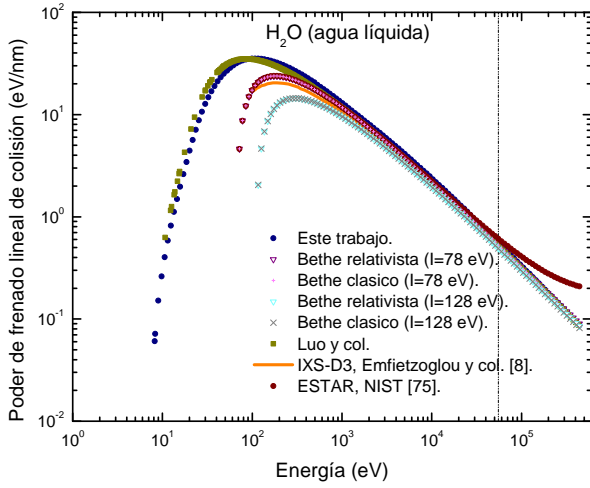


Figura 4.13: Poder de frenado lineal de colisión calculado en H_2O .

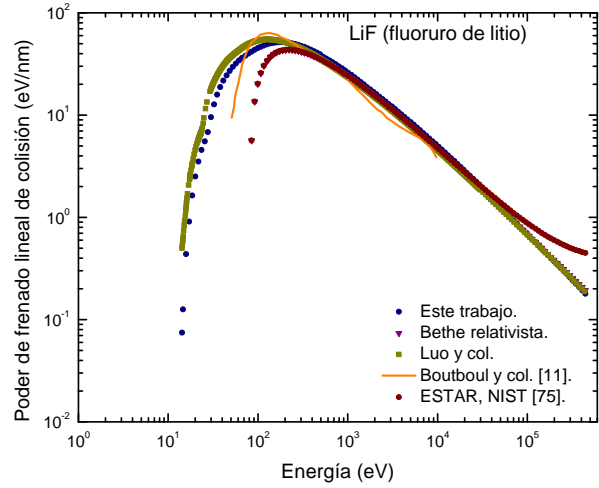


Figura 4.14: Poder de frenado lineal de colisión calculado en LiF .

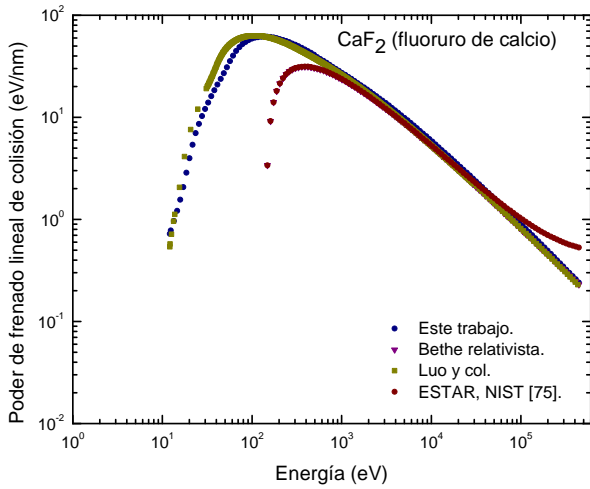


Figura 4.15: Poder de frenado lineal de colisión calculado en CaF_2 .

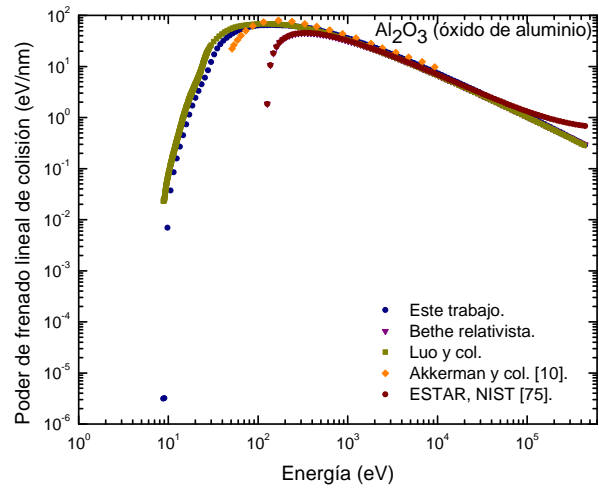


Figura 4.16: Poder de frenado lineal de colisión calculado en Al_2O_3 .

5.1. Función de pérdida de energía

En las curvas de las funciones de pérdida de energía se pueden observar diversos máximos locales asociados al incremento de la probabilidad de dispersión inelástica del electrón al interactuar con el medio. Estas dispersiones inelásticas se identifican con diversos procesos. En las figuras 5.1, 5.2, 5.3 y 5.4, se incluyen las funciones de pérdida de energía para los cuatro compuestos en donde se muestran las energías de bandgap y la asociada a la frecuencia de plasma en los correspondientes máximos locales. Con base a las curvas de la función de pérdida de energía, se identifica la energía de bandgap a 8 eV, 13.5 eV y 11.3 eV, para el H₂O, el LiF y el CaF₂, respectivamente. Para el caso del Al₂O₃ no se pudo determinar un máximo local asociado a la energía de bandgap. También se estimaron las energías de oscilación de plasma a 20.8 eV, 24.5 eV, 39.5 eV y 25.4 eV, para el H₂O, el LiF, el CaF₂ y el Al₂O₃, respectivamente.

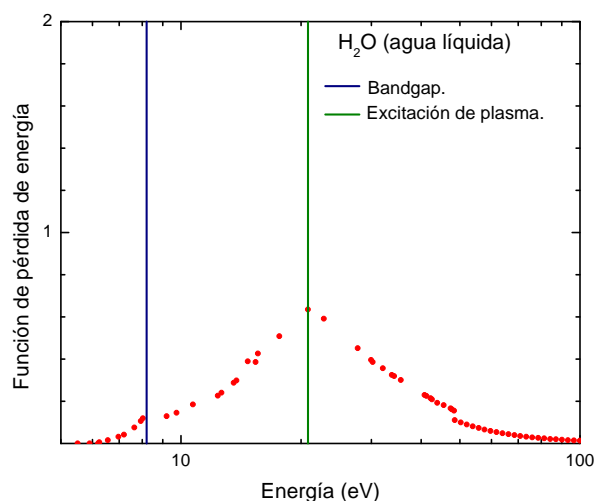


Figura 5.1: Máximos locales en la función de pérdida de energía en H₂O.

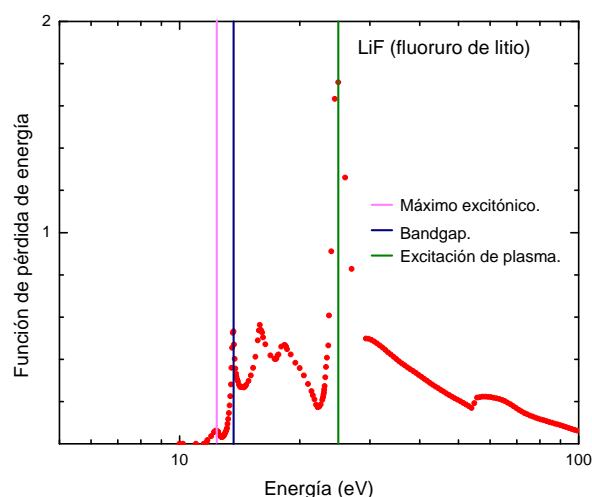


Figura 5.2: Máximos locales en la función de pérdida de energía en LiF.

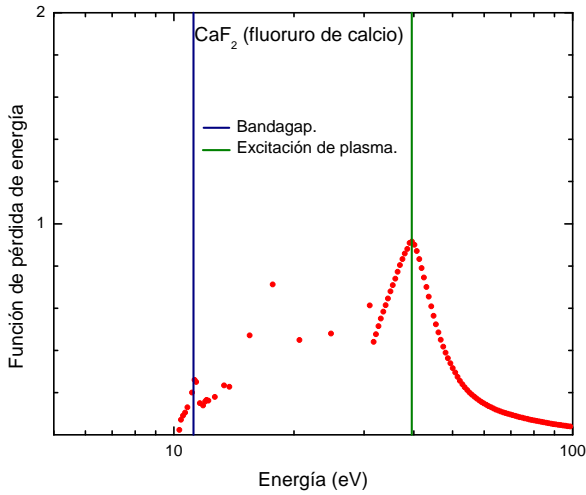


Figura 5.3: Máximos locales en la función de pérdida de energía en CaF_2 .

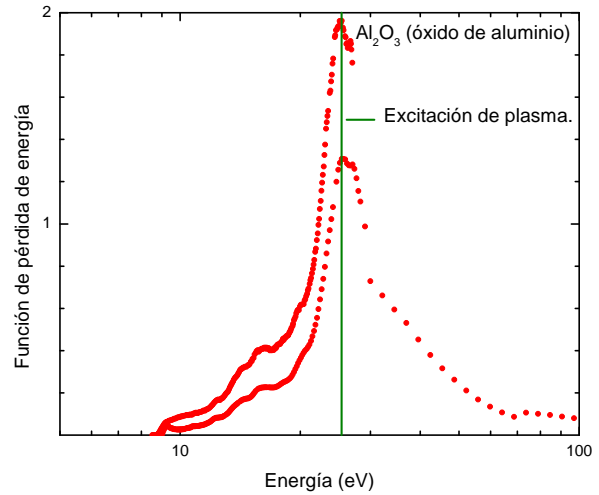


Figura 5.4: Máximos locales en la función de pérdida de energía en Al_2O_3 .

5.2. Camino libre medio inelástico

Se calculó el camino libre medio inelástico (IMFP) para cuatro materiales dosimétricos; H_2O , LiF , CaF_2 y Al_2O_3 . Se ha observado que el IMFP decrece a bajas energías, llega a un mínimo y después aumenta conforme la energía cinética del electrón crece. Además, el valor del mínimo de IMFP depende del número atómico del medio. Mientras menor es el número atómico, mayor es el mínimo. Los mínimos del IMFP son 0.964 nm, 0.921 nm, 0.710 nm y 0.634 nm para H_2O , LiF , CaF_2 y Al_2O_3 , respectivamente. Se observa que para números atómicos hasta cinco veces mayores que el número atómico del H_2O las diferencias entre los mínimos del IMFP están entre el 5 % y el 35 %. Dicha característica está relacionada con la nube electrónica de cada átomo y conforme el número atómico es mayor el campo eléctrico en el material es más intenso. Como consecuencia, la interacción coulombiana entre el electrón incidente y el medio aumenta, y disminuye el IMFP. Con respecto a la energía a la que el IMFP alcanza el mínimo, no se ha observado una dependencia con el material en cuestión excepto el agua líquida cuyo mínimo se encuentra a 20 eV por debajo de los otros.

Para entender el comportamiento de las curvas del camino libre medio inelástico, se considera que a bajas energías se producen pares electrón-hueco simples y múltiples excitados (ver sección 2.7); los electrones orbitales externos son promovidos a la banda de conducción y los huecos permanecen en la superficie de Fermi. Posteriormente, al aumentar la energía cinética del electrón incidente, sigue una región de transición; los colectivos excitados tienen mayor presencia, y conforme la partícula crea pares excitados se encuentra en su camino con un mar de plasma, colisionando continuamente y provocando la oscilación del mismo, es decir, la probabilidad de interacción aumenta (disminuye el camino libre medio). Los procesos de excitación e ionización de los átomos del medio pasan de ser exclusivos de las capas más externas a producirse también en las capas internas del átomo. En esta etapa de transición se alcanza el

mínimo de la curva. Posteriormente, en la misma región de transición, el camino libre medio inelástico crece al aumentar la energía y el proceso de excitación y ionización de los electrones orbitales ocurre en capas internas. La probabilidad de interacción disminuye con la energía. En este punto, aún se produce plasma en forma de colectivos excitados, así como pérdida de energía por oscilación de plasma, pero ya no es el mecanismo de pérdida de energía principal. La excitación y la ionización se producen tanto con capas externas (de valencia) como en internas. Se puede notar que a altas energías el camino libre medio inelástico aumenta proporcionalmente, es decir, conforme la energía cinética (su velocidad) del electrón es mayor, la probabilidad de que interactúe con el medio es menor.

Si se observa con detenimiento la ec. (2.37) de la función de excitación se puede concluir que las diferencias entre los valores del IMFP obtenidos para cada compuesto se deben a la función de pérdida de energía. La función de pérdida de energía determina la forma de las curvas del IMFP. Este método de cálculo del IMFP es dependiente de las funciones de pérdida de energía, por lo que es necesario evaluar y asegurarse de que las funciones utilizadas describan con precisión la interacción entre el electrón y el medio. En este trabajo se realizaron evaluaciones de los datos ópticos experimentales a través de la f-sum y la k-sum con el fin de evaluar si dichos datos son adecuados para el cálculo de la función de pérdida de energía.

Se calculó el RMS por compuesto y se observa que para energías menores que 40 eV la incertidumbre puede ser desde el 8 % hasta del 170 %, dependiendo del compuesto, lo cual puede deberse a las diferencias en el cálculo de la pérdida de energía entre este trabajo y los modelos de referencia. En cambio, para un intervalo de 40 eV - 40,000 eV se observa un RMS del orden del 0.5 %. A energías mayores que 40,000 eV y menores que 200,000 eV la incertidumbre es del orden del 3 %, lo que puede deberse a efectos relativistas. En el caso del CaF_2 , el valor de la incertidumbre RMS es del orden del 17 % para un intervalo de energía desde los 50 eV hasta los 442 keV. Estas diferencias se puede deberse al modelo teórico utilizado.

5.2.1. Comparaciones con publicaciones previas

Para cuantificar las discrepancias porcentuales entre los resultados de este trabajo y los publicados previamente, se reportan las figuras 5.5, 5.6, 5.7 y 5.8, para el H_2O , LiF, CaF_2 y Al_2O_3 , respectivamente. Los resultados de este trabajo son tomados como referencia, representados con una línea azul al cero por ciento en todo el intervalo de energías, ya que el modelo usado es parte del código Monte Carlo JMONSEL (Java Monte Carlo Simulation of secondary electrons) [72] y ha sido validado por medidas experimentales realizadas en el NIST [72, 77] donde el modelo ha demostrado ser efectivo en reproducir el experimento.

Como se observa en las discrepancias porcentuales, las diferencias entre este trabajo y los valores del IMFP publicados por Shinotsuka y col. [6, 7, 73] son del orden del -1 % al -10 % para energías entre 40 eV y 30 keV, para H_2O y Al_2O_3 . Mientras que para los valores del IMFP en LiF publicados por el mismo autor, se observan diferencias entre el -11 % y -28 % entre 50 eV y 2 keV, estas discrepancias pueden ser asociadas posiblemente a la falta de consideraciones relativistas, a las contribuciones de la oscilación de plasma y la excitación del par electrón-hueco no tomadas en cuenta en el cálculo para LiF y principalmente a los datos ópticos experimentales utilizados en la función de pérdida de energía. En el caso del Al_2O_3 se observa que a energías mayores que 40 keV las diferencias son de hasta -35 % e incrementando dicha diferencia conforme la energía del electrón incidente es mayor. Esta diferencia se puede atribuir a

5. DISCUSIÓN

los efectos relativistas.

Dadas las diferencias menores que el 10% entre este trabajo y la FPA considerada como referencia, se puede decir que los resultados en este trabajo son confiables. Además, considerando la simplicidad del cálculo del IMFP a través del método aquí presentado en comparación al utilizado por la FPA sugiere que es más efectivo considerar el método de trabajo desarrollado en esta tesis para futuros cálculos.

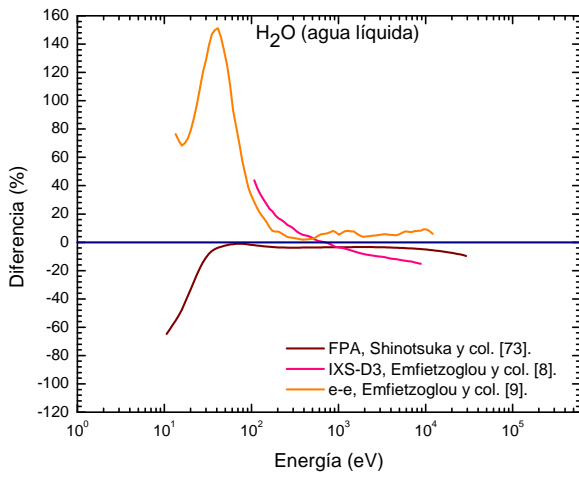


Figura 5.5: Diferencias porcentuales del IMFP entre este trabajo y publicaciones previas en H_2O .

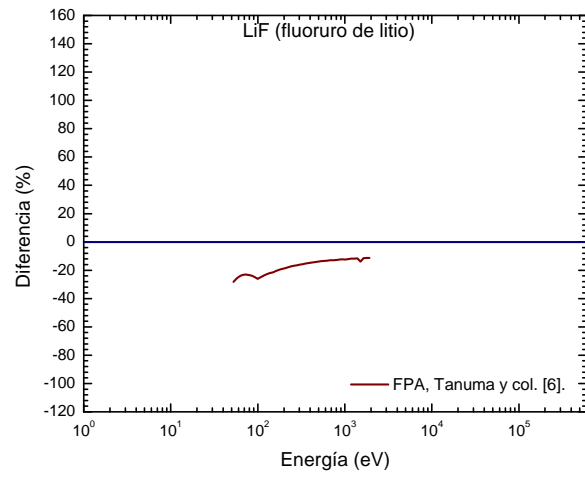


Figura 5.6: Diferencias porcentuales del IMFP entre este trabajo y publicaciones previas en LiF

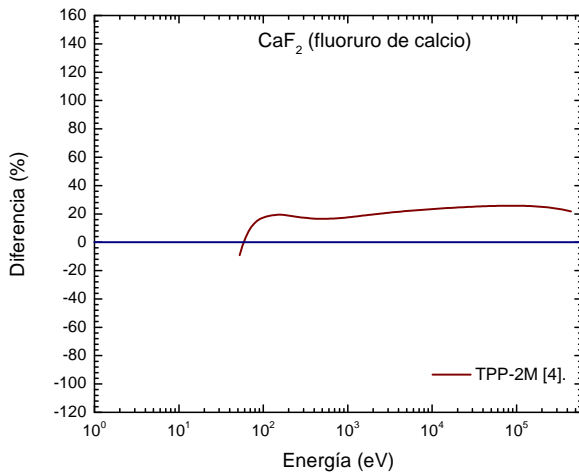


Figura 5.7: Diferencias porcentuales del IMFP entre este trabajo y publicaciones previas en CaF_2 .

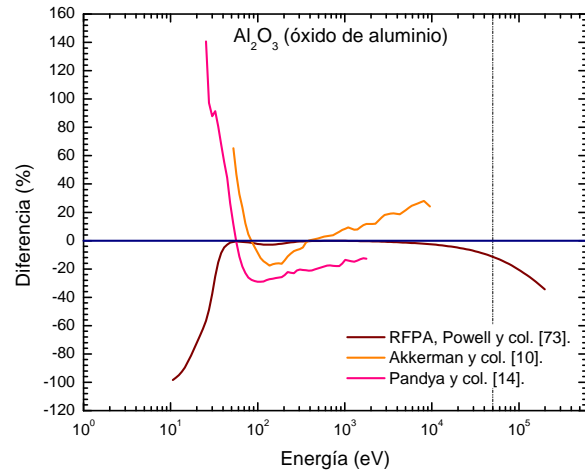


Figura 5.8: Diferencias porcentuales del IMFP entre este trabajo y publicaciones previas en Al_2O_3 .

Comparando los valores de IMFP en H_2O de este trabajo con los valores reportados por Emfietzoglou y col. [8, 9] para el modelo $e-e$ [9] se observan diferencias menores que el 10 % para energías entre 140 eV y 10 keV. Mientras que, los resultados del modelo $IXS-D3$ [8] muestran diferencias del orden de -15 % y 40 % en todo el intervalo de energías. Como se puede observar en las figuras 4.5 y 5.5, las diferencias mas notables entre este trabajo y los valores de Emfietzoglou y col. es a energías menores que 400 eV. Estas diferencias tienen origen en la aproximación de segundo orden de Born con una corrección al intercambio de electrones tomada en cuenta por los modelos de Emfietzoglou y col. a diferencia del algoritmo simple de Penn que utiliza una aproximación de primer orden y no toma en cuenta este efecto. Por lo que el IMFP calculado por Emfietzoglou y col. es producto del efecto de intercambio que tiene una fuerte influencia en partículas indistinguibles. En fermiones como los electrones, toma una forma repulsiva, y en bosones es atractivo. Consecuencia de este efecto, el valor esperado de la distancia entre fermiones o bosones es mayor o menor, respectivamente. Además este efecto es de corto alcance, afectando a los electrones de átomos vecinos. Por lo que este efecto reduce la probabilidad de interacción, ya que la repulsión entre átomos vecinos es lo suficientemente intensa para re-distribuirlos en un volumen mayor, disminuyendo la densidad electrónica localmente [9]. Como se verá en la siguiente sección, el IMFP calculado por Emfietzoglou y col. no arroja valores de poder de frenado consistentes con el modelo de Bethe.

Las diferencias de los valores del IMFP de este trabajo y los valores calculados con el modelo TPP-2M en CaF_2 son del orden del -10 % al 20 %, para energías desde 50 eV hasta 442 keV. Tomando en cuenta los datos reportados por Akkerman y col. [10] en Al_2O_3 se observan diferencias entre el 65 % y el 10 % entre 50 eV y 10 keV. Lo que se puede deber a la formulación de la función dieléctrica utilizada por el autor. En este tipo de cálculos, el IMFP es sensible a variaciones en las funciones de pérdida de energía y a los datos ópticos experimentales utilizados. Los valores publicados por Pandya y col. [14] en Al_2O_3 difieren desde -12 % hasta 140 % para energías desde 20 eV hasta 2 keV.

5.3. Sección eficaz

Se reporta la sección eficaz para cuatro compuestos: H_2O , LiF, CaF_2 y Al_2O_3 . En las figuras 4.9, 4.10, 4.11 y 4.12, se observa que la probabilidad de interacción entre el electrón incidente y el medio aumenta a bajas energías hasta alcanzar un máximo, en el que los diversos procesos descritos anteriormente tienen lugar. Seguido de este máximo, la probabilidad de interacción decae con la energía; la partícula posee tanta energía cinética que pasa entre los átomos del medio colisionando, ya sea de manera suave o dura, cada vez con menor probabilidad. Los máximos de la sección eficaz son $31.097 \times 10^{-17} \text{cm}^2$, $17.693 \times 10^{-17} \text{cm}^2$, $57.368 \times 10^{-17} \text{cm}^2$ y $66.955 \times 10^{-17} \text{cm}^2$, para H_2O , LiF, CaF_2 y Al_2O_3 , respectivamente. Además, como sucede en el caso del IMFP, los máximos dependen del número atómico, por la misma razón que sucede en el IMFP. Mientras mayor es el número atómico, mayor es la probabilidad de interacción de la partícula incidente con el medio, debido a la intensidad de la nube electrónica que rodea a cada átomo del medio. Además, similar al cálculo de IMFP las diferencias entre los máximos de la sección eficaz son del orden de 43 %-115 %. Estas diferencias son mucho mayores a las presentadas anteriormente en el caso del IMFP, lo cual puede atribuirse a la densidad electrónica variable de cada compuesto.

5.4. Poder de frenado lineal de colisión

Se calculó el poder de frenado lineal de colisión para cuatro materiales dosimétricos: H_2O , LiF , CaF_2 y Al_2O_3 . Se observa en las figuras 4.13, 4.14, 4.15 y 4.16 que el poder de frenado lineal crece a bajas energías, llega a un máximo y después decrece conforme la energía cinética del electrón es mayor. Incluso, se ha encontrado una dependencia del máximo de la curvas con el número atómico del compuesto, aumentando a razón de un número atómico mayor. Se observa que para números atómicos hasta cinco veces mayores que el número atómico del H_2O las diferencias entre los máximos del poder de frenado están entre el 46 % y el 82 %. Comparado con el IMFP, estas diferencias son mucho mayores lo cual puede atribuirse al factor de pérdida de energía considerado en el cálculo. Este fenómeno está asociado al crecimiento de la intensidad de la nube electrónica y a la disminución del IMFP del electrón conforme el número atómico del compuesto aumenta. Esto sugiere que la tasa de pérdida de energía por unidad de longitud sea mayor dada la interacción coulombiana recurrente del electrón con el medio. Los máximos de poder de frenado lineal son 35.287 eV/nm, 51.551 eV/nm, 61.643 eV/nm y 64.242 eV/nm, para H_2O , LiF , CaF_2 y Al_2O_3 , respectivamente.

Las valores del poder de poder de frenado lineal de colisión calculados para H_2O , LiF , CaF_2 y Al_2O_3 en el presente trabajo superan el intervalo de energía de cálculo presentado por los modelos de referencia (modelo de Bethe y ESTAR), obteniendo valores desde la energía de bandgap. Por medio de estos resultados se comprenderá de mejor manera la interacción del electrón con el medio a energías menores que lo publicado hasta el momento.

Se calculó la incertidumbre RMS por compuesto en un intervalo de energía desde 148 eV hasta 442 keV. Dicho intervalo se dividió tomando como parámetro las diferencias porcentuales con el programa ESTAR. Se observa que para energías por debajo de 1 keV la incertidumbre RMS es desde el 2 % hasta el 37 %, dependiendo del compuesto. Para energías intermedias, desde 1 keV hasta 55 keV, el RMS tiene un valor alrededor del 1 %. En este intervalo de energía los valores de poder de frenado obtenidos con el programa ESTAR son confiables a diferencia de los valores por debajo de 1 keV. Esto puede explicar la diferencia en las incertidumbres RMS obtenidas. Para energías mayores que 55 keV, el RMS es del orden del 3 %. Esto puede deberse a los efectos relativistas no considerados en este trabajo.

5.4.1. Comparaciones con modelos teóricos y publicaciones previas

Para analizar con mayor detalle las diferencias, se consideraron discrepancias porcentuales del poder de frenado lineal de colisión entre los resultados de este trabajo y los publicados previamente, y se reportan en las figuras 5.9, 5.10, 5.11 y 5.12. Los resultados de este trabajo son tomados como referencia, y se muestra en las gráficas con una línea horizontal azul fijada al cero por ciento en todo el intervalo de energías.

Como se muestra en la figura 5.9, se presentan comparaciones con el modelo clásico y el relativista de Bethe [21, 78] en agua líquida, considerando un par de potenciales de excitación distintos: 78 eV y 128 eV. El primer potencial mencionado se obtuvo del ICRU 90 [74] y el segundo de un cálculo teórico utilizando

la ec. (2.8). En principio, las diferencias entre los modelo clásico y relativista de Bethe considerando un potencial fijo para ambos modelos son del orden del 0 % al 4 % para energías desde 100 eV hasta 442 keV, lo que indica una diferencia despreciable entre ambos modelos. Las diferencias entre el modelo clásico y el relativista de Bethe sugieren que las contribuciones relativistas consideradas en este último no se manifiestan en dicho intervalo de energías, lo que se puede interpretar como una sub-estimación del poder de frenado si se consideran los valores obtenidos con ESTAR.

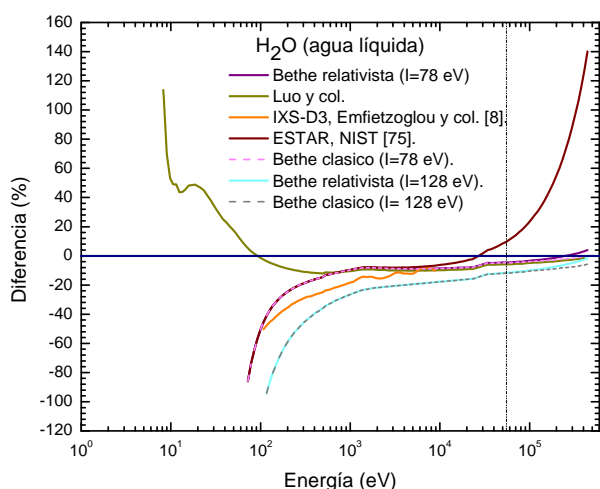


Figura 5.9: Diferencias porcentuales del poder de frenado lineal de colisión entre este trabajo y modelos teóricos en H_2O .

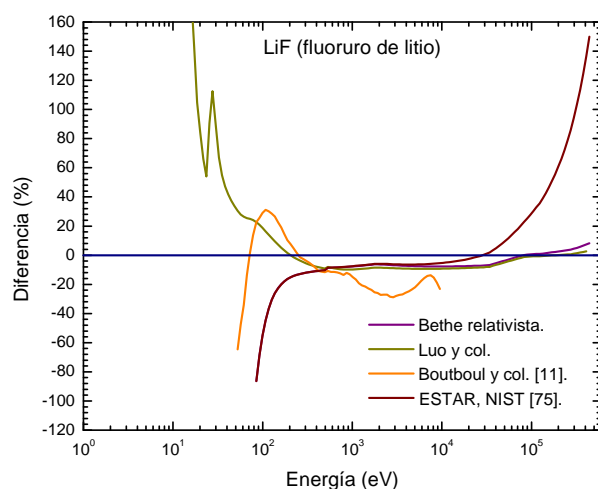


Figura 5.10: Diferencias porcentuales del poder de frenado lineal de colisión entre este trabajo y modelos teóricos en LiF .

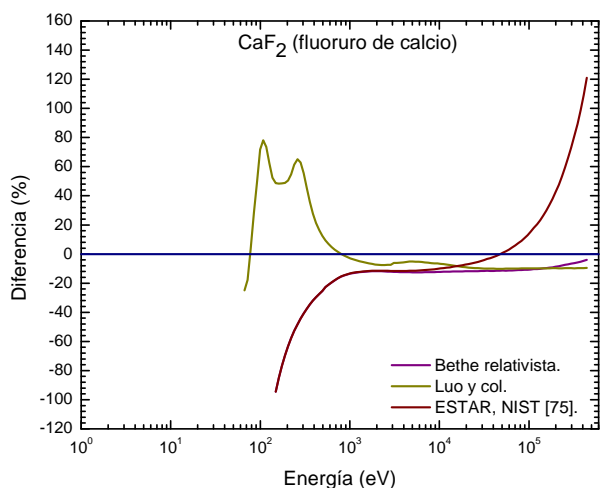


Figura 5.11: Diferencias porcentuales del poder de frenado lineal de colisión entre este trabajo y modelos teóricos en CaF_2 .

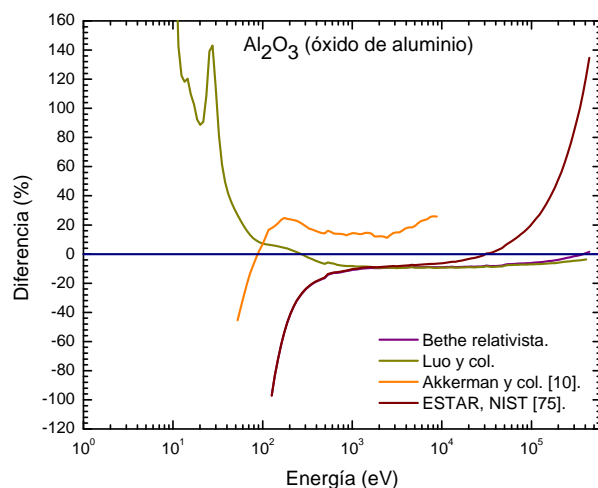


Figura 5.12: Diferencias porcentuales del poder de frenado lineal de colisión entre este trabajo y modelos teóricos en Al_2O_3 .

5. DISCUSIÓN

La diferencia entre el modelo relativista con un potencial de 78 eV y otro de 128 eV en H_2O , es menor que el 10 % para energías mayores que 12 keV, mientras que para energías menores que 12 keV puede ser de hasta 900 %. Estos resultados sugieren una alta sensibilidad al potencial de excitación; mientras que el potencial de excitación es mayor, el poder de frenado lineal de colisión, es menor. Esto se debe a que mientras mayor sea el potencial de excitación, la descripción de la interacción entre el electrón incidente y el electrón orbital estará más limitada debido a su relación con la aproximación de Born, que establece que la energía cinética del electrón incidente debe ser mucho mayor que el potencial mencionado. Por lo que es pertinente considerar el potencial de excitación más adecuado.

El acuerdo entre el modelo relativista de Bethe y este trabajo para H_2O (con potencial de excitación igual a 78 eV), LiF , CaF_2 y Al_2O_3 muestra una diferencia porcentual menor que 10 % para energías mayores que 1 keV. A bajas energías las discrepancias son mayores dadas las limitaciones del modelo [24].

En las figuras 5.9, 5.10, 5.11 y 5.12 se observa que para energías entre 1 keV y 55 keV los cálculos de este trabajo y ESTAR del NIST [75] mantienen diferencias porcentuales por debajo del 10 % para los cuatro compuestos. Sin embargo, para energías mayores que 55 keV las diferencias porcentuales son hasta del 140 %. Este fenómeno se debe al efecto relativista derivado del movimiento de la partícula en el medio. Si la velocidad de la partícula se considera relativista, entonces, la pérdida de energía de la partícula se da por dos efectos: primero, el efecto de retardo o fuerza de retardo, originado por el campo eléctrico inducido por el electrón incidente al interactuar con el medio que en última instancia ejerce una fuerza sobre el electrón en movimiento, provocando pérdidas en la energía cinética que posea [79]. Segundo, es necesario considerar que a energías cinéticas relativamente altas el campo eléctrico asociado al electrón es más intenso en la dirección ortogonal al movimiento [80].

Si se toma en cuenta una carga puntual estática, su campo eléctrico es radial. En cambio, si se considera una carga puntual con velocidad relativista la intensidad del campo eléctrico es más intenso en la dirección ortogonal al movimiento de la partícula y es más débil en la dirección paralela. La intensidad del campo eléctrico varía en función de la energía cinética del electrón. Por ejemplo, si se compara la intensidad del campo eléctrico generado por una partícula cargada estática y por una partícula cargada con una energía cinética de 55 keV (energía a partir de la cual se observan diferencias con ESTAR mayores que 10 %), el campo eléctrico es 12 % más intenso (en la dirección ortogonal movimiento) en el último caso. A energías cinéticas alrededor de 442 keV el campo eléctrico es 87 % más intenso perpendicularmente al movimiento del electrón.

También, este fenómeno se traduce como un aumento en la ionización del medio [21]. Aunque el parámetro de impacto b sea grande el electrón puede interactuar con mayor intensidad con el medio, ionizándolo. Por lo que el IMFP de la partícula decrece en este intervalo de energía, es decir, la pérdida de energía cinética por colisiones inelásticas aumenta por unidad de longitud que recorre la partícula. A energías aún más altas, la ionización total del medio decrece debido al efecto de apantallamiento de los electrones orbitales y al efecto de polarización que toma mayor relevancia. Sin embargo, en el rango de energías presentadas no se da este último efecto de polarización.

Comparando el poder de frenado de colisión calculado en este trabajo con el modelo de Luo y col.

[49] se muestran discrepancias porcentuales menores que el 10% para energías mayores que 100 eV para los cuatro compuestos. Además, el modelo de Luo y col. alcanza intervalos de energía tan bajos como la energía de bandgap del compuesto, mientras que el modelo relativista de Bethe y el programa ESTAR sólo calculan valores de poder de frenado lineal de colisión hasta 70 eV. Esto es debido a la consideración del potencial de excitación variable tomado en cuenta por el modelo de Luo y col.

El potencial de excitación juega un papel central en los modelos teóricos de Bethe, ESTAR y Luo y col. De acuerdo con el modelo de Bethe, la energía de la partícula incidente debe ser mucho mayor que el potencial promedio de excitación/ionización. Por lo tanto, las interacciones que la partícula incidente pueda tener con los electrones orbitales de la capa de valencia, en donde el potencial de excitación/ionización es mucho menor, están restringidas. Tomando en cuenta esta limitación, Luo y col. proponen un modelo [49] en el cual el potencial de ionización varía en función de la energía del electrón incidente, así como el número efectivo de electrones totales Z_{ef} que participan en la interacción, modificando la ecuación de Bethe [ver ec. (2.4)] en términos I_{ef} y Z_{ef} .

Comparando los valores de poder de frenado de colisión aquí reportados y los publicados por Boutboul y col. [11] para LiF, se estiman diferencias del orden del 30% para energías entre 100 eV y 10 keV. Las diferencias con el modelo de Boutboul y col. se pueden deber al uso de la función de pérdida de energía utilizada en el cálculo del poder de frenado lineal de colisión.

Los cálculos teóricos reportados por Akkerman y col. [10] indican discrepancias considerables con los resultados presentados en este trabajo para Al_2O_3 . Las diferencias van desde -45% hasta 25%, para energías mayores que 174 y menores que 10 keV. Al observar las diferencias obtenidas entre este trabajo y Akkerman y col. [10] y Boutboul y col. [11] se concluye que existe una limitante en su modelo utilizado para el cálculo de poder de frenado lineal de colisión, que se hace más evidente al compararse con el modelo de Bethe.

Conclusiones

En este trabajo se calcularon el camino libre medio inelástico (IMFP), las secciones eficaces y el poder de frenado lineal de colisión para electrones en H_2O , LiF , CaF_2 y Al_2O_3 . En particular, los resultados de esta investigación sobresalen por el intervalo de energía utilizado que va desde la energía del bandgap del material hasta 442 keV. De nuestro conocimiento, sería la primera vez que se realiza este tipo de cálculo para los materiales dosimétricos a energías tan bajas como el bandgap.

Se ha observado que el valor mínimo del IMFP es una función del número atómico del material en cuestión (menor es el número atómico, mayor es el mínimo), mientras que la energía a la cual alcanza dicho mínimo es constante. Como consecuencia, los máximos de la sección eficaz, así como del poder de frenado son mayores cuando el número atómico crece. Pero, este crecimiento no es lineal con el número atómico. Por ejemplo, los máximos de las secciones eficaces crecen mucho más rápido que los máximos del poder de frenado, lo cual se asocia a los diferentes procesos físicos que intervienen.

El RMS, considerado como la incertidumbre mínima que pueden tener los cálculos, fue evaluado en este trabajo para el IMFP tomando como referencia la FPA (aproximación completa de Penn) para el H_2O y LiF , la TPP-2M (Tanuma, Powell y Penn) para el CaF_2 y la RFPA (ecuación relativista modificada de Bethe) para el Al_2O_3 . También, se realizó el cálculo de RMS para el poder de frenado considerando el programa ESTAR del NIST como referencia. Los resultados sugieren una incertidumbre menor que 0.5% para el IMFP para energías entre 40 eV - 30,000 eV y hasta 170% para energías menores que 40 eV. Para el poder de frenado lineal de colisión, las incertidumbres son alrededor de 37% para energías menores que 1,000 eV, 1% para energías entre 1,000 eV - 55,000 eV y del orden del 3% para energías mayores que 55,000 eV.

La incertidumbre relativa de 170% observada en los valores de IMFP para energías menores que 40 eV no es sorprendente ya que los resultados obtenidos con el FPA son considerados confiables a energías mayores que o iguales a 50 eV. Pero, tomando en cuenta la validación del método utilizado en este trabajo a través de experimentos realizados en el NIST, se puede concluir que los resultados de este trabajo son relativamente confiables con un incertidumbre menor. Además, a pesar de que la FPA es considerada como el método más robusto para el cálculo del IMFP o de las secciones eficaces de electrones con energía tan baja como 50 eV, el uso del SPA para determinar la función de excitación muestra un buen acuerdo

con la FPA a energías hasta 40 eV. Basado en este resultado, se sugiere el uso de la FPA en lugar del SPA para la función de excitación para mejorar los cálculos a energías más bajas.

Con respecto a energías mayores que 55,000 eV, la FPA así como el programa ESTAR del NIST muestran valores superiores que los resultados de este trabajo para el IMFP y el poder de frenado lineal de colisión, respectivamente. Estas discrepancias se deben a efectos relativistas que no fueron tomados en cuenta en este trabajo por lo que se recomienda realizar cálculos que incluyan dichos efectos.

Se concluye que el uso de la función de excitación para el cálculo del IMFP y las secciones eficaces puede considerarse un método robusto si se incluyen los efectos relativistas y se toma en cuenta la FPA. Así, este método podrá ser aplicado a cualquier compuesto.

Bibliografía

- [1] J. C. Ashley and C. J. Tung. Electron inelastic mean free paths in several solids for 200 eV \leq E \leq 10 keV. *Surface and Interface Analysis*, 4(2):52–55, 1982. [1](#)
- [2] J. C. Ashley. Interaction of low-energy electrons and positrons with condensed matter: stopping powers and inelastic mean free paths from optical data. Technical report, Oak Ridge National Division, Oak Ridge, Tennessee, USA, 1989. [1](#)
- [3] S. Tanuma. Calculations of electron inelastic mean free paths. IX. Data for 41 elemental solids over the 50 eV to 30 keV range. *Surface and Interface Analysis*, 43(3):689–713, 2010. [1](#)
- [4] H. Shinotsuka, S. Tanuma, C. J. Powell, and D. R. Penn. Calculations of electron inelastic mean free paths. X. Data for 41 elemental solids over the 50eV to 200keV range with the relativistic full Penn algorithm. *Surface and Interface Analysis*, 47(9):871–888, 2015. [1](#), [23](#), [29](#)
- [5] S. Tanuma, C. J. Powell, and D. R. Penn. Calculations of electron inelastic mean free paths. V. Data for 14 organic compounds over the 50–2000 eV range. *Surface and Interface Analysis*, 21(3):165–176, 1993. [1](#)
- [6] S. Tanuma, C. J. Powell, and D. R. Penn. Calculations of electron inelastic mean free paths. III. Data for 15 inorganic compounds over the 50–2000 eV range. *Surface and Interface Analysis*, 17(13):927–939, 1991. [1](#), [22](#), [23](#), [24](#), [28](#), [29](#), [31](#), [35](#), [41](#)
- [7] H. Shinotsuka, B. Da, S. Tanuma, H. Yoshikawa, C. J. Powell, and D. R. Penn. Calculations of electron inelastic mean free paths. XI. Data for liquid water for energies from 50 eV to 30 keV. *Surface and Interface Analysis*, 49(4):238–252, 2017. [1](#), [24](#), [28](#), [29](#), [31](#), [35](#), [41](#)
- [8] D. Emfietzoglou and H. Nikjoo. Accurate electron inelastic cross sections and stopping powers for liquid water over the 0.1-10 keV range based on an improved dielectric description of the Bethe surface. *Radiation Research*, 167(1):110–120, 2007. [2](#), [29](#), [30](#), [43](#)
- [9] D. Emfietzoglou, I. Kyriakou, R. Garcia-molina, and I. Abril. Inelastic mean free path of low-energy electrons in condensed media : beyond the standard models. *Surface and Interface Analysis*, 49:4–10, 2017. [2](#), [12](#), [29](#), [43](#)

-
- [10] A. Akkerman, T. Boutboul, A. Breskin, R. Chechik, A. Gibrekhterman, and Y. Lifshitz. Inelastic Electron Interactions in the Energy Range 50 eV to 10 keV in Insulators: Alkali Halides and Metal Oxides. *Physica Status Solidi (B)*, 198(2):769–784, 1996. [2](#), [30](#), [43](#), [47](#)
- [11] T. Boutboul, A. Akkerman, A. Breskin, and R. Chechik. Electron inelastic mean free path and stopping power modelling in alkali halides in the 50 eV–10 keV energy range. *Journal of Applied Physics*, 79(9):6714–6721, 1996. [2](#), [23](#), [30](#), [47](#)
- [12] D. R. Penn. Electron mean free paths for free-electron-like materials. *Physical Review B*, 13(12):5248–5254, 1976. [1](#), [18](#), [20](#), [73](#)
- [13] R. W. Rendell and D. R. Penn. Spin Dependence of Electron mean free path in Fe, Co and Ni. *Physical review letters*, 45(25):2057–2060, 1980. [1](#), [31](#)
- [14] S. H. Pandya, B. G. Vaishnav, and K. N. Joshipura. Electron inelastic mean free paths in solids: A theoretical approach. *Chinese Physics B*, 21(9):093402, 2012. [2](#), [30](#), [43](#)
- [15] A. Cabrera-Santiago and G. Massillon-JL. Track-average LET of secondary electrons generated in LiF : Mg , Ti and liquid water. *Physics in Medicine & Biology*, 61:7919, 2016. [2](#)
- [16] A. Cabrera-santiago and G. Massillon-JL. Secondary Electron Fluence Generated in LiF : Mg , Ti by Low-Energy Photons and its contribution to the Absorbed Dose. *AIP*, 1747(020004), 2016. [2](#)
- [17] H. Shinotsuka, S. Tanuma, C. J. Powell, and D. R. Penn. Calculations of electron stopping powers for 41 elemental solids over the 50 eV to 30 keV range with the full Penn algorithm. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 270(1):75–92, 2012. [2](#), [23](#), [32](#)
- [18] D. R. Penn. Electron mean-free-path calculations using a model dielectric function. *Physical review B*, 35(2):482–486, 1987. [2](#), [15](#), [18](#), [19](#), [31](#), [71](#)
- [19] E.B. Podgorsak. *Biological and Medical Physics, Biomedical Engineering*. Springer, segunda ed edition, 2008. [4](#), [6](#), [10](#)
- [20] F. H. Attix. *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*. Willey-VCH Verlag GmbH and Co. KGaA, Madison, Wisconsin, 2004. [6](#), [10](#)
- [21] J. Ashkin, H. A. Bethe, K. T. Baidridge, and H. H. Ramsey. *Experimental nuclear physics*. John Wiley and Sons, 1953. [7](#), [8](#), [9](#), [44](#), [46](#)
- [22] H. A. Bethe. Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie. *Annalen der Physik*, 397(3):325–400, 1930. [8](#)
- [23] N. F. Mott and H. S. W. Massey. *Theory of Atomic Collisions*. Oxfot University Press, Londres, tercera edition, 1971. [8](#)
- [24] N. Zettili. *Quantum Mechanics*. Wiley, Jacksonville, USA, segunda edition, 2009. [9](#), [46](#)

- [25] H. O. Wyckoff. Stopping Powers for Electrons and Positrons. Technical report, International Commission on Radiation Units and Measurements, 1984. [9](#), [10](#), [30](#)
- [26] R. D. Evans. *The atomic nucleus*. McFraw-Hill, Boston, Massachusetts, EUA, terceira edition, 1955. [10](#)
- [27] R. Hsu. Mean excitation energy of the elements for proton penetration in matter. Technical report, Departamento de física, National Taiwan Normal University, Taiwan, 1979. [10](#)
- [28] A. P. Flory. *Optical thin films and coatings Related titles* ∴. Woodhead Publishing Limited, 2013. [11](#), [13](#)
- [29] C. Kittel. *Introduction to solid state physics*. John Wiley and Sons, Berkeley, California, USA, octava edition, 2005. [11](#), [16](#)
- [30] A. V. Andrade-Neto. Dielectric function for free electron gas: comparison between Drude and Lindhard models Função dielétrica de um gás de elétrons: comparação entre os modelos de Drude e de Lindhard. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 39(2), 2017. [11](#), [12](#), [72](#)
- [31] A. Schönhals. Dielectric spectroscopy on the dynamics of amorphous polymeric systems. Technical report, 1998. [11](#)
- [32] E. D. Palik. Chapter 1. Introductory Remarks. In *Handbook of Optical Constants of Solids*, pages 36–64. Academic Press, 1985. [11](#)
- [33] E. D. Palik. Chapter 3 Dispersion Theory , Sum Rules , and Their Application to the Analysis of Optical Data. In *Handbook of Optical Constants of Solids*, pages 35–68. 1985. [11](#), [12](#), [22](#), [23](#), [74](#)
- [34] B. L. Henke, E. M. Gullikson, and J. C. Davis. x-ray interactions: photoabsortion, scattering, transmission and reflection at E= 50-30,000 eV, Z=1-92 eV. *Atomic data and nuclear data tables*, 54(2):181–342, 1993. [12](#), [13](#), [14](#), [15](#)
- [35] Z. J. Ding and R. Shimizu. A Monte Carlo modeling of electron interaction with solids including cascade secondary electron production. *Scanning*, 18(2):92–113, 1996. [12](#), [19](#), [20](#), [73](#)
- [36] B. L. Henke, E.M. Gullikson, and J.C. Davis. X-Ray Interactions With Matter: Index of refraction, 1993. [14](#), [25](#)
- [37] C.T. Chantler, K. Olsen, R.A. Dragoset, J. Chang, A.R. Kishore, S.A. Kotochigova, and D.S. Zucker. X-Ray Form Factor, Attenuation and Scattering Tables (version 2.1). *NIST*, <http://physics.nist.gov/ffast>, 2005. [14](#), [25](#)
- [38] B. L. Henke, J.C. Davis, E.M. Gullikson, and R.C.C. Perera. A Preliminary Report on X-ray Photoabsorption Coefficients and Atomic Scattering Factors for 92 Elements in the 10-10,000 eV Region. Technical Report 1, Lawrence Berkeley Laboratory, Universidad de California, Berkeley, California, 1988. [14](#)
- [39] H. Fröhlich and H. Pelzer. Plasma Oscillations and Energy Loss of Charged Particles in Solids. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 68(6):525–529, 1955. [15](#)

-
- [40] D. Pines and P. Nozières. *The theory of quantum liquids*. ABP, 1966. [16](#), [19](#)
- [41] C. J. Powell and A. Jablonski. Evaluation of Calculated and Measured Electron Inelastic Mean Free Paths Near Solid Surfaces. 28(1):21–59, 1999. [16](#), [19](#), [21](#), [31](#)
- [42] C. J. Powell and A. Jablonski. Evaluation of electron inelastic mean free paths for selected elements and compounds. *Surface and Interface Analysis*, 114(October 1999):108–114, 2000. [16](#)
- [43] A. Jablonski. Determination of the IMFP from electron elastic backscattering probability. *Surface and Interface Analysis*, 595(March):582–595, 2000. [16](#)
- [44] J. J. Quinn and R. A. Ferrell. Electron Self-Energy Approach to Correlation in a Degenerate Electron Gas. *Physical Review*, 1(8), 1958. [17](#), [70](#)
- [45] C. J. Tung, J. C. Ashley, and R. H. Ritchie. Electron inelastic mean free paths and energy losses in solids II. Electron gas statistical model. *Surface Science*, 81(2):427–439, 1979. [18](#), [71](#)
- [46] J. W. Robinson. *Atomic Spectroscopy*. Marcel Dekker, 2da edition, 1996. [21](#)
- [47] R. F. Egerton. *Electron Energy-Loss Spectroscopy in the Electron Microscope*. Springer, 3ra edition, 2011. [21](#), [22](#)
- [48] J. M. Fernandez-Varea, R Mayol, D Liljequist, and F Salvat. Inelastic scattering of electrons in solids from a generalized oscillator strength model using optical and photoelectric data. *J. Phys. Condens. Matter* 5, pages 3593–3610, 1993. [21](#), [22](#)
- [49] S. Luo, X. Zhang, and D. C. Joy. Experimental determinations of electron stopping power at low energies. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 117(1-3):235–242, 1991. [22](#), [31](#), [47](#)
- [50] D. Tanner. Kramers-Kronig Relations and Sum Rules. In *Optical Effects in Solids*, volume 1, pages 150–172. [22](#)
- [51] K. Fisher, J. Daniels, and S. Hess. *Tracts in modern physics Vol. 54*. springer- Verlag, 1970. [22](#), [74](#)
- [52] F. Wooten. *Optical Properties Of Solids*. Academic Press, California, 1972. [22](#), [75](#)
- [53] V. Kortov. Materials for thermoluminescent dosimetry: Current status and future trends. *Radiation Measurements*, 42(4-5):576–581, 2007. [23](#), [24](#)
- [54] J. Azorin-Nieto. Present status and future trends in the development of thermoluminescent materials. *Applied Radiation and Isotopes*, 117:135–142, 2016. [23](#)
- [55] M. S. Yunusov, A. N. Tsoi, K. M. Muminkhodzhaev, and V. Ya Khaimov-Mal’kov. Using thermoluminescence of ruby for the dosimetry of gamma radiation. *Soviet Atomic Energy*, 36(4):396–398, 1974. [23](#)
- [56] D. Lapraz, P. Lacconi, D. Daviller, and B. Guilhot. Thermostimulated Luminescence and Fluorescence of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3 : \text{Cr}^{3+}$ Samples (Ruby). *Physica Status Solidi*, 521(2):521–531, 1991. [23](#)
-

- [57] S. W. S. McKeever. *Thermoluminescence of solids*. Cambridge university press, Melbourne, Sidney, 1983. [23](#)
- [58] R. T. Poole, J. Liesegang, R. C. G. Leckey, and J. G. Jenkin. Electronic band structure of the alkali halides. II. Critical survey of theoretical calculations. *Physical Review B*, 44(8):3955–3962, 1975. [23](#), [28](#)
- [59] J. Seuntjens, M. Olivares, M. Evans, and E. Podgorsak. Absorbed dose to water reference dosimetry using solid phantoms in the context of absorbed-dose protocols. *Medical physics*, 32(9):2945–2953, 2005. [24](#)
- [60] A. Shimkevich. Electrochemical View of the Band Gap of Liquid Water for Any Solution. *World Journal of Condensed Matter*, 4:243–249, 2014. [24](#), [28](#)
- [61] E. Cadelano and G. Cappellini. Electronic structure of fluorides: General trends for ground and excited state properties. *European Physical Journal B*, 81(1):115–120, 2011. [24](#), [28](#)
- [62] P. Avouris and R. Wolkow. Scanning tunneling microscopy of insulators: CaF₂ epitaxy on Si (111). *Applied Physics Letters*, 55(11):1074–1076, 1989. [24](#), [28](#)
- [63] J. Azorin-Nieto. Preparation methods of thermoluminescent materials for dosimetric applications: An overview. *Applied Radiation and Isotopes*, 83:187–191, 2014. [24](#)
- [64] W. J. Tropsf and M. E. Thomas. Aluminum Oxide (Al₂O₃) Revisited. In *Handbook of Optical Constants of Solids*, pages 653–682. 1997. [24](#)
- [65] E. D. Palik. Commercially pure Binary Oxides. In *Handbooks of monochromatic XPS spectra*, volume 3, pages 43–66. 2005. [24](#)
- [66] M. R. Querry, D. M. Wieliczka, and D. J. Segelstein. Water (H₂O). In *Handbook of Optical Constants of Solids*, number 2. Academic Press, 1991. [25](#)
- [67] H. Hayashi, N. Watanabe, Y. Udagawa, and C. Kao. The complete optical spectrum of liquid water measured by inelastic x-ray scattering. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 97(12):6264–6, 2000. [25](#)
- [68] G. Massillon-JL. Comunicación privada, 2017. [25](#)
- [69] D. F. Bezuidenhout. Calcium Fluoride (CaF₂). In *Handbook of Optical Constants of Solids*. Academic Press, 1991. [25](#)
- [70] J. William and M. E. Thomas. Aluminum Oxide (Al₂O₃) Revisited. In *Handbook of Optical Constants of Solids*. Academic Press, 1998. [25](#), [28](#)
- [71] C J Powell and A Jablonski. NIST Standard Reference Database 71. NIST Electron Inelastic-Mean-Free-Path Database. Technical report, NIST, 2010. [26](#), [31](#)
- [72] J. S. Villarrubia, A. E. Vladár, B. Ming, R. J. Kline, D. F. Sunday, J. S. Chawla, and S. List. Scanning electron microscope measurement of width and shape of 10nm patterned lines using a JMONSEL-modeled library. *Ultramicroscopy*, 154:15–28, 2015. [27](#), [28](#), [41](#)

- [73] C. Powell. Comunicación privada, 2017. [29](#), [30](#), [35](#), [41](#)
- [74] ICRU report 90. *Key Data for Ionizing-Radiation Dosimetry: Measurement Standards and Applications*, volume 14. 2016. [30](#), [31](#), [44](#)
- [75] M. J. Berger, J. S Coursey, M. A. Zucker, and J. Chang. ESTAR, PSTAR, and ASTAR: Computer Programs for Calculating Stopping-Power and Range Tables for Electrons, Protons, and Helium Ions (version 1.2.3). *NIST*, <http://physics.nist.gov/Star>, 2005. [30](#), [31](#), [46](#)
- [76] S. Holmes. RMS error. *Stanford web*: <http://statweb.stanford.edu/~susan/courses/s60/split/node60.html>, 2000. [31](#)
- [77] A. E. Vladár, P. Cizmar, J. S. Villarrubia, and M. T. Postek. Can We Get 3D CD Metrology Right? *Proc. of SPIE*, 8324:1–13, 2012. [41](#)
- [78] H. A. Bethe. *Elementary Nuclear Theory*. John Wiley and Sons, 1947. [44](#)
- [79] F. J. García de Abajo. Relativistic energy loss and induced photon emission in the interaction of a dielectric sphere with an external electron beam. *Physical Review B*, 59(4):3095–3107, 1999. [46](#)
- [80] R. Feynman. *The Feynman Lectures on Physics*, volume 2. 1963. [46](#)

Tablas de cálculos

A.1. Camino libre medio inelástico

Energía [eV]	Camino libre medio inelástico [nm]			
	H ₂ O	LiF	CaF ₂	Al ₂ O ₃
8.2	25.820	-	-	-
8.3	25.038	-	-	-
8.8	-	-	-	965000.464
9.0	20.626	-	-	964286.042
9.8	16.799	-	-	1377.612
10.6	13.753	-	-	269.893
11.5	11.281	-	-	124.609
12.1	-	-	7.050	-
12.4	9.285	-	6.864	71.047
13.5	7.703	-	6.327	44.060
14.3	-	182.898	-	-
14.6	6.429	111.031	5.762	28.271
15.8	5.365	33.901	5.150	18.416
17.1	4.452	17.180	4.485	12.671
18.5	3.716	10.092	3.778	9.051
20.1	3.127	6.937	3.121	6.772
21.8	2.654	5.195	2.593	5.253
23.6	2.274	4.188	2.197	4.153

Tabla A.1: Camino libre medio inelástico calculada por compuesto I.

Energía [eV]	Camino libre medio inelástico [nm]			
	H ₂ O	LiF	CaF ₂	Al ₂ O ₃
25.5	1.971	3.587	1.927	3.288
27.7	1.733	3.058	1.727	2.528
30.0	1.550	2.372	1.568	1.893
32.5	1.408	1.905	1.436	1.453
35.2	1.298	1.620	1.322	1.184
38.1	1.212	1.431	1.223	1.015
41.3	1.144	1.297	1.140	0.903
44.7	1.091	1.199	1.067	0.826
48.4	1.050	1.124	0.997	0.769
52.5	1.018	1.067	0.929	0.726
56.8	0.994	1.023	0.866	0.694
61.6	0.978	0.990	0.814	0.671
66.7	0.967	0.965	0.774	0.654
72.2	0.964	0.948	0.746	0.643
78.3	0.966	0.937	0.727	0.636
84.8	0.974	0.928	0.715	0.634
91.8	0.987	0.923	0.710	0.637
99.5	1.004	0.921	0.711	0.642
107.8	1.025	0.922	0.715	0.651
116.7	1.051	0.927	0.724	0.662
126.5	1.080	0.936	0.736	0.675
137.0	1.114	0.949	0.752	0.690
148.4	1.151	0.965	0.771	0.708
160.8	1.193	0.984	0.795	0.727
174.2	1.239	1.008	0.822	0.749
188.7	1.290	1.035	0.854	0.773
204.4	1.345	1.067	0.889	0.799
221.4	1.405	1.102	0.928	0.828
239.8	1.470	1.141	0.971	0.859
259.8	1.540	1.185	1.017	0.892
281.5	1.617	1.233	1.067	0.929
304.9	1.699	1.286	1.121	0.969
330.3	1.787	1.343	1.179	1.013
357.8	1.883	1.406	1.242	1.060
387.6	1.985	1.473	1.309	1.111
419.9	2.095	1.547	1.381	1.165
454.9	2.214	1.626	1.457	1.224
492.7	2.341	1.711	1.539	1.287
533.8	2.477	1.803	1.626	1.355
578.2	2.624	1.902	1.719	1.429
626.4	2.780	2.008	1.819	1.508

Tabla A.1: Camino libre medio inelástico calculado por compuesto II (continuación).

A. TABLAS DE CÁLCULOS

Energía [eV]	Camino libre medio inelástico [nm]			
	H ₂ O	LiF	CaF ₂	Al ₂ O ₃
678.6	2.949	2.123	1.926	1.593
735.1	3.129	2.246	2.040	1.684
796.3	3.322	2.377	2.161	1.782
862.6	3.529	2.519	2.290	1.887
934.5	3.752	2.671	2.428	2.001
1012.3	3.990	2.833	2.575	2.122
1096.6	4.245	3.008	2.732	2.253
1188.0	4.518	3.195	2.900	2.393
1286.9	4.811	3.396	3.079	2.543
1394.1	5.124	3.611	3.271	2.704
1510.2	5.459	3.842	3.476	2.876
1636.0	5.818	4.089	3.696	3.061
1772.2	6.203	4.354	3.930	3.258
1919.8	6.615	4.637	4.181	3.471
2079.7	7.057	4.940	4.450	3.698
2253.0	7.531	5.265	4.737	3.942
2440.6	8.039	5.614	5.044	4.204
2643.9	8.584	5.987	5.373	4.484
2864.1	9.168	6.387	5.725	4.784
3102.6	9.794	6.816	6.102	5.107
3361.0	10.465	7.276	6.506	5.452
3641.0	11.186	7.769	6.939	5.823
3944.2	11.959	8.297	7.402	6.220
4272.7	12.788	8.864	7.898	6.646
4628.6	13.677	9.472	8.430	7.103
5014.1	14.631	10.124	8.999	7.592
5431.7	15.654	10.823	9.609	8.116
5884.0	16.752	11.573	10.263	8.679
6374.1	17.931	12.377	10.964	9.282
6905.0	19.195	13.240	11.715	9.928
7480.1	20.552	14.165	12.520	10.622
8103.1	22.009	15.159	13.382	11.365
8778.0	23.572	16.224	14.308	12.163
9509.1	25.250	17.367	15.299	13.018
10301.0	27.052	18.594	16.363	13.936
11159.0	28.986	19.911	17.503	14.920
12088.4	31.062	21.324	18.726	15.977
13095.2	33.292	22.841	20.038	17.110
14185.8	35.686	24.470	21.445	18.326
15367.3	38.257	26.218	22.954	19.630
16647.2	41.019	28.094	24.573	21.030

Tabla A.1: Camino libre medio inelástico calculado por compuesto **III** (continuación).

Energía [eV]	Camino libre medio inelástico [nm]			
	H ₂ O	LiF	CaF ₂	Al ₂ O ₃
18033.7	43.984	30.109	26.310	22.533
19535.7	47.169	32.272	28.173	24.145
21162.8	50.590	34.595	30.173	25.876
22925.4	54.266	37.090	32.319	27.733
24834.8	58.215	39.769	34.622	29.727
26903.2	62.458	42.647	37.095	31.867
29143.9	67.017	45.738	39.748	34.165
31571.2	71.915	49.057	42.596	36.632
34200.7	77.178	52.624	45.655	39.280
37049.1	82.834	56.456	48.935	42.124
40134.8	88.911	60.574	52.460	45.178
43477.6	95.444	64.997	56.245	48.458
47098.7	102.465	69.751	60.313	51.981
51021.4	110.011	74.859	64.679	55.766
55270.8	118.123	80.348	69.368	59.831
59874.1	126.844	86.247	74.404	64.197
64860.9	136.219	92.587	79.814	68.888
70263.0	146.299	99.591	85.626	73.928
76115.0	157.137	106.726	91.870	79.343
82454.3	168.789	114.600	98.577	85.161
89321.7	181.319	123.064	105.785	91.414
96761.1	194.794	132.163	113.529	98.131
104820.0	209.284	141.946	121.851	105.346
113550.2	224.868	152.464	130.795	113.096
123007.4	241.628	163.774	140.407	121.421
133252.4	259.655	175.936	150.737	130.365
144350.6	279.046	189.014	161.841	139.974
156373.1	299.903	203.079	173.776	150.300
169396.9	322.340	218.205	186.607	161.395
183505.5	346.477	234.473	200.400	173.318
198789.2	372.446	251.971	215.229	186.133
215345.7	400.384	270.793	231.171	199.905
233281.2	430.439	291.038	248.315	214.709
252710.5	462.779	312.818	266.750	230.622
273758.1	497.584	336.247	286.571	247.728
296558.6	535.032	361.454	307.887	266.118
321258.1	575.329	388.573	330.809	285.890
348014.7	618.664	417.752	355.462	307.148
376999.8	665.375	449.148	381.980	330.004
408399.0	715.586	482.931	410.503	354.583
442413.4	769.626	519.284	441.179	381.014

Tabla A.1: Camino libre medio inelástico calculado por compuesto IV (continuación).

A.2. Sección eficaz

Energía [eV]	Sección eficaz [10^{-17} cm^2]			
	H ₂ O	LiF	CaF ₂	Al ₂ O ₃
8.2	1.161	-	-	-
8.3	1.197	-	-	-
8.8	-	-	-	0.00004402
9.0	1.453	-	-	0.00004405
9.8	1.784	-	-	0.031
10.6	2.179	-	-	0.157
11.5	2.657	-	-	0.341
12.1	-	-	5.777	-
12.4	3.228	-	5.934	0.598
13.5	3.890	-	6.438	0.964
14.3	-	0.089	-	-
14.6	4.661	0.147	7.069	1.502
15.8	5.586	0.481	7.909	2.306
17.1	6.731	0.948	9.082	3.352
18.5	8.064	1.614	10.781	4.693
20.1	9.584	2.349	13.051	6.273
21.8	11.291	3.136	15.708	8.086
23.6	13.180	3.890	18.539	10.228
25.5	15.208	4.542	21.137	12.918
27.7	17.290	5.327	23.585	16.800
30.0	19.336	6.868	25.977	22.440
32.5	21.286	8.551	28.364	29.227
35.2	23.096	10.057	30.810	35.882
38.1	24.737	11.383	33.304	41.846
41.3	26.195	12.560	35.729	47.036
44.7	27.466	13.593	38.174	51.429
48.4	28.549	14.493	40.854	55.249

Tabla A.2: Sección eficaz calculada por compuesto I.

Energía [eV]	Sección eficaz [10^{-17} cm^2]			
	H ₂ O	LiF	CaF ₂	Al ₂ O ₃
52.5	29.442	15.271	43.844	58.483
56.8	30.142	15.926	47.034	61.176
61.6	30.654	16.459	50.038	63.336
66.7	30.982	16.875	52.624	64.959
72.2	31.097	17.178	54.599	66.061
78.3	31.017	17.392	56.026	66.743
84.8	30.768	17.549	56.967	66.955
91.8	30.375	17.651	57.368	66.730
99.5	29.858	17.693	57.287	66.170
107.8	29.237	17.667	56.967	65.280
116.7	28.527	17.568	56.259	64.175
126.5	27.746	17.402	55.341	62.915
137.0	26.911	17.173	54.164	61.532
148.4	26.031	16.888	52.829	60.026
160.8	25.118	16.549	51.234	58.419
174.2	24.184	16.163	49.551	56.711
188.7	23.237	15.734	47.695	54.946
204.4	22.284	15.271	45.817	53.148
221.4	21.332	14.781	43.891	51.320
239.8	20.388	14.282	41.948	49.465
259.8	19.455	13.745	40.050	47.594
281.5	18.538	13.209	38.174	45.709
304.9	17.641	12.669	36.335	43.822
330.3	16.767	12.127	34.547	41.933
357.8	15.918	11.589	32.795	40.065
387.6	15.096	11.057	31.116	38.237
419.9	14.302	10.533	29.494	36.450
454.9	13.538	10.021	27.956	34.705
492.7	12.803	9.521	26.466	32.998
533.8	12.098	9.035	25.050	31.337
578.2	11.423	8.565	23.695	29.727
626.4	10.779	8.112	22.392	28.172
678.6	10.164	7.675	21.148	26.670
735.1	9.578	7.255	19.966	25.225
796.3	9.021	6.853	18.848	23.837
862.6	8.491	6.468	17.787	22.507
934.5	7.989	6.100	16.776	21.232
1012.3	7.512	5.750	15.818	20.016
1096.6	7.061	5.416	14.909	18.856
1188.0	6.634	5.099	14.045	17.752
1286.9	6.230	4.797	13.229	16.703

Tabla A.2: Sección eficaz calculada por compuesto **II** (continuación).

A. TABLAS DE CÁLCULOS

Energía [eV]	Sección eficaz [10^{-17} cm^2]			
	H ₂ O	LiF	CaF ₂	Al ₂ O ₃
1394.1	5.849	4.511	12.452	15.709
1510.2	5.490	4.241	11.718	14.768
1636.0	5.151	3.984	11.020	13.879
1772.2	4.831	3.742	10.364	13.036
1919.8	4.530	3.513	9.742	12.239
2079.7	4.247	3.298	9.153	11.486
2253.0	3.979	3.094	8.599	10.776
2440.6	3.728	2.902	8.075	10.105
2643.9	3.492	2.721	7.581	9.473
2864.1	3.269	2.551	7.115	8.878
3102.6	3.060	2.390	6.675	8.318
3361.0	2.864	2.239	6.261	7.791
3641.0	2.679	2.097	5.870	7.295
3944.2	2.506	1.963	5.503	6.829
4272.7	2.344	1.838	5.157	6.391
4628.6	2.191	1.720	4.832	5.980
5014.1	2.048	1.609	4.526	5.595
5431.7	1.914	1.505	4.239	5.233
5884.0	1.789	1.408	3.969	4.894
6374.1	1.671	1.316	3.715	4.576
6905.0	1.561	1.230	3.477	4.278
7480.1	1.458	1.150	3.253	3.999
8103.1	1.362	1.075	3.044	3.737
8778.0	1.271	1.004	2.847	3.492
9509.1	1.187	0.938	2.662	3.263
10301.0	1.108	0.876	2.489	3.048
11159.0	1.034	0.818	2.327	2.847
12088.4	0.965	0.764	2.175	2.659
13095.2	0.900	0.713	2.033	2.483
14185.8	0.840	0.666	1.899	2.318
15367.3	0.783	0.621	1.774	2.164
16647.2	0.731	0.580	1.658	2.020
18033.7	0.681	0.541	1.548	1.885
19535.7	0.635	0.505	1.446	1.759
21162.8	0.592	0.471	1.350	1.642
22925.4	0.552	0.439	1.260	1.532
24834.8	0.515	0.410	1.176	1.429
26903.2	0.480	0.382	1.098	1.333
29143.9	0.447	0.356	1.025	1.243
31571.2	0.417	0.332	0.956	1.160
34200.7	0.388	0.310	0.892	1.081

Tabla A.2: Sección eficaz calculada por compuesto III(continuación).

Energía [eV]	Sección eficaz [10^{-17} cm^2]			
	H ₂ O	LiF	CaF ₂	Al ₂ O ₃
37049.1	0.362	0.289	0.832	1.008
40134.8	0.337	0.269	0.776	0.940
43477.6	0.314	0.251	0.724	0.877
47098.7	0.292	0.234	0.675	0.817
51021.4	0.272	0.218	0.630	0.762
55270.8	0.254	0.203	0.587	0.710
59874.1	0.236	0.189	0.547	0.662
64860.9	0.220	0.176	0.510	0.617
70263.0	0.205	0.164	0.476	0.575
76115.0	0.191	0.153	0.443	0.535
82454.3	0.178	0.142	0.413	0.499
89321.7	0.165	0.132	0.385	0.465
96761.1	0.154	0.123	0.359	0.433
104820.0	0.143	0.115	0.334	0.403
113550.2	0.133	0.107	0.311	0.376
123007.4	0.124	0.099	0.290	0.350
133252.4	0.115	0.093	0.270	0.326
144350.6	0.107	0.086	0.252	0.303
156373.1	0.100	0.080	0.234	0.283
169396.9	0.093	0.075	0.218	0.263
183505.5	0.086	0.069	0.203	0.245
198789.2	0.080	0.065	0.189	0.228
215345.7	0.075	0.060	0.176	0.212
233281.2	0.070	0.056	0.164	0.198
252710.5	0.065	0.052	0.153	0.184
273758.1	0.060	0.048	0.142	0.171
296558.6	0.056	0.045	0.132	0.160
321258.1	0.052	0.042	0.123	0.149
348014.7	0.048	0.039	0.115	0.138
376999.8	0.045	0.036	0.107	0.129
408399.0	0.042	0.034	0.099	0.120
442413.4	0.039	0.031	0.092	0.111

Tabla A.2: Sección eficaz calculada por compuesto **IV** (continuación).

A.3. Poder de frenado lineal de colisión

Energía [eV]	Poder de frenado lineal de colisión [eV/nm]			
	H ₂ O	LiF	CaF ₂	Al ₂ O ₃
8.2	0.061	-	-	-
8.3	0.072	-	-	-
8.8	-	-	-	0.00000315
9.0	0.151	-	-	0.00000321
9.8	0.260	-	-	0.007
10.6	0.401	-	-	0.037
11.5	0.584	-	-	0.085
12.1	-	-	0.722	-
12.4	0.820	-	0.777	0.157
13.5	1.116	-	0.963	0.269
14.3	-	0.074	-	-
14.6	1.487	0.126	1.211	0.447
15.8	1.969	0.437	1.559	0.734
17.1	2.614	0.909	2.071	1.139
18.5	3.423	1.636	2.858	1.700
20.1	4.422	2.502	3.978	2.415
21.8	5.636	3.508	5.390	3.304
23.6	7.090	4.550	7.009	4.441
25.5	8.782	5.525	8.626	5.988
27.7	10.665	6.811	10.277	8.408
30.0	12.676	9.536	12.038	12.203
32.5	14.764	12.744	13.951	17.121
35.2	16.883	15.844	16.066	22.306
38.1	18.994	18.803	18.428	27.302
41.3	21.070	21.658	20.952	31.994
44.7	23.089	24.403	23.720	36.343
48.4	25.039	27.039	26.983	40.481

Tabla A.3: Poder de frenado lineal de colisión calculado por compuesto I.

A.3 Poder de frenado lineal de colisión

Energía [eV]	Poder de frenado lineal de colisión [eV/nm]			
	H ₂ O	LiF	CaF ₂	Al ₂ O ₃
52.5	26.890	29.565	30.930	44.360
56.8	28.628	31.956	35.481	47.961
61.6	30.218	34.189	40.187	51.251
66.7	31.656	36.250	44.640	54.181
72.2	32.834	38.120	48.613	56.723
78.3	33.756	39.873	52.012	58.907
84.8	34.445	41.621	54.816	60.668
91.8	34.917	43.358	57.064	62.006
99.5	35.191	45.043	58.801	62.971
107.8	35.287	46.595	60.079	63.563
116.7	35.209	47.959	60.953	63.925
126.5	34.986	49.117	61.463	64.147
137.0	34.632	50.069	61.643	64.242
148.4	34.156	50.805	61.515	64.208
160.8	33.575	51.304	61.094	64.055
174.2	32.905	51.551	60.420	63.773
188.7	32.158	51.551	59.522	63.386
204.4	31.342	51.321	58.433	62.905
221.4	30.471	50.882	57.181	62.336
239.8	29.554	50.251	55.810	61.673
259.8	28.601	49.449	54.348	60.909
281.5	27.621	48.495	52.808	60.031
304.9	26.624	47.412	51.205	59.050
330.3	25.617	46.217	49.557	57.955
357.8	24.606	44.930	47.871	56.763
387.6	23.598	43.570	46.161	55.478
419.9	22.596	42.151	44.443	54.086
454.9	21.606	40.689	42.725	52.603
492.7	20.632	39.199	41.014	51.049
533.8	19.478	37.090	38.882	48.525
578.2	18.588	35.668	37.283	46.937
626.4	17.703	34.236	35.695	45.260
678.6	16.825	32.805	34.125	43.809
735.1	16.001	31.382	32.578	42.189
796.3	15.190	29.976	31.074	40.518
862.6	14.395	28.594	29.723	38.824
934.5	13.650	27.239	28.439	37.124
1012.3	12.924	25.918	27.205	35.431
1096.6	12.218	24.633	25.999	33.925
1188.0	11.558	23.387	24.858	32.355
1286.9	10.920	22.183	23.746	30.809

Tabla A.3: Poder de frenado lineal de colisión calculado por compuesto II (continuación).

A. TABLAS DE CÁLCULOS

Energía [eV]	Poder de frenado lineal de colisión [eV/nm]			
	H ₂ O	LiF	CaF ₂	Al ₂ O ₃
1394.1	10.317	21.021	22.663	29.342
1510.2	9.772	19.903	21.606	27.931
1636.0	9.254	18.829	20.571	26.565
1772.2	8.756	17.806	19.585	25.337
1919.8	8.281	16.859	18.654	24.104
2079.7	7.844	15.966	17.761	22.894
2253.0	7.413	15.118	16.890	21.714
2440.6	6.998	14.310	16.065	20.576
2643.9	6.620	13.539	15.267	19.478
2864.1	6.245	12.802	14.497	18.419
3102.6	5.887	12.099	13.752	17.486
3361.0	5.558	11.429	13.031	16.529
3641.0	5.236	10.789	12.345	15.611
3944.2	4.928	10.180	11.686	14.729
4272.7	4.645	9.600	11.053	13.887
4628.6	4.369	9.048	10.441	13.082
5014.1	4.106	8.524	9.864	12.374
5431.7	3.865	8.026	9.313	11.671
5884.0	3.632	7.553	8.786	11.000
6374.1	3.409	7.104	8.283	10.362
6905.0	3.205	6.679	7.802	9.754
7480.1	3.007	6.279	7.349	9.176
8103.1	2.820	5.900	6.918	8.656
8778.0	2.648	5.541	6.510	8.146
9509.1	2.483	5.202	6.121	7.659
10301.0	2.326	4.882	5.753	7.197
11159.0	2.182	4.581	5.407	6.758
12088.4	2.044	4.296	5.079	6.344
13095.2	1.913	4.028	4.769	5.951
14185.8	1.793	3.776	4.476	5.603
15367.3	1.678	3.538	4.203	5.257
16647.2	1.569	3.315	3.945	4.929
18033.7	1.470	3.104	3.703	4.621
19535.7	1.374	2.906	3.473	4.329
21162.8	1.285	2.720	3.256	4.054
22925.4	1.203	2.545	3.053	3.806
24834.8	1.119	2.381	2.862	3.565
26903.2	1.040	2.227	2.682	3.338
29143.9	0.967	2.083	2.512	3.123
31571.2	0.898	1.944	2.353	2.909
34200.7	0.834	1.817	2.202	2.735

Tabla A.3: Poder de frenado lineal de colisión calculado por compuesto III (continuación).

Energía [eV]	Poder de frenado lineal de colisión [eV/nm]			
	H ₂ O	LiF	CaF ₂	Al ₂ O ₃
37049.1	0.781	1.688	2.066	2.564
40134.8	0.730	1.568	1.934	2.398
43477.6	0.682	1.457	1.810	2.242
47098.7	0.636	1.353	1.692	2.095
51021.4	0.594	1.257	1.582	1.947
55270.8	0.555	1.167	1.483	1.814
59874.1	0.518	1.084	1.386	1.696
64860.9	0.484	1.007	1.296	1.585
70263.0	0.451	0.935	1.211	1.480
76115.0	0.420	0.869	1.130	1.381
82454.3	0.392	0.807	1.058	1.292
89321.7	0.366	0.752	0.988	1.207
96761.1	0.341	0.701	0.923	1.127
104820.0	0.317	0.653	0.861	1.051
113550.2	0.296	0.609	0.803	0.980
123007.4	0.276	0.569	0.750	0.915
133252.4	0.257	0.531	0.701	0.853
144350.6	0.239	0.494	0.653	0.795
156373.1	0.223	0.460	0.609	0.741
169396.9	0.207	0.429	0.568	0.691
183505.5	0.193	0.400	0.529	0.644
198789.2	0.180	0.372	0.493	0.600
215345.7	0.167	0.347	0.459	0.558
233281.2	0.156	0.323	0.427	0.519
252710.5	0.145	0.301	0.397	0.483
273758.1	0.135	0.280	0.370	0.450
296558.6	0.125	0.260	0.345	0.418
321258.1	0.116	0.242	0.321	0.389
348014.7	0.108	0.224	0.299	0.363
376999.8	0.101	0.208	0.278	0.337
408399.0	0.093	0.193	0.259	0.313
442413.4	0.087	0.179	0.240	0.290

Tabla A.3: Poder de frenado de colisión calculado por compuesto **IV** (continuación).

Desarrollos matemáticos

B.1. Propiedades de la delta de Dirac

Para los desarrollos matemáticos de los siguientes apéndices se utilizarán las siguientes propiedades

$$\delta(x) = \delta(-x), \tag{B.1}$$

$$\delta(x - a) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \left[\frac{\alpha}{\alpha^2 + (x - a)^2} \right], \tag{B.2}$$

$$\delta(x^2 - a^2) = (2a)^{-1} [\delta(x - a) + \delta(x + a)], \tag{B.3}$$

considerando $a > 0$.

$$\delta[f(q)] = \sum_i \frac{\delta(q - q_i)}{df(q_i)/dq}, \tag{B.4}$$

en este caso q_i es polo de δ .

$$\int f(t) \delta(t - T) dt = f(T), \tag{B.5}$$

considerando T un polo de δ .

B.2. Función de pérdida de energía de Lindhard

En esta sección se derivará la función de pérdida de energía de Lindhard [ec. (2.23)]. Considerando la función dieléctrica de Lindhard:

$$\epsilon_L(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_p(q)^2 - \omega_p^2 - \omega(\omega + i\gamma_q)}, \tag{B.6}$$

donde

$$\omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{m\epsilon_0}}, \quad (\text{B.7})$$

$$\omega_p(q)^2 = \omega_p^2 + \frac{1}{3}[v_F(\omega_p)q]^2 + (\hbar q^2/2m)^2, \quad (\text{B.8})$$

ϵ_L es la función dieléctrica de Lindhard, N es la densidad atómica, e la carga del electrón, m la masa del electrón, ϵ_0 la constante dieléctrica en el vacío, ω_p es la frecuencia de oscilación del plasma producto de la perturbación del estado meta-estable del sistema, $\omega_p(q)$ es la relación de dispersión que satisface la onda incidente al interactuar con el medio [ver ec. 2.14], v_F es la velocidad de Fermi, q es la magnitud del vector de onda \vec{q} asociado a la transferencia de momento¹, m es la masa del electrón y γ_p es la constante de amortiguamiento que describe la frecuencia de colisión de los electrones orbitales.

La ec. (B.6) se reescribe como:

$$\epsilon_L(\vec{q}, \omega) = \frac{\omega_p(q)^2 - \omega_p^2 - \omega(\omega + i\gamma_q)}{\omega_p(q)^2 - \omega_p^2 - \omega(\omega + i\gamma_q)} + \frac{\omega_p^2}{\omega_p(q)^2 - \omega_p^2 - \omega(\omega + i\gamma_q)}, \quad (\text{B.9})$$

que es igual a

$$\epsilon_L(\vec{q}, \omega) = \frac{\omega_p(q)^2 - \omega_p^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_q + \omega_p^2}{\omega_p(q)^2 - \omega_p^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_q} \quad (\text{B.10})$$

por lo que

$$\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)} = \frac{[\omega_p(q)^2 - \omega_p^2 - \omega^2] - i\omega\gamma_q}{[-\omega_p(q)^2 + \omega^2] + i\omega\gamma_q} \times \frac{[-\omega_p(q)^2 + \omega^2] - i\omega\gamma_q}{[-\omega_p(q)^2 + \omega^2] - i\omega\gamma_q}, \quad (\text{B.11})$$

entonces se obtiene

$$\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)} = \frac{[\omega_p(q)^2 - \omega_p^2 - \omega^2][-\omega_p(q)^2 + \omega^2] + i[-\omega^2 + \omega_p(q)^2 - \omega_p(q)^2 + \omega_p^2 + \omega^2]\omega\gamma_q}{[\omega^2 - \omega_p(q)^2]^2 + \omega^2\gamma_q^2}. \quad (\text{B.12})$$

Entonces, la función de pérdida de energía de Lindhard se escribe finalmente como

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] = \frac{\omega\gamma_q\omega_p^2}{[\omega^2 - \omega_p(q)^2]^2 + \omega^2\gamma_q^2}, \quad (\text{B.13})$$

También se derivan varias ecs. utilizadas por Penn para desarrollar la aproximación simple. La primer ec. a derivar es la función dieléctrica de Lindhard suponiendo $\gamma_q \rightarrow 0$. Para ello se utiliza la ec. (B.13) y se realizan varios cambios de variables. Sean

- $x = \omega$,

¹De acuerdo con De Broglie, se puede relacionar el vector de onda y el momento de una onda-partícula cuántica a través de \hbar .

- $\alpha = x\gamma_q$,
- $a = \omega_p(q)$.

La ec. (B.13) se reescribe como

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] = \omega_p^2 \frac{\alpha}{(x^2 - a^2) + \alpha^2}, \quad (\text{B.14})$$

se considera el límite cuando $\alpha \rightarrow 0$ y se hace uso de la ec. (B.2) de las propiedades de dirac, entonces

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] = \pi\omega_p^2 [\delta(x^2 - a^2)], \quad (\text{B.15})$$

entonces usando la ec. (B.3) se tiene

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] = \pi\omega_p^2 (2a)^{-1} [\delta(x - a) + \delta(x + a)] \quad (\text{B.16})$$

se toma en cuenta que $\delta(x + a) = 0$ ya que carece de sentido físico, sólo tiene sentido cuando la pérdida de energía satisface la función de dispersión. La función de pérdida de energía de Lindhard para $\gamma_q \rightarrow 0$ se escribe como

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] = \frac{\pi\omega_p^2}{2a} [\delta(x - a)], \quad (\text{B.17})$$

por lo tanto, cuando $\gamma_q \rightarrow 0$ se tiene

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] = \frac{\pi}{2} \frac{\omega_p^2}{\omega_p(q)} \delta[\omega - \omega_p(q)]. \quad (\text{B.18})$$

La ec. (B.18) es conocida como la aproximación simple de Penn, con la diferencia de que ω_p varía en función de la densidad electrónica, en este trabajo se uso esta ec. En el caso en el que se considera $q \rightarrow 0$, se sabe de la ec. (2.14) de la función de dispersión se cumple que $\omega_p(q) = \omega_p$, por lo que la ec. (B.18) se escribe como

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(0, \omega)}\right] = \frac{\pi}{2} \omega_p \delta[\omega - \omega_p], \quad (\text{B.19})$$

también, la ec. (B.19) se utilizó en este trabajo para el desarrollo del algoritmo de Penn.

B.3. Algoritmo de Penn

En esta sección se deriva la ec. (2.30), que representa la componente imaginaria de la auto-energía, hasta deducir la FPA. Entonces, $\Delta E(k)$ es la componente imaginaria de la “auto-energía” encontrada por Quinn [44] y se escribe como

$$\Delta E(k) = \frac{e^2}{2\pi^2} \int_0^{E-E_F} d(\hbar\omega) \int \frac{1}{q^2} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)}\right] \delta(\hbar\omega - E + E_{k-q}) d^3q, \quad (\text{B.20})$$

donde e es la carga del electrón, E_F es la energía de Fermi, q es el número de onda asociado a la transferencia de momento. La condición $\hbar\omega = E - E_{k-q}$, en la delta de Dirac, describe el proceso de colisión del electrón libre. E representa la energía cinética inicial del electrón y E_{k-q} es la energía cinética remanente del electrón, por lo que $\hbar\omega$ es la energía cinética pérdida por el electrón.

Penn describe la función de pérdida de energía para cualquier compuesto, considerando aquellos que no son gases de electrones, como los aislantes, en términos de la función de pérdida de energía de Lindhard para un gas de electrones. Matemáticamente se describe como [18]

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)}\right] = \int \frac{1}{\Omega} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, E(k) - E(k - q))}\right] d^3r, \quad (\text{B.21})$$

donde d^3r es un elemento de volumen d^3r , donde la densidad de electrones $n(r)$ es variable, Ω es la celda de volumen de Wigner-Seitz, $E(k) = E$ es la energía inicial del electrón y $E(k - q) = E_{k-q}$ es la energía remanente del electrón posterior a la colisión. En el límite óptico $q \rightarrow 0$ la función de pérdida de energía se escribe como

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(0, \omega)}\right] = \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega)}\right],$$

en el caso de la función de pérdida de energía de Lindhard:

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(0, \omega)}\right] = \frac{\pi}{2} \omega_p(r) \delta[\omega - \omega_p(r)], \quad (\text{B.22})$$

donde, en este caso, δ es la delta de Dirac. Se observa que ω_p depende de r puesto que la densidad de electrones varía con el radio, la frecuencia de plasma no es constante. Tomando las ecs. (B.21) y (B.22), se llega a

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega)}\right] = \frac{\pi}{2} \int \frac{\omega_p(r) \delta[\omega - \omega_p(r)]}{\Omega} d^3r, \quad (\text{B.23})$$

posteriormente, se modifica la variable de integración d^3r y se integra respecto a $d\omega_p(r)$, tomando una aproximación de Tung [45]:

$$\int d^3r = \int_0^\infty r^2 dr, \quad (\text{B.24})$$

esta expresión es adaptada por Penn considerando transformar la diferencial dr en términos de $d\omega_p(r)$

$$d^3r = r^2 \frac{d\omega_p(r)}{[\partial\omega_p(r)/\partial r]} \Big|_{\omega=\omega_p(r)},$$

entonces, la ecuación B.23 se reescribe de la forma

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega)}\right] = \frac{\pi}{2\Omega} \int_0^\infty r^2 \frac{1}{[\partial\omega_p(r)/\partial r]} \omega_p \delta(\omega - \omega_p(r)) d\omega_p(r), \quad (\text{B.25})$$

utilizando las ec. (B.1) y (B.5) como propiedad de integración en la ec. (B.25) se tiene

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega)}\right] = \frac{\pi}{2\Omega} \frac{r^2 \omega}{[\partial\omega_p(r)/\partial r]} \Big|_{\omega=\omega_p(r)}. \quad (\text{B.26})$$

B. DESARROLLOS MATEMÁTICOS

Del mismo modo, como se hizo anteriormente, se modifica la variable de integración r de la ecuación B.21 en términos de $\omega_p(r)$, pero de tal forma que en esta ocasión sea para todo momento q

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)}\right] = \int_0^\infty \frac{d\omega_p(r)}{\Omega} r^2 \frac{1}{[\partial\omega_p(r)/\partial r]} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right], \quad (\text{B.27})$$

considerando la ec. (B.26) se puede definir

$$G[\omega_p(r)] = \frac{2}{\pi\omega_p(r)} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega)}\right], \quad (\text{B.28})$$

usando la ec. (B.28) en la ec. (B.27) se obtiene

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)}\right] = \int_0^\infty G[\omega_p(r)] \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] d\omega_p(r). \quad (\text{B.29})$$

La ec. (B.29) se usa en la ec. (B.30) y se escribe como

$$\Delta E(k) = \frac{e^2}{2\pi^2} \int_0^\infty G[\omega_p(r)] d\omega_p(r) \int_0^{E-E_F} d(\hbar\omega) \int \frac{1}{q^2} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] \delta(\hbar\omega - E + E_{k-q}) d^3q. \quad (\text{B.30})$$

La integración sobre la transferencia de momento en la ec. (B.30) se modifica considerando el ángulo de dispersión entre el vector \vec{k} (antes de la colisión) y el vector \vec{q} (después de la colisión) [30], por lo que si

$$d^3q = 2\pi q^2 dq \sin\theta d\theta, \quad (\text{B.31})$$

además, se consideram una aproximación con respecto a la delta de Dirac [30]

$$\delta(\hbar\omega - E + E_{k-q}) \sim \frac{2m}{\hbar^2(2kq)}, \quad (\text{B.32})$$

entonces, la integral de transferencia de momento se escribe como

$$\frac{e^2}{2\pi^2} \int \frac{1}{q^2} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] \delta(\hbar\omega - E + E_{k-q}) d^3q = \frac{e^2}{2\pi^2} \int_{q^-}^{q^+} \frac{2\pi q^2}{q^2} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] \frac{2m}{\hbar^2(2kq)} dq \int_0^\pi \sin\theta d\theta, \quad (\text{B.33})$$

donde

$$q^\pm = k[1 \pm \sqrt{1 - (\hbar\omega/E)}] \quad (\text{B.34})$$

que resulta de la condición $\hbar\omega = E - E_{k-q}$. Tomando las aproximaciones anteriores se obtiene

$$\frac{e^2}{2\pi^2} \int \frac{2\pi q^2}{q^2} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] \delta(\hbar\omega - E + E_{k-q}) dq \int_0^\pi \sin\theta d\theta = \frac{2me^2}{\hbar^2\pi k} \int_{q^-}^{q^+} \frac{1}{q} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] dq, \quad (\text{B.35})$$

si el radio de Bohr en unidades gaussianas se escribe como $a_0 = \hbar^2/me^2$, entonces en la ec. de auto-energía se tiene

$$\Delta E(k) = \int_0^\infty G[\omega_p(r)] d\omega_p(r) \int_0^{E-E_F} d(\hbar\omega) \frac{2}{\pi a_0 k} \int_{q^-}^{q^+} \frac{1}{q} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon_L(q, \omega)}\right] dq. \quad (\text{B.36})$$

B.4. Función de excitación de Ding y Shimizu

Para la derivación de la función de excitación de Ding y Shimizu [ec. (2.37)] se toma la sección eficaz de Pines y Nozieré

$$\frac{d^2\lambda^{-1}}{d(\hbar\omega)dq} = \frac{1}{\pi a_0 E} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)}\right] \frac{1}{q}, \quad (\text{B.37})$$

además se consideran la ecs. (B.18), (B.28) y (B.29) derivadas por Penn para el tratamiento de la función de pérdida de energía

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)}\right] = \int_0^\infty \frac{2}{\pi\omega_p} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega_p)}\right] \frac{\pi}{2} \frac{\omega_p^2}{\omega_p(q)} \delta[\omega - \omega_p(q)] d\omega_p, \quad (\text{B.38})$$

desarrollando los términos se obtiene [35]

$$\mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)}\right] = \int_0^\infty \frac{\omega_p}{\omega_p(q)} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega_p)}\right] \delta[\omega - \omega_p(q)] d\omega_p, \quad (\text{B.39})$$

donde $\omega_p(q)$ es la relación de dispersión de plasma de un gas de electrones libres. Dicho parámetro es determinante para el calculo de probabilidad de producción de electrones secundarios a partir de la interacción de los electrones primarios con el medio. Ding, utiliza la función de dispersión y excitación en la que describe la probabilidad de que una partícula con energía cinética $E = (\hbar p)^2/2m$ pierda cierta energía $\Delta E = \hbar\omega$ y produzca una cascada de electrones secundarios.

Considerando la función de dispersión y las consideraciones anteriores, se reescribe la ec. (B.37) como

$$\frac{d\lambda^{-1}}{d(\hbar\omega)} = \int_0^\infty \frac{1}{\pi a_0 E} \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)}\right] \frac{dq}{q} \Theta\left[\frac{\hbar}{2m}(2pq - q^2) - \omega\right], \quad (\text{B.40})$$

donde $\Theta(x)$ vale uno si $x > 0$ y vale cero si $x < 0$ [12, 35]. Utilizando la ec. (B.39) en esta expresión se tiene

$$\frac{d\lambda^{-1}}{d(\hbar\omega)} = \frac{1}{\pi a_0 E} \int_0^\infty \omega_p \mathbf{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega_p)}\right] d\omega_p \int_0^\infty \frac{dq}{q\omega_p(q)} \delta[\omega - \omega_p(q)] \Theta\left[\frac{\hbar}{2m}(2pq - q^2) - \omega\right] \quad (\text{B.41})$$

Es necesario utilizar la ec. (B.1) para simplificar la expresión en la integral respecto a los momentos transferidos, por lo tanto se tiene

$$\delta(\omega - \omega_p(q)) = \frac{\hbar\omega\hbar\bar{q}}{(\hbar\omega)^2 - (\hbar\omega_p)^2 + \left(\frac{\hbar\bar{q}}{2m}\right)^2} \delta(q - \bar{q}), \quad (\text{B.42})$$

donde $\omega = \omega_p(\bar{q})$ representa la solución positiva a la relación de dispersión, vista anteriormente, y $q = \bar{q}$ es redefinida dada su relación con dicha función. Por lo que se la integral de transferencia de momento se escribe como [35]

$$\int_0^\infty \frac{dq}{q\omega_p(q)} \delta(\omega - \omega_p(q)) = \int_0^\infty \frac{dq}{q\omega_p(q)} \frac{\hbar\omega\hbar\bar{q}}{(\hbar\omega)^2 - (\hbar\omega_p)^2 + \left(\frac{\hbar\bar{q}}{2m}\right)^2} \delta(q - \bar{q}),$$

y utilizando la ec. (B.5) se obtiene

$$\int_0^\infty \frac{dq}{q\omega_p(q)} \delta(\omega - \omega_p(q)) = \frac{1}{\bar{q}\omega} \frac{\hbar\omega\hbar\bar{q}}{(\hbar\omega)^2 - (\hbar\omega_p)^2 + (\frac{\hbar\bar{q}}{2m})^2}. \quad (\text{B.43})$$

Por medio del desarrollo entorno a la transferencia de momento, la ec. (B.41) de la función de excitación se escribe finalmente como

$$\frac{d\lambda^{-1}}{d(\hbar\omega)} = \frac{1}{\pi a_0 E} \int_0^\infty \frac{\hbar\omega_p}{(\hbar\omega)^2 - (\hbar\omega_p)^2 + [\frac{\hbar q}{2m}]^2} \mathbf{Im}[\frac{-1}{\epsilon(\omega_p)}] d(\hbar\omega_p) \Theta[\frac{\hbar}{2m}(2kq - q^2) - \omega], \quad (\text{B.44})$$

la ec. (B.44) se utilizó para el cálculo de la función de excitación en este trabajo.

B.5. Suma de Kramers-Kronig

Para desarrollar la relación de Kramers-Kronig [ec. (2.46)] a utilizar se toma la ec.

$$1 - \mathbf{Re}[\frac{1}{\epsilon(\omega)}] = \frac{2}{\pi} \mathbf{P} \int_0^\infty \mathbf{Im}[\frac{-1}{\epsilon(\omega')}] \frac{\omega' d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}, \quad (\text{B.45})$$

la cual se puede descomponer haciendo pares conjugados con $\omega'^2 - \omega^2$ [51]

$$1 - \mathbf{Re}[\frac{1}{\epsilon(\omega)}] = \frac{1}{\pi} \mathbf{P} \int_0^\infty \left\{ \frac{\mathbf{Im}[\frac{-1}{\epsilon(\omega')}]}{\omega' - \omega} + \frac{\mathbf{Im}[\frac{-1}{\epsilon(\omega')}]}{\omega' + \omega} \right\} d\omega', \quad (\text{B.46})$$

considerando el límite de bajas frecuencias $\omega \rightarrow 0$ produce [51]

$$1 - \mathbf{Re}[\frac{1}{\epsilon(0)}] = \frac{1}{\pi} \mathbf{P} \int_0^\infty \left\{ \frac{\mathbf{Im}[\frac{-1}{\epsilon(\omega')}]}{\omega'} + \frac{\mathbf{Im}[\frac{-1}{\epsilon(\omega')}]}{\omega'} \right\} d\omega', \quad (\text{B.47})$$

para obtener finalmente

$$1 = \frac{2}{\pi} \mathbf{P} \int_0^\infty \frac{\mathbf{Im}[\frac{-1}{\epsilon(\omega')}]}{\omega'} d\omega' + \mathbf{Re}[\frac{1}{\epsilon(0)}], \quad (\text{B.48})$$

donde $\mathbf{Re}[1/\epsilon(0)]$ se obtiene a partir de la ec. (2.21a),

$$\mathbf{Re}[\frac{-1}{\epsilon(\vec{q}, 0)}] = \frac{-\epsilon_1}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} = \frac{1}{\epsilon_1(0)}, \quad (\text{B.49})$$

considerando de manera general que $\epsilon_2 = 2nk$, a bajas frecuencias tiende a cero puesto que el material refracta por completo a la onda incidente, es decir, $k = 0$, por lo que la componente $\epsilon_1 = n^2 + k^2$ tiende a $n^2(0)$ en dicho intervalo de frecuencias. Se sabe que [33]

$$\frac{1}{n^2(0)} = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\omega \omega^{-1} k(\omega) d\omega, \quad (\text{B.50})$$

entonces la ec. (B.49) se escribe como

$$1 = 1 + \frac{2}{\pi} [\mathbf{P} \int_0^\infty \frac{\mathbf{Im}[\frac{-1}{\epsilon(\omega')}] }{\omega'} d\omega' + \int_0^\omega \omega^{-1} k(\omega) d\omega]. \quad (\text{B.51})$$

La ec. anterior está escrita en términos del valor principal de Cauchy \mathbf{P} . Sin embargo, como estamos considerando el límite de las bajas frecuencias es necesario modificar la ec. (B.52) como sigue

$$1 = 1 + \frac{2}{\pi} [\mathbf{P} \int_0^\omega \frac{\mathbf{Im}[\frac{-1}{\epsilon(\omega')}] }{\omega'} d\omega' + \mathbf{P} \int_{\omega_c}^\infty \frac{\mathbf{Im}[\frac{-1}{\epsilon(\omega')}] }{\omega'} d\omega' + \int_0^\omega \omega^{-1} k(\omega) d\omega], \quad (\text{B.52})$$

donde ω es la frecuencia a partir de la cual el medio ya no absorbe ($k = 0$) y refracta por completo. Entonces, la segunda integral que incluye el valor principal de Cauchy tiende a cero, dado que $\epsilon_2 = 2n(0)$ en la función de pérdida de energía, por el intervalo de energías en el que está comprendido. La ec. (B.52) queda como [52]

$$1 = 1 + \frac{2}{\pi} [\int_0^\omega \frac{\mathbf{Im}[\frac{-1}{\epsilon(\omega')}] }{\omega'} d\omega' + \int_0^\omega \omega^{-1} k(\omega) d\omega], \quad (\text{B.53})$$

la ec. (B.53) se utilizó en este trabajo para la evaluación de los datos ópticos experimentales.