

2 ej m



# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

ANALISIS DE LA RADIACION EMITIDA DURANTE LA COLISION ION-ATOMO EN EL INTERVALO DE ENERGIA DE 1MeV-3MeV

**T E S I S**  
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE  
**F I S I C O**  
P R E S E N T A :  
**PEDRO / MORALES VERGARA**



FACULTAD DE CIENCIAS  
UNAM



1998  
FACULTAD DE CIENCIAS  
SECCION ESCOLAR

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

266272



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AVENIDA DE  
MEXICO

M. en C. Virginia Abrín Batule  
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la  
Facultad de Ciencias  
P r e s e n t e

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: "ANALISIS DE LA RADIACION EMITIDA DURANTE LA COLISION ION-ATOMO EN EL INTERVALO DE ENERGIA DE 1MeV.-3MeV"

realizado por PEDRO MORALES VERGARA  
con número de cuenta 9052255-8 , pasante de la carrera de Física  
Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis	DR. RAMIRO GARCIA GARCIA
Propietario	M. EN C. AUGUSTO CABRERA MANUEL
Propietario	DRA. ALICIA OLIVER GUTIERREZ
Suplente	DR. JOSE ALVARO CHAVEZ CARVAYAR
Suplente	DR. ALFONSO HUANOSTA TERA

Consejo Departamental de Física  
DR. ROBERTO ALEJANDRO RUELAS MAYORGA

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS  
FÍSICA

**DESEO AGRADECER :**

**A MIS SINODALES**

DR. RAMIRO GARCÍA GARCÍA  
DRA. ALICIA OLIVER GUTIÉRREZ  
M. EN C. AUGUSTO CABRERA MANUEL  
DR. JOSÉ ALVARO CHAVEZ CARVAYAR  
DR. ALFONSO HUANOSTA TERA

**POR LAS COMENTARIOS Y SUGERENCIAS PARA MEJORAR ESTE TRABAJO. PERO EN ESPECIAL ME GUSTARÍA DARLE LAS GRACIAS AL DR. RAMIRO GARCÍA POR HABER TENIDO PACIENCIA Y BRINDARME SU APOYO A LO LARGO DE LA REALIZACIÓN DE LA TESIS.**

**AL SR. RAÚL SANCHEZ Y FAMILIA**

**POR BRINDARME SU APOYO MATERIAL Y MORAL CUANDO NECESITE DE UN TECHO Y COBIJA SIN NINGÚN INTERÉS DE POR MEDIO. TAMBIÉN AGRADECERLE QUE EL TIEMPO QUE PERMANECI EN SU CASA ME HALLAN TRATADO COMO PARTE DE SU FAMILIA Y DE QUE USTED HALLA TENIDO CONFIANZA EN MI, POR LO CUAL ME SIENTO PROFUNDAMENTE ORGULLOSO. POR TODO ESTO Y MUCHO MÁS, LO MÍNIMO QUE PUEDO DECIRLE ES MUCHAS GRACIAS.**

**A MI NOVIA MITZI C. G.**

**POR APOYARME Y AGUANTARME EN TODO MOMENTO DESDE QUE LA CONOCI. TAMBIÉN DECIRLE QUE ME GUSTARÍA QUE ME SIGUIERA APOYANDO MÁS ADELANTE (Y ME BRINDARÁ EL APOYO QUESADILLESICO QUE ME CONQUISTO). EN POCAS PALABRAS DECIRLE QUE LA QUIERO MUCHO.**

**A MIS HERMANOS**

**POR BRINDARME SU APOYO HOY Y SIEMPRE (¡ESPERO!), Y POR DARMERME DE COMER COMO MARRANO CUANDO VOY A CASA. AUNQUE TODOS SON DIFERENTES ELLOS SABEN QUE LOS QUIERO. MUCHAS GRACIAS POR SER MIS HERMANOS.**

**A MI PADRE**

**DON ADAN MORALES OJEDA POR HABERME BRINDADO TODO SU APOYO SIEMPRE. DISCULPA SI TE COLOCO AL FINAL PERO ME GUSTARÍA QUE FUERA UNA PÁGINA SÓLO PARA TI.**

**SIEMPRE SE HE DICHO QUE NO CREO EN DIOS Y PUEDE SER QUE SEA VERDAD (DESDE QUE YO TENGO MI PROPIO CRITERIO), PERO NO ME IMPORTA. MUCHAS PERSONAS CREEN EN ALGUIEN IRREAL Y ESTA BIEN, PERO YO CREO EN ALGUIEN QUE PARA MÍ A SIDO TODO EN LA VIDA DESDE QUE TENGO CONCIENCIA. ESTA PERSONA SIEMPRE LA HE VISTO TRABAJAR Y LUCHAR POR SACARNOS ADELANTE MUCHAS VECES OLVIDÁNDOSE DE SÍ MISMO, POR ESO POR QUE NO ES BUENO CREER EN ALGUIEN QUE QUIERES Y QUE CUANDO NECESITES DE SUS CONSEJOS TENGAS EL APOYO, Y TAMBIÉN CREER EN UNO MISMO PARA SALIR ADELANTE (Y NO EN LOS HOROSCOPOS, ETC.).**

**DE ALGUNA MANERA TU HAS SIDO LA PERSONA MÁS INFLUYENTE EN MI VIDA, Y TE ESTOY COMPLETAMENTE AGRADECIDO POR APOYARNOS SIEMPRE A MI Y MIS HERMANOS CUANDO LO NECESITAMOS (Y CUANDO LO NECESITABAMOS MÁS). YO SE QUE UNAS GRACIAS ES POCO PARA LO MUCHO QUE HAS HECHO POR MI, POR ESO ME GUSTARÍA DEDICARTE\* EN ESPECIAL ESTE MI PRIMER TRABAJO SERIO COMO LOS INTERÉSES (YA QUE ESTAN DE MODA LAS DEUDAS Y LOS BANQUEROS EN ESTOS MOMENTOS) A TU CONFIANZA DEPOSITADA EN MÍ. NO ME QUEDAN MÁS PALABRAS, SOLO DECIRTE QUE AUNQUE NO SIEMPRE COINCIDIMOS IDEOLÓGICAMENTE TE RESPETO Y**

**TE QUIERO MUCHO.**

**GRACIAS PADRE**

**\* ME GUSTARIA DEDICARLE TAMBIÉN A MI MADRE ESTE TRABAJO, AUNQUE YA NO ESTE AQUÍ TENGO UN BELLO RECUERDO DE ELLA.**

*Análisis de la radiación  
emitida durante la colisión  
ion-átomo  
en el intervalo de energía  
de 1 MeV- 3 MeV*

## INDICE

<b>CAPÍTULO I</b>	<b>1</b>
<b><i>Teoría de aproximaciones</i></b>	<b>2</b>
<b>1.1) Rayos X</b>	<b>3</b>
<b>1.2) Modelos teóricos</b>	<b>4</b>
<b>1.2.a) PWBA</b>	<b>5</b>
<b>1.2.b) SCA</b>	<b>7</b>
<b>1.2.c) BEA</b>	<b>8</b>
<b>1.2.d) ECPSSR</b>	<b>10</b>
<b><i>I. Efecto de ligadura</i></b>	
<b><i>II. Efecto de polarización</i></b>	
<b><i>III. Efecto de deflexión coulombiana</i></b>	<b>11</b>
<b><i>IV. Efectos electrónicos relativistas</i></b>	
<b><i>V. Efectos por pérdida de energía</i></b>	<b>12</b>
<b>1.3) Análisis comparativo de la BEA-PWBA</b>	<b>13</b>
<b>CAPÍTULO II</b>	<b>16</b>
<b><i>Radiación electromagnética debido a cargas en movimiento</i></b>	<b>17</b>
<b>2.1) Transformaciones de Lorentz aplicadas a potenciales electromagnéticos</b>	<b>18</b>
<b>2.2) Procesos de frenamiento coulombiano</b>	<b>21</b>
<b>2.3) Procesos de radiación por cargas en movimiento acelerado</b>	<b>27</b>
<b>2.4) Energía radiada dependiente de la frecuencia</b>	<b>42</b>
<b>2.5) Procesos de emisión por decaimiento</b>	<b>45</b>

<b>CAPÍTULO III</b>	<b>47</b>
<b><i>Bremsstrahlung del electrón secundario</i></b>	<b>48</b>
<b>3.1) <i>Radiación de fondo</i></b>	<b>49</b>
<b>3.2) <i>Procesos característicos</i></b>	<b>49</b>
<b>3.3) <i>Bremsstrahlung del Electrón Secundario (SEB)</i></b>	<b>50</b>
<b>3.4) <i>Bremsstrahlung del proyectil</i></b>	<b>57</b>
<b>3.5) <i>Distribución angular de SEB</i></b>	<b>58</b>
<b>3.6) <i>Efecto de retardo</i></b>	<b>60</b>
<b>CAPÍTULO IV</b>	<b>62</b>
<b><i>Bremsstrahlung atómico</i></b>	<b>63</b>
<b>4.1) <i>Bremsstrahlung Atómico (AB)</i></b>	<b>63</b>
<b>4.2) <i>Matriz de transición</i></b>	<b>65</b>
<b>4.3) <i>Matriz de transición para un sistema de partículas</i></b>	<b>75</b>
<b>4.4) <i>Sección transversal</i></b>	<b>79</b>
<b>4.5) <i>Sección transversal de AB</i></b>	<b>80</b>
<b>4.6) <i>Consideraciones posteriores</i></b>	<b>85</b>
<b>Conclusiones</b>	<b>86</b>
<b>Apéndice A</b>	<b>87</b>
<b>Apéndice B</b>	<b>88</b>
<b>Apéndice C</b>	<b>90</b>
<b>Apéndice D</b>	<b>91</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>93</b>

## INTRODUCCIÓN

El analizar la materia por medio del bombardeo con partículas no es del todo sencillo, ya que se tienen que tomar en cuenta varios aspectos. La radiación emitida del material al ser bombardeado es característica de éste, es decir, como su huella digital única que puede evidenciar el material a usar. Sin embargo para llevar a cabo este análisis, se tienen que considerar muchas contribuciones no deseadas como la radiación de fondo, el efecto Compton, y otras.

La mayoría de los modelos que describen los procesos de emisión de rayos X por colisión, consideran a los proyectiles como partículas cargadas puntualmente, mientras que a los átomos se les considera con estructura.

Básicamente, cuatro modelos se plantean para el cálculo de secciones transversales de ionización para las capas internas, éstos son: la Aproximación de Onda Plana de Born<sup>[6]</sup>, la Aproximación Semiclásica<sup>[2]</sup>, Aproximación de Encuentro Binario<sup>[1]</sup> y por último la Aproximación ECPSSR<sup>[6]</sup>, ésta toma en cuenta los estados estacionarios perturbados del sistema, la deflexión coulombiana y las correcciones relativistas, de manera que esta última aproximación se considera la más completa.

Para la descripción de algunos procesos llevados a cabo en el rango de energías de 1MeV -3MeV, se presentarán los tratamientos matemáticos para los efectos de pérdida de energía de los electrones<sup>[4]</sup> que al atravesar el blanco con el ion incidente, son importantes. Tomando en cuenta los campos electromagnéticos relativistas, se considerarán los efectos de retardo desde que la radiación se produce hasta que llega al observador (detector) para lo cual se usarán los potenciales de *Liénard-Wiechert*<sup>[5]</sup>, que nos ayudará a deducir la potencia generada por unidad de ángulo sólido cuando se genera un electrón secundario.

Finalmente, todos los aspectos reunidos anteriormente son fundamentales para distinguir los procesos característicos producidos por las colisiones ion-átomo como son el bremsstrahlung de electrón secundario (SEB), el bremsstrahlung atómico (AB) y el bremsstrahlung del electrón casi libre (QFEB). Aunque el último no se considerará en este trabajo ya que se produce para altas energías.

Se ha observado experimentalmente que cuando la energía del proyectil está cerca de 1MeV, el proceso predominante es el AB; en cambio el SEB tiene mayor relevancia sobre los demás procesos cuando la energía se aproxima a los 4MeV y en el caso de que la energía llegue a superar los 10MeV el QFEB predomina<sup>[7]</sup>.

El proceso SEB se refiere a que cuando el proyectil expulsa un electrón del átomo bombardeado y el electrón pasa a través del material, este electrón secundario se dispersa por un campo coulombiano de un núcleo cercano y produce radiación<sup>[3]</sup> (bremsstrahlung). También se considerará la radiación emitida por el proyectil al impactarse con el blanco pero se observa que la contribución de éste al proceso es despreciable con respecto a la radiación emitida por el electrón secundario.

Por último, el proceso AB se refiere a que cuando el proyectil penetra en el blanco y uno de los electrones de la capa interna del átomo se excita a un estado continuo, este vuelve a regresar a su estado inicial emitiendo bremsstrahlung característico de la estructura interna del átomo<sup>[8]</sup>. Para este desarrollo es indispensable un tratamiento cuántico referido a la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo.

Como aplicaciones de este análisis, se tiene el manejo y la eficiencia de los detectores de radiación así como la interpretación de los espectros de radiación como es el caso de PIXE (*Particle Induced X-ray Emission*).

En este trabajo se presentan los aspectos relevantes que involucra la colisión de un proyectil con los átomos de una muestra, de manera que en el Capítulo I se tratan cuatro modelos teóricos, los cuales describen cada uno de forma distinta como puede ocurrir una colisión. Uno de estos modelos considera la partícula como un paquete de ondas planas que incide sobre un átomo mientras que otro supone que la colisión se realiza entre dos cargas puntuales, del mismo modo, mientras que un modelo considera que la partícula se desvía al pasar cerca de un átomo el otro no lo hace. Todos estos aspectos contribuyen para definir el modelo que calcule con mayor aproximación la sección transversal de rayos X.

En el Capítulo II se calcula la radiación producida cuando se decelera una partícula al atravesar una muestra, para esto se consideran algunos conceptos de la teoría electromagnética. Se observa que mientras una partícula permanezca a velocidad constante no emitirá radiación, pero cuando ésta cambie su velocidad se generará una señal electromagnética. Y con la ayuda de la transformada de Fourier se determina la energía radiada por unidad de ángulo sólido por unidad de frecuencia de una partícula que es decelerada.

Al impactarse un proyectil con un átomo del blanco se expulsa un electrón llamado electrón secundario. Este electrón al continuar hacia el interior de la muestra es frenado por los núcleos atómicos produciendo radiación por frenamiento (bremsstrahlung). En el Capítulo III también se considera que la radiación producida al impactarse el proyectil es tres ordenes de magnitud menor que el bremsstrahlung del electrón secundario por lo que la sección transversal de la producción de bremsstrahlung del proyectil se desprecia en comparación con la del electrón secundario.

Por último, en el Capítulo IV se calcula la sección transversal de la producción de bremsstrahlung atómico cuando éste se produce al brincar un electrón a un estado continuo debido al impacto ocasionado por un proyectil. Para calcular la sección se consideró la colisión como un sistema partícula-proyectil cuya ecuación de movimiento se considera por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Esta consideración se realizó apoyándose en el modelo PWBA (Cap. I) que es el que da mejor resultado para este cálculo. También en el Capítulo IV se menciona la existencia de otros procesos que no son tratados en este trabajo pero que son de mucho interés para energías mayores a las mencionadas.

# CAPÍTULO I

## *TEORÍA DE APROXIMACIONES*

Cuando un haz de partículas previamente acelerado, colisiona con los átomos de una muestra, una fracción puede interactuar con los electrones del blanco, generando rayos X característicos de la capa afectada. La probabilidad de que esto ocurra está fuertemente relacionada con la probabilidad de que la interacción tenga lugar. Esta cantidad física tiene que ver con la sección transversal diferencial, y en este capítulo se presentan los tratamientos relativos al problema, para lo cual aquí se mencionan los modelos PWBA (Aproximación de Onda Plana de Born), SCA (Aproximación Semi-clásica), BEA (Aproximación de Encuentro Binario) y ECPSSR (Aproximación de Estados Estacionarios Perturbados con el incremento de amarre atómico, deflexión Coulombiana, C, y correcciones Relativistas, R).

## 1.1) RAYOS X

Los rayos X, que tienen una energía comprendida entre los 0.25-125 keV, se pueden producir por el frenado de partículas cargadas de alta energía o por transiciones electrónicas (cap. II) en las órbitas interiores del átomo<sup>[1]</sup>.

Las líneas espectrales de un elemento se producen cuando, mediante un agente excitador como electrones, protones o fotones, los electrones de las capas interiores de un átomo son expulsados creando una vacancia. Los electrones de los niveles superiores llenan las vacancias en un intervalo de tiempo del orden de  $10^{-9}$  segundos. Las consideraciones cuánticas referentes a la energía de amarre de los electrones al núcleo, implican que la transición electrónica entre los niveles constituye una pérdida de energía que aparece como un fotón de rayos X; es decir, si un electrón de una capa exterior con una energía  $E_i$  ocupa una vacancia en una capa interior con una energía  $E_j$ , se emite un fotón característico de energía  $E_{ij}$  dada por  $E_i - E_j$ .

La emisión de rayos X característicos tienen lugar cuando la energía del agente excitador es mayor o igual a la energía de amarre de los electrones de las capas interiores. Cuando la ionización se lleva a cabo por medio de partículas cargadas, esta condición se cumple cuando  $qV \geq E_i$ , donde  $q$  es la carga de la partícula incidente y  $V$  es su potencial acelerador.

Los electrones expelidos del átomo reciben el nombre de *electrones secundarios*. El espectro característico del proceso de excitación primario va acompañado por un fondo continuo debido a la radiación de las partículas incidentes y los electrones secundarios.

La sección transversal de la producción de rayos X en la capa K se refiere a la contribución que aportan las transiciones en esta capa, dada por<sup>[1, 2]</sup>:

$$\sigma_X(E) = \sigma(E)\omega_K,$$

donde  $\omega_K$  se considera la probabilidad de emisión de la capa K; de la misma forma, se puede hablar de la capa L, pero se tiene que tomar en cuenta el promedio de las contribuciones existentes de las subcapas de la capa L como

$$\sigma_X(E) = \sigma(E)\omega_L,$$

donde  $\omega_L$  o  $\omega_K$  se considera la probabilidad de emisión promedio correspondiente a la capa L o K y se llama fluorescencia<sup>o</sup>.

<sup>o</sup> en la excitación secundaria o fluorescencia la energía del fotón debe cumplir que  $\hbar\omega \geq E_i$

## 1.2) MODELOS TEÓRICOS

La mayoría de los modelos que describen los procesos de emisión de rayos X por colisión consideran a los proyectiles como partículas puntuales cargadas, mientras que a los átomos blanco se les considera una estructura. Respecto de la velocidad, las colisiones son lentas o rápidas de forma relativa al tiempo de respuesta de los electrones que son excitados.

Las suposiciones anteriores se aplican a los fenómenos de excitación, principalmente de los electrones de la capa K del blanco, los cuales pueden excitarse con los proyectiles debido a la interacción coulombiana, la cual es dominante cuando las velocidades de los proyectiles se consideran altas, ya que éstos se mueven a través del blanco como núcleos aislados (sin estructura electrónica)<sup>[8]</sup>. A bajas velocidades se debe considerar la estructura del proyectil ya que los procesos de excitación tienen lugar si el radio de la capa K del proyectil,  $r_{p_k}$ , es mayor que el radio de la capa K del blanco,  $r_{i_k}$ . Esto se debe a que a bajas velocidades, la excitación y la ionización tiene lugar sólo a distancias internucleares mucho menores que  $r_{i_k}$ . De esta forma, el núcleo del proyectil excitará o ionizará la capa K del blanco, como una partícula cargada.

Por otra parte, cuando se impactan proyectiles pesados a bajas velocidades, pero de número atómico  $Z_p$  pequeño comparado con el del blanco  $Z_i$ , la ionización de la capa K del blanco se debe a la interacción coulombiana<sup>[8]</sup>. Por el contrario, si  $Z_p \geq Z_i$  los proyectiles ya no se considerarán como partículas puntuales cargadas, sino como iones o átomos con estructura. Esta vez, ellos excitarán a la capa K del blanco por fuerzas de intercambio debido al *principio de exclusión de Pauli* de la nube electrónica, que también es excitación coulombiana. Sin embargo, cuando  $Z_p \ll Z_i$  entonces el radio promedio del proyectil de la capa K será mucho mayor que el radio promedio del blanco de la capa K ( $r_{p_k} \gg r_{i_k}$ ), de manera que todos los proyectiles se comportan como cargas puntuales aisladas.

De manera que se puede decir que:

- ♣ a baja velocidad del proyectil ( $v_p \ll v_{i_k}$ ) la excitación de Pauli<sup>[8]</sup> disminuye la excitación coulombiana propiamente dicha,
- ♣ a altas velocidades, cuando la velocidad del proyectil es mayor o próxima a la velocidad promedio de su electrón de la capa K o del electrón de la misma capa del blanco ( $v_p > v_{p_k}$  ó  $v_p > v_{i_k}$ ), el tiempo

de interacción es grande comparado con el tiempo permitido por el principio de exclusión y permite influenciar el proceso de ionización y de esta forma la excitación coulombiana domina nuevamente.

Básicamente cuatro modelos teóricos se han planteado en el cálculo de secciones transversales de ionización para las capas internas<sup>[1, 21]</sup>, las cuales se exponen brevemente a continuación.

### 1.2.a) PWBA (Plane Wave Born Approximation)

Esta descripción, fundamentalmente consiste en la aplicación de la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo a la transición de un estado inicial a un estado final, en la cual el electrón es expulsado al continuo mediante una interacción coulombiana. Este modelo concuerda con los resultados experimentales para proyectiles con cargas pequeñas y energías mucho mayores que la energía de amarre del electrón.

La interacción entre una partícula cargada y un átomo para un proceso de ionización se representa en forma no relativista por el hamiltoniano del sistema<sup>[21]</sup>:

$$H = H_0 + gU_0 + hV_0, \quad (1.1)$$

donde  $H_0$ , se considera el sistema partícula-átomo no perturbado;

$gU_0$ , la interacción coulombiana de intensidad  $g$  entre la partícula y el núcleo atómico y

$hV_0$ , la interacción coulombiana de ionización de intensidad  $h$  entre la partícula y los electrones del átomo.

En este proceso la sección transversal de ionización  $\sigma$ , puede ser desarrollada en serie de Born en potencias  $h$  como<sup>[8]</sup>:

$$\sigma = \sum_{\nu=2}^{\infty} h^{\nu} G_{\nu}(g). \quad (1.2)$$

De la misma manera, al desarrollar nuevamente los coeficientes  $G_{\nu}$  en potencias de  $g$  y con coeficientes  $J_{\mu\nu}$ , la relación anterior describe la contribución de una onda plana en series de Born en potencias de las intensidades de la interacción total ( $gU_0 + hV_0$ ) entre partícula-átomo y la cual es<sup>[8]</sup>:

$$\sigma = \sum_{\nu=2}^{\infty} \sum_{\mu=0}^{\infty} g^{\mu} h^{\nu} J_{\mu\nu}. \quad (1.3)$$

Con lo que PWBA, está dada por el primer término de esta serie para la  $\sigma$ , ya que  $J_{02}$  sólo depende de los eigenestados de  $H_0$  el cual describe la partícula penetrando como una onda plana. Por lo tanto, la sección transversal de la interacción partícula-átomo se considera como:

$$\sigma^{PWBA} \cong h^2 J_{02}, \quad (1.4)$$

notesé que el índice  $\nu$  inicia en 2, ya que descansa en la suposición de que el término de segundo orden domina sobre los otros de la serie de potencias, la aplicación de esta aproximación es válida si:

- ◆ el proyectil se comporta como carga puntual,
- ◆ las ondas inicial y final de la partícula se representan por ondas planas en todo el espacio y
- ◆ los estados de los electrones del átomo bombardeado son los del blanco no perturbado.

Entre los criterios para la viabilidad de PWBA, se encuentran las consideraciones sobre la velocidad de la partícula, la masa de la partícula y el número atómico del blanco, pero el comúnmente usado toma en cuenta que  $Z_p \ll Z_t$ , y que la velocidad del proyectil está relacionada con la velocidad de los electrones en la órbita de la capa K del blanco por  $v_p \gg \left(\frac{Z_p}{Z_t}\right)v_{t_K}$ . Esto condiciona a que la amplitud de la onda dispersada por el electrón del blanco sea despreciable en comparación a la de la onda incidente, siempre y cuando la interacción coulombiana entre las cargas puntuales se lleve a cabo de tal manera que la partícula pase cerca de las órbitas de la capa K del blanco, ya que estas no se distorsionarán, si el tiempo de respuesta del electrón del blanco,  $T_{t_K} = \frac{1}{\omega_{t_K}}$  ( $\omega_{t_K}$  es la frecuencia del electrón del blanco en la capa K), es grande comparado con el tiempo de colisión partícula-electrón<sup>[8]</sup>.

Debido a lo anterior, la función de estado de la partícula incidente antes del impacto se considera como una onda plana y después de la colisión la función de estado del proyectil es una onda esférica saliente, ya que durante el impacto esta sufre el efecto del campo de la partícula blanco que se considera central<sup>[21]</sup>.

De todo esto, se puede ver que PWBA se utiliza para calcular las secciones transversales para la ionización de la capa K de átomos por partículas cargadas pesadas, siendo una aproximación cuya validez mejora para partícula-proyectil de carga pequeña y altas velocidades, y que por las anteriores limitaciones no se puede aplicar en casos de proyectiles de bajas velocidades.

En general PWBA es una muy buena aproximación para describir la ionización a grandes energías, y para menos de 1.3 MeV sus predicciones fallan. Una de las causas de este desacuerdo con las predicciones teóricas, se debe a que este modelo no toma en cuenta la deflexión del proyectil debido a la interacción con el núcleo del átomo, ya que a grandes velocidades del ion, su trayectoria, al chocar con un átomo, es prácticamente en línea recta y de esta forma la PWBA describe en forma adecuada el proceso. No así a bajas velocidades pues hay deflexión coulombiana en la trayectoria del proyectil, que a su vez produce una disminución en su velocidad al pasar cerca del núcleo. Otra causa del desacuerdo es el hecho de que el ion se considera como una partícula puntual, lo cual no se cumple, especialmente a bajas energías. Por lo tanto, como se dijo anteriormente, la aproximación PWBA es válida a altas energías o se puede ver cuando se cumplen las condiciones<sup>[21]</sup>:

$$v_p \gg v_{te} \text{ y } Z_p \ll Z_t . \quad (1.5)$$

### 1.2.b) SCA (Semiclassical Approximation)

La aproximación semiclásica describe a la partícula incidente como un pequeño paquete de ondas comparado con la máxima distancia de acercamiento al núcleo blanco. Esta hipótesis está asociada a que la radiación de la dispersión del paquete de ondas es despreciable durante la colisión<sup>[1,2]</sup>. Para el cálculo de la sección de ionización se considera el parámetro de impacto y se toma en cuenta la deflexión que sufre la trayectoria de la partícula incidente debido a los núcleos del blanco<sup>[1]</sup>. En este modelo se pretende explicar la ionización de las capas internas tomando en cuenta la deflexión coulombiana del proyectil por el núcleo. La solución del problema se lleva a cabo por una parte, considerando a la colisión entre el ion y el núcleo en términos del parámetro de impacto  $b$  y por la otra, al considerar interacción del proyectil con los electrones por medio de teoría de perturbaciones<sup>[7]</sup>.

Haciendo un análisis cuántico, y con la teoría de perturbaciones, existe la probabilidad  $P$  de que un ion se mueve en una trayectoria  $R(t)$  e interaccione con un electrón en la capa  $\mathfrak{R}$  ( $\mathfrak{R}=\text{K, L, ...}$ )<sup>9</sup> y lo expulse. Clásicamente, la sección transversal diferencial de la dispersión dada por un potencial central depende del parámetro de impacto y se expresa como<sup>[21]</sup>:

$$d\sigma_d = \pi b db. \quad (1.6)$$

Utilizando la parte clásica y cuántica se puede determinar la probabilidad de expulsar un electrón de la capa  $\mathfrak{R}$  de un átomo con una energía  $E_f$ , como<sup>[21]</sup>  $\frac{d\sigma_{\mathfrak{R}}}{dE_f}$  donde se considera la sección transversal total con respecto a todas las energías de transferencia en la ionización de la capa  $\mathfrak{R}$ , dada por  $\sigma_{\mathfrak{R}}$ . Cuando la energía del proyectil es grande, la sección de ionización total calculada con SCA, suponiendo trayectoria recta del proyectil, coincide con la PWBA, y el mejor acuerdo experimental se encuentra en la evaluación de la sección para la ionización de la capa K cuando se consideran trayectorias hiperbólicas para bajas energías de incidencia de los iones; en cambio, para las secciones de ionización de la capa L, la aproximación SCA presenta grandes discrepancias con los datos experimentales a bajas energías.

### 1.2.c) BEA (Binary Encounter Approximation)

La aproximación de encuentro binario contempla al proceso de ionización debido a una colisión como una interacción entre dos tipos de partículas cargadas, obteniendo la sección transversal como la suma de todas las contribuciones sobre todos los intercambios de momento; el único papel jugado por los núcleos de los átomos del blanco es el de establecer una distribución inicial de momentos de los electrones ligados.

<sup>9</sup> Nótese que la capa L considera 3 subcapas

Este modelo se propuso para explicar la ionización de las capas atómicas internas, a partir de los conceptos clásicos de la teoría de colisiones. La aplicación de estos conceptos se efectúa suponiendo que la interacción es sólo entre el ion y el electrón. Por lo cual, la ionización se explica como una colisión clásica entre una partícula incidente contra un electrón libre con momento  $p_2$ . Debido a que el electrón se encuentra ligado al núcleo, en este modelo, el papel del núcleo blanco consiste en establecer la distribución de momentos  $p_2$  del electrón antes de la colisión. Este modelo concentra sus resultados en una ley de escalamiento, la cual establece que el producto del cuadrado de la energía de amarre por la sección transversal es una función universal de la energía incidente<sup>[1, 2]</sup> para todas las interacciones:

$$u_i^2 \sigma = z_i^2 f\left(\frac{E}{\lambda u_i}, \lambda\right), \quad (1.7)$$

siendo

$\sigma$ , la sección de ionización

$u_i$ , la energía de ionización de la capa  $i$

$E$ , la energía de incidencia del ion

$z_i$ , el número atómico del ion

$\lambda$ , la razón entre las masas del electrón y protón ( $m_p / m_e$ )

$f$ , una función de escalamiento.

La idea general de la aproximación de encuentro binario la propuso inicialmente Gryzinski<sup>[13]</sup> y más tarde fue aplicada para describir la ionización por impacto de protones por García<sup>[14]</sup>. A altas velocidades de incidencia del proyectil la aproximación BEA se vuelve confiable y coincide con la PWBA siendo que para bajas velocidades sus predicciones difieren de los datos experimentales. Esto se debe que para bajas velocidades los efectos cuánticos comienzan a ser importantes y que en la BEA no son tomados en cuenta. Un inconveniente de la aproximación BEA es que sólo se puede aplicar para las capas atómicas internas no así para las subcapas<sup>[21]</sup>.

### 1.2.d) ECPSSR (Effect Perturbed Stationary States with increase atomic binding, Coulomb deflection, C, and Relativistic corrections, R)

Este modelo ha sido el que mejores resultados ha dado en la predicción de las secciones transversales de ionización de las capas internas<sup>[21]</sup>. Esencialmente, consiste en la incorporación de correcciones de la PWBA, de los efectos de ligadura, de polarización y de la deflexión coulombiana de los electrones en el átomo por la presencia del proyectil; también se incluye la pérdida de energía del proyectil durante la colisión debido a la interacción con el núcleo atómico y efectos relativistas de los electrones<sup>[9, 20]</sup> como se explica a continuación.

#### ◆ I. Efecto de ligadura

Cuando la velocidad del ion incidente es baja en la colisión ion-átomo, los efectos de su presencia son más notorios en los electrones del átomo blanco, ya que el tiempo de interacción es mayor y se modifican sus estados iniciales. En este caso, para expulsar un electrón de alguna capa interna del átomo blanco se requiere una gran penetración en las capas atómicas. De esta forma, al encontrarse el ion incidente cerca del núcleo, aumenta la energía de ligadura de los electrones y en consecuencia hay una disminución en la sección de ionización. En este efecto la evaluación de la sección utiliza la aproximación de estados estacionarios<sup>[10, 20]</sup> (PSS) para las capas K y L.

#### ◆ II. Efecto de polarización

Otro efecto que incorpora la aproximación ECPSSR es el que ocurre en los estados iniciales de un átomo durante la colisión con un ion, y es debido a la atracción de la nube electrónica del blanco hacia el ion cuando éste pasa por fuera de las capas internas. Entonces, el proyectil produce una polarización en los estados de los electrones del átomo blanco, lo cual hace que aumente la sección transversal de ionización. Este efecto es dominante a velocidades medias del proyectil, y claramente la expulsión de electrones de las capas internas tiene lugar sin que el ion incidente penetre en las capas del átomo<sup>[9]</sup>, y que las fuerzas de polarización puedan superar la energía de amarre de dichos electrones.

### ◆ III. Efecto de deflexión coulombiana

Cuando un haz de iones incide a altas velocidades sobre un átomo, la interacción con el núcleo blanco no altera sensiblemente su trayectoria, pero cuando la velocidad del ion es pequeña, esta interacción comienza a ser más notoria, produciendo una deflexión en la trayectoria del haz de iones. Además, esta interacción del ion con el núcleo durante la colisión provoca un frenamiento en la velocidad del proyectil cuando éste se aproxima al núcleo. La PWBA y la SCA cuando consideran una trayectoria rectilínea del proyectil, no están tomando en cuenta la interacción con el núcleo atómico, lo cual causa que a velocidades bajas del ion, las aproximaciones anteriores den como resultado una sobreestimación del valor de las secciones de ionización, pues estos efectos reducen la penetración del ion en las capas internas del átomo. La aproximación ECPSSR toma en cuenta estos efectos a bajas energías en el aspecto cuántico, suponiendo que el proyectil no debe de considerarse como una onda plana, sino por medio de una función de onda coulombiana y en el aspecto clásico es conveniente considerar una trayectoria tipo canónica como hiperbólica o parabólica en lugar de una trayectoria recta<sup>[8, 20]</sup>.

### ◆ IV. Efectos electrónicos relativistas

Estos efectos incluidos en la aproximación ECPSSR comienzan a ser importantes cuando se tienen elementos pesados en el blanco y la velocidad del proyectil es lenta, de tal forma que, cuando  $Z_1 > 50$ , es necesario utilizar funciones de onda relativistas para determinar la densidad de electrones del átomo blanco. El cálculo de la densidad de electrones utilizando funciones de onda relativistas resulta ser mayor cerca del núcleo en comparación a los cálculos de la densidad con funciones no relativistas, dando como consecuencia que las velocidades de los electrones en las capas internas sean mayores. Así, cuando la energía del proyectil es baja, la colisión deberá tener lugar cerca del núcleo para poder expulsar algún electrón y como estos tienen velocidades mayores a las estimadas, tendremos que el mínimo momento transferido posible será mayor. El resultado de estos efectos electrónicos relativistas será un aumento en las secciones de ionización de capas internas<sup>[20, 21]</sup>.

#### ◆ V. Efecto por pérdida de energía

Por último, la aproximación ECPSSR toma en cuenta que al impactarse un proyectil sobre un átomo del blanco bombardeado este pierde energía  $E_i - E_f$  en una colisión inelástica<sup>[10]</sup> donde  $E_i$  y  $E_f$  se consideran la energía cinética inicial y final del proyectil en el centro de masa del sistema, esto afecta el cálculo de las secciones transversales de ionización en la aproximación PWBA, ya que se requiere integrar sobre la transferencia de momento  $q$  desde un mínimo valor, al máximo. Por lo cual, en las colisiones lentas, donde no se desprecia la pérdida de energía relativa del proyectil, las secciones transversales inelásticas se comportan en forma inversamente proporcional a altas potencias del cambio de momento  $q$ <sup>[21]</sup>. Cuando el efecto por pérdida de energía se incluye para determinar la sección transversal de ionización de la capa  $\mathfrak{R}$  del blanco entonces las integraciones se realizan sobre todos los estados finales del sistema  $\mathcal{E}_f$  con lo cual los límites inferior y superior del momento final quedan incluidos y el resultado en forma aproximada es<sup>[10]</sup>:

$$\sigma_{\mathfrak{R}}^{EPWBA} = f_{\mathfrak{R}}(z) \sigma_{\mathfrak{R}}^{PWBA}, \quad (1.8)$$

donde las secciones transversales se calculan con funciones de onda hidrogenoides para las capas interiores y el efecto de la pérdida de energía se representa en el argumento de la función  $f_{\mathfrak{R}}(z)$ , lo cual se encuentra tabulado en la ref. 10 para protones como proyectiles sobre átomos blanco que se hallan entre el neón y el uranio ( $10 \leq Z_t \leq 92$ ).

Combinando los cuatro primeros efectos se tiene la aproximación CPSSR y la expresión para la sección transversal de ionización directa para alguna capa  $\mathfrak{R}$  está dada como<sup>[21]</sup>:

$$\sigma_{\mathfrak{R}}^{CPSSR} = C_{\mathfrak{R}}(dq_{o\mathfrak{R}} \zeta_{\mathfrak{R}}) \sigma_{\mathfrak{R}}^{PWBA} \left( \frac{E_{\mathfrak{R}}^R}{\zeta_{\mathfrak{R}}}, \zeta_{\mathfrak{R}} \theta_{\mathfrak{R}} \right), \quad (1.9)$$

donde  $C_{\mathfrak{R}}$  representa el efecto de la deflexión coulombiana, mientras que  $\zeta_{\mathfrak{R}}$  responde por el efecto del estado estacionario perturbado.  $\frac{E_{\mathfrak{R}}^R}{\zeta_{\mathfrak{R}}}$  se considera la velocidad reducida del proyectil<sup>[10]</sup>, tomando en cuenta efectos relativistas y por último  $q_0$  se considera la mínima transferencia de momento. Tomando en cuenta además efecto por pérdida de energía, se tiene la llamada aproximación ECPSSR.

### 1.3) ANÁLISIS COMPARATIVO DE LA BEA - PWBA

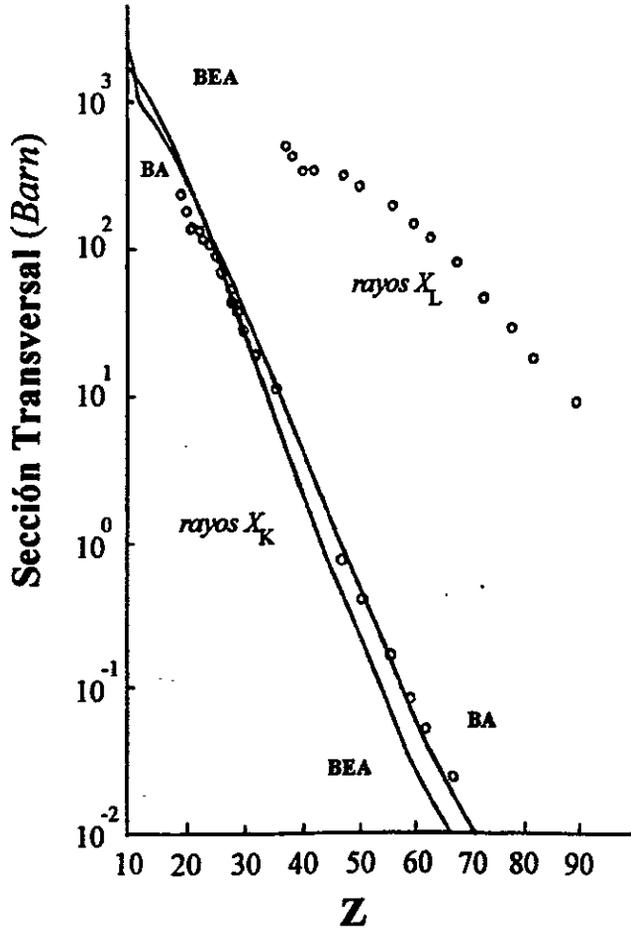
El modelo BEA se aproxima mejor a las medidas experimentales cuando  $Z$  tiene valores bajos, mientras que para valores de  $Z$  altos la aproximación de Born (BA) se acerca mejor al resultado experimental, particularmente si se toma en cuenta a la corrección del término relativista<sup>[4]</sup>, de manera que se pueden emplear cualquiera de los dos modelos para el estudio del comportamiento de las secciones transversales de rayos X

La sección transversal de emisión de rayos X se incrementa con la energía del proyectil. Para energías más altas, las secciones transversales decrecen lentamente. Si se toma como parámetro la sección transversal del protón y se generaliza para otros proyectiles tendremos que<sup>[3]</sup>:

$$\sigma_{Z_1 A_1}^{vac}(E_1) = Z_1^2 \sigma_{prot}^{vac} \left( \frac{E_1}{A_1} \right), \quad (1.11)$$

donde la sección transversal de un proyectil de  $A_1$  nucleones, carga  $Z_1$  y energía  $E_1$ , se considera como el producto de la sección transversal del protón por el cuadrado de la carga del proyectil. Para  $Z_1$  altos, las partículas no se pueden tratar como cargas puntuales, ya que manifiestan un cambio en las energías de los rayos X y en la producción de fluorescencia.

En las figuras 1.1 y 1.2, se observan los resultados teóricos para la emisión de rayos X de la capa K con las aproximaciones de Born y de Encuentro Binario; éstas se comparan con los resultados experimentales de las secciones transversales para los rayos  $X_K$  y  $X_L$  (puntos vacíos). Para blancos de  $Z$  altos se observa que la aproximación PWBA concuerda mejor con los resultados experimentales para calcular la sección transversal proveniente de la capa K mientras que la aproximación BEA es mejor para blancos de  $Z$  bajos, cuando éstos se bombardean con protones.



*Fig. 1.1. Sección transversal para un blanco  $Z$  bombardeado con protones de 2 MeV  
(dada por Folkmann en 1974), ref. 3.*

• 1 barn =  $10^{-28}$  m<sup>2</sup>

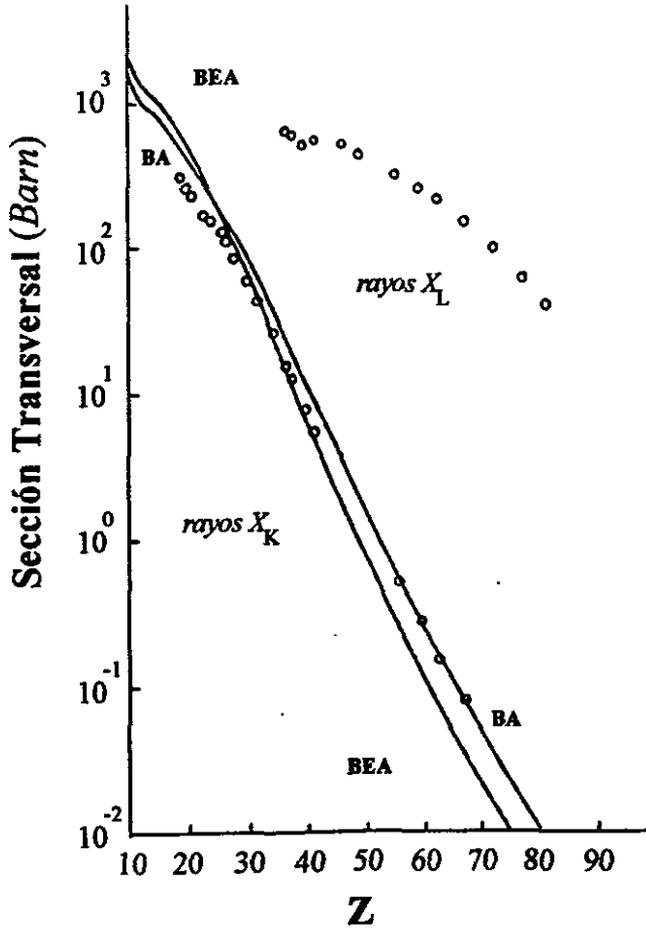


Fig. 1.2. Sección transversal para un blanco  $Z$  bombardeado con protones de 3 MeV  
(dada por Folkmann en 1974), ref. 3.

# CAPÍTULO

## II

## *RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA DEBIDO A CARGAS EN MOVIMIENTO*

En este capítulo, se discute la teoría de radiación de una carga puntual acelerada y se presenta la aplicación, al caso de los iones que pierden velocidad o se deflectan al pasar frente a los núcleos emitiendo radiación. Situación semejante se presenta con los electrones que se aceleran al extraerlos de su órbita y puestos en el medio material perdiendo velocidad o cambiando la dirección de la trayectoria. Dicho efecto se toma en cuenta en el poder de frenamiento de los materiales y su relación con la radiación emitida. Así como el anterior este capítulo es un apoyo para el capítulo III.

## 2.1) TRANSFORMACIONES DE LORENTZ APLICADAS A POTENCIALES ELECTROMAGNÉTICOS

Dada una carga  $q$  que se mueve respecto a un sistema de referencia  $K$  a una velocidad  $\vec{u}$  y si sobre la carga se coloca un sistema  $K'$  (ver fig. 2.1), los potenciales escalar,  $\vec{A}$  y vectorial,  $\phi$ , para un punto P visto desde  $K$  en términos de los potenciales  $\vec{A}'$  y  $\phi'$  observados en  $K'$  por<sup>[16]</sup>:

$$\begin{aligned} A_x &= \gamma(A'_x + u\phi'), & A_y &= A'_y, \\ \phi &= \gamma\left(\phi' + \frac{uA'_x}{c^2}\right), & A_z &= A'_z, \end{aligned} \quad (2.1)$$

debido a que en  $K'$ ,  $\vec{A}' = 0$  y  $\phi' = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r'}$ , las ecs. (2.1) quedan

$$\begin{aligned} \phi &= \gamma\phi' \\ &= \gamma \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r'} \\ &= \gamma \frac{q}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2}}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

y utilizando las soluciones de las ecuaciones de Maxwell

$$\begin{aligned} \vec{E} &= -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t}, \\ \vec{B} &= \vec{\nabla} \times \vec{A}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

entonces los campos eléctricos y magnéticos en el sistema  $K$  son:

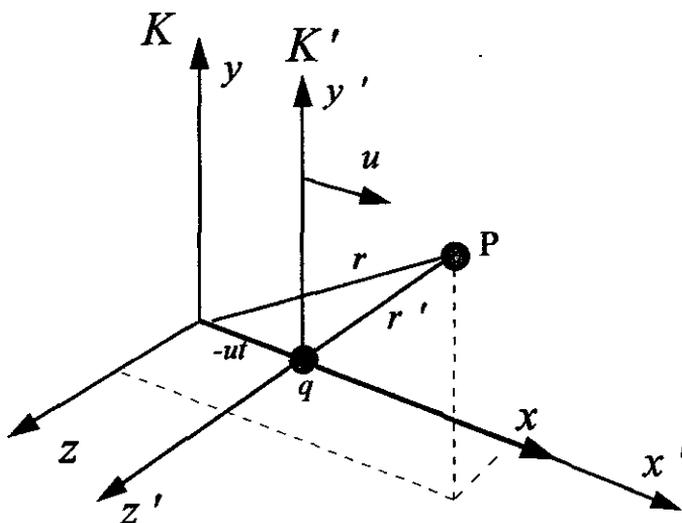
$$E_x = \gamma \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{(x-ut)}{[\gamma^2(x-ut)^2 + y^2 + z^2]^{3/2}}, \quad (2.4a)$$

$$E_y = \gamma \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{y}{[\gamma^2(x-ut)^2 + y^2 + z^2]^{3/2}}, \quad (2.4b)$$

$$E_z = \gamma \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{z}{[\gamma^2(x-ut)^2 + y^2 + z^2]^{3/2}}, \quad (2.4c)$$

y siguiendo el procedimiento anterior el campo magnético se expresa<sup>[16]</sup>:

$$\vec{B} = \vec{u} \times \vec{E}, \quad (2.5)$$



**Fig.2.1.** Una partícula de carga  $q$  se mueve en un sistema de referencia  $K$  a velocidad  $u$  mientras que la misma partícula en el sistema  $K'$  permanece en reposo.

utilizando la transformación de un sistema  $K$  a un sistema  $K'$  del campo tensorial electromagnético  $f_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu}$ , donde  $A_\alpha = \left( \vec{A}, \frac{i}{c}\phi \right)$ , mediante la Transformación de Lorentz (TL) se obtiene:

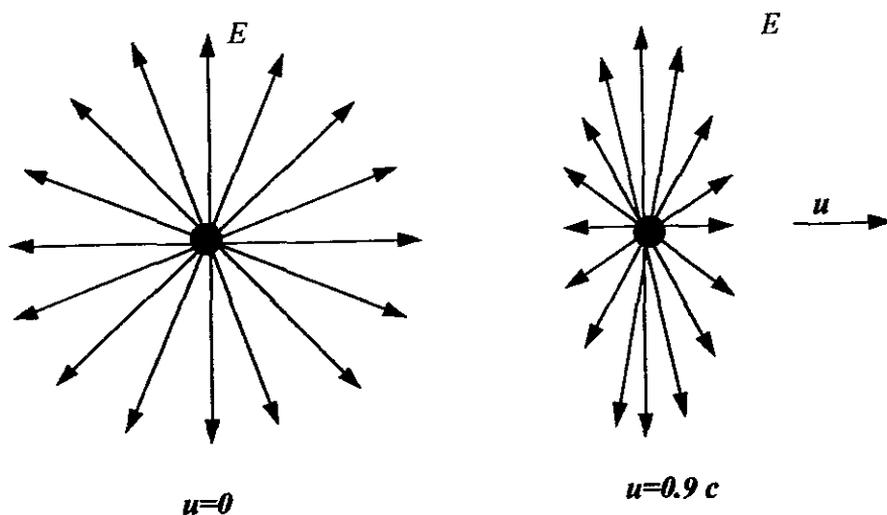
$$\begin{aligned} E'_x &= E_x & B'_x &= B_x, \\ E'_y &= \gamma(E_y - uB_z) & B'_y &= \gamma\left(B_y + \frac{uE_z}{c^2}\right), \\ E'_z &= \gamma(E_z + uB_y) & B'_z &= \gamma\left(B_z - \frac{uE_y}{c^2}\right), \end{aligned} \quad (2.6)$$

estas ecuaciones nos dicen cómo cambian los campos electromagnéticos desde el sistema de referencia  $K$  al  $K'$  (viceversa), es decir, de un sistema que se encuentra en movimiento con velocidad  $u$  a uno que no lo está. También se nota que tiene una gran similitud con las TL y de esto se puede considerar que el campo eléctrico o magnético cuya componente esté en la misma dirección que el movimiento de los sistemas de referencia  $K$  y  $K'$  se considera como paralelo ( $E_x = E'_x, B_x = B'_x$ ) mientras que para las componentes perpendiculares sucede algo semejante. De esta manera, se pueden expresar las ecuaciones de transformación de los campos en forma vectorial como<sup>[16]</sup>:

$$\begin{aligned} E'_x &= E_x & B'_x &= B_x, \\ E'_y &= \gamma(\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B})_y & B'_y &= \gamma\left(\vec{B} - \frac{\vec{u} \times \vec{E}}{c^2}\right)_y, \\ E'_z &= \gamma(\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B})_z & B'_z &= \gamma\left(\vec{B} - \frac{\vec{u} \times \vec{E}}{c^2}\right)_z. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Todo lo anterior es relevante debido a que conforme una partícula se mueva más cerca que la velocidad de la luz, las componentes de campo eléctrico que se encuentren en la misma dirección que su movimiento, se irán haciendo menos intensas, lo que no sucede cuando la

partícula se encuentra en reposo, como en la fig.2.2. Aquí se observa que cuando  $u=0$  el campo eléctrico que rodea la partícula es isotrópico mientras que para  $u=0.9c$ , éste tiene una dirección preferencial.



*Fig. 2.2. Patrones de campo eléctrico de una partícula cuando la velocidad es nula y cuando esta es constante próxima a la velocidad de la luz,  $c$ .*

## 2.2) PROCESOS DE FRENAMIENTO COULOMBIANO

Cuando una partícula se mueve velozmente con carga  $Ze$  y masa  $M$ , y colisiona con un electrón sujeto a un átomo, el electrón del átomo se le puede tratar inicialmente como libre y en reposo si la velocidad del proyectil es mayor comparada con la velocidad del electrón en su órbita. Debido a que la transferencia de momento  $\Delta p$  es demasiado pequeña, la partícula incidente no sufre deflexión considerable de su trayectoria y el cambio de momento  $\Delta p$  se debe solo al campo eléctrico transversal  $E_x$  de la partícula observado en el sistema de referencia del laboratorio, sean los sistemas  $K$  (laboratorio) y  $K'$  (montado en la partícula).

Consideresé la fig. 2.3 en la cual, la carga que esta en reposo respecto a el sistema de referencia  $K'$ ; ambas se estan moviendo a una velocidad  $u$  respecto del punto P que se encuentra fijo en el sistema  $K$ , de manera que, en  $q$  no se generará ningún campo magnético ( $B'_x = B'_y = B'_z = 0$ ), es decir  $\vec{A}' = 0$ , pero si existirán campos eléctricos debido a que su potencial escalar en el punto P se considera

$$\phi' = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r'}, \quad (2.8)$$

y utilizando de manera similar la ec. (2.3) pero ahora para hallar las componentes de los campos eléctricos en el sistema  $K'$  se tiene que

$$E'_x = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{x'}{(x'^2 + y'^2 + z'^2)^{3/2}}, \quad (2.9a)$$

$$E'_y = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{y'}{(x'^2 + y'^2 + z'^2)^{3/2}}, \quad (2.9b)$$

$$E'_z = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{z'}{(x'^2 + y'^2 + z'^2)^{3/2}}, \quad (2.9c)$$

como la partícula se mueve en un sistema inercial en el cual  $z' = 0$ ,  $y' = b$  y  $x' = -ut'$  entonces

$$E'_x = -\frac{qu}{4\pi\epsilon_0} \frac{t'}{(u^2 t'^2 + b^2)^{3/2}}, \quad (2.10a)$$

$$E'_y = \frac{qb}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{(u^2 t'^2 + b^2)^{3/2}}, \quad (2.10b)$$

$$E'_z = 0, \quad (2.10c)$$

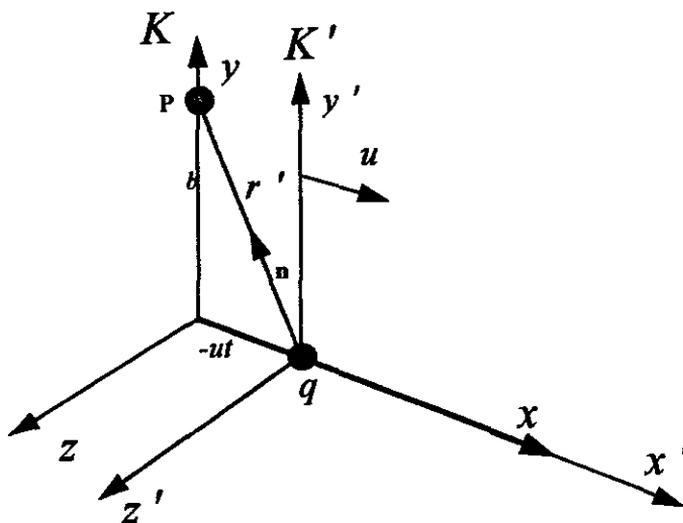
con la ayuda de las TL considerando que  $x = 0$ , debido a la consideración del punto P en la fig. 2.3 y de la relación inversa de las ec. (2.6), los campos electromagnéticos desde el sistema de referencia  $K$  se expresan<sup>[6]</sup>

$$E_x = E'_x = -\frac{\gamma q}{4\pi\epsilon_0} \frac{ut}{\left[(\gamma ut)^2 + b^2\right]^{3/2}}, \quad (2.11a)$$

$$E_y = \gamma E'_y = \frac{\gamma q}{4\pi\epsilon_0} \frac{b}{\left[(\gamma ut)^2 + b^2\right]^{3/2}}, \quad (2.11b)$$

$$B_z = \gamma \frac{\beta^2}{u} E'_y = \frac{\beta^2}{u} E_y, \quad (2.12)$$

mientras que las otras componentes son cero.



*Fig. 2.3. El punto de observación P se aleja de la carga q cuando el sistema de referencia K' se coloca sobre la partícula, de manera que en q no se genera campo magnético pero si campo eléctrico.*

De esta manera, ahora se puede calcular la transferencia del momento de una partícula que colisiona con un electrón de carga  $-e$  y masa  $m \ll M$  colocado en el punto P desde el sistema de referencia  $K$ . Entonces la transferencia del momento en la dirección transversal tomando en cuenta las consideraciones anteriores

$$\Delta p = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{F} dt, \quad (2.13)$$

entonces

$$\Delta p = \int_{-\infty}^{\infty} eE_y(t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{\gamma qb}{(b^2 + \gamma^2 u^2 t^2)^{3/2}} dt, \quad (2.14)$$

haciendo el cambio de variable  $x = \gamma ut/b$  se tiene

$$\Delta p = \frac{eq}{4\pi\epsilon_0 u b} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(1+x^2)}, \quad (2.15)$$

y nuevamente otro cambio de variable  $x = \tan\theta$ , la expresión anterior queda<sup>(11)</sup>:

$$\Delta p = \frac{eq}{4\pi\epsilon_0 u b} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{\sec^2\theta}{(1+\tan^2\theta)^{3/2}} d\theta = \frac{eq}{2\pi\epsilon_0 u b}, \quad (2.16)$$

de esta forma, para hallar la transferencia de energía que la partícula le cede al electrón, tomando en cuenta que  $q = ze$ , es

$$\Delta E(b) = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{z^2 e^4}{8m\pi^2 \epsilon_0^2 u^2} \left( \frac{1}{b^2} \right) \quad (2.17)$$

como se observa, la transferencia de energía no depende de la masa del proyectil, pero sí de su velocidad y carga. Esta expresión tiene una dificultad al evaluar  $b$  para distancias muy pequeñas, ( $b \rightarrow 0$ ), por lo cual se considera el parámetro de impacto mínimo<sup>(6,11)</sup>

$b_{min} = ze^2 / \gamma m v^2$  y de la misma forma se tiene el inconveniente cuando  $b$  es muy grande ( $b \rightarrow \infty$ ), ya que para cierta distancia la influencia coulombiana será despreciable para el electrón y como consecuencia se encontrara libre. Si el tiempo de colisión es corto comparado con el período orbital del movimiento del electrón, la colisión se puede suponer como repentina y el electrón de átomo puede ser tratado como libre. Pero si el tiempo de colisión es muy grande comparado con el período orbital, el electrón dará muchas vueltas mientras la partícula pasa lentamente y será influenciada adiabáticamente por los campos, sin ninguna transferencia neta de energía. Si la frecuencia característica del movimiento electrónico es  $\omega$ , entonces el tiempo para el cual el parámetro de impacto es el máximo, es aproximadamente el inverso de  $\omega$ . De esta manera, como el intervalo de tiempo para el cual los campos afectan todavía la partícula es aproximadamente  $\Delta t \cong \frac{b}{\gamma u}$ , entonces el

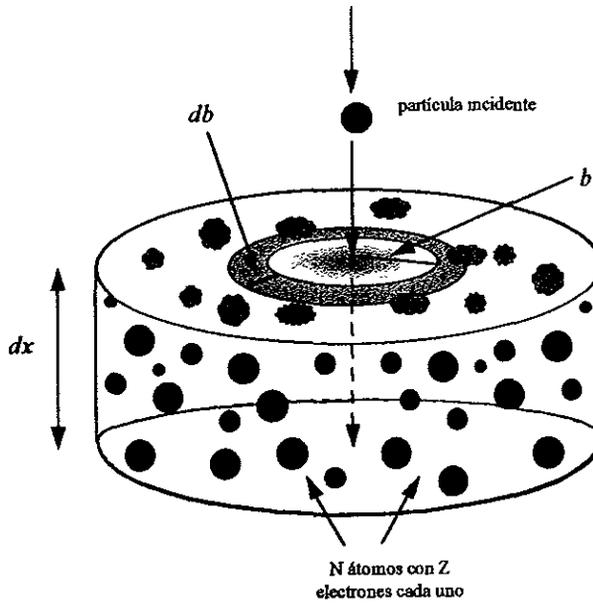
parámetro de impacto máximo<sup>[6,11]</sup>  $b_{max} = \gamma u / \omega$  será la distancia umbral para la cual todavía se considera la influencia de la partícula sobre el electrón. De esto, se puede decir que para parámetros de impacto fuera de este intervalo  $b_{min} < b < b_{max}$  la transferencia de energía será considerablemente menor. Con lo anterior, se facilita el cálculo de la pérdida de energía por unidad de distancia ( $dE/dx$ ) para la partícula incidente, tomando en cuenta que una partícula rápida al atravesar un material no sólo observa un electrón a su paso sino también los que se encuentran a sus alrededores y si el sistema tiene  $N$  átomos por unidad de volumen con  $Z$  electrones por átomo; entonces  $dE/dx$  se hallará multiplicando el número de electrones  $dn = NZ 2\pi b db dx$  por la transferencia de energía  $\Delta E(b)$ . Integrando sobre todos los parámetros de impacto (ver fig. 2.4) dicha expresión<sup>[6]</sup> queda, después de sustituir la ec. (2.17) como:

$$\frac{dE}{dx} \cong 2\pi NZ \int_{b_{min}}^{b_{max}} \Delta E(b) db = \frac{NZ}{4\pi m} \left( \frac{ze^2}{\epsilon_0 u} \right)^2 \int_{z^2/\gamma m u^2}^{\gamma u/\omega} \frac{db}{b}, \quad (2.18)$$

entonces

$$\frac{dE}{dx} \cong \frac{NZ}{4\pi m} \left( \frac{ze^2}{\epsilon_0 u} \right)^2 \ln \left( \frac{\gamma^2 m u^3}{ze^2 \omega} \right), \quad (2.19)$$

que es la ecuación de Bethe clásica (no cuántica) para la pérdida de energía de una partícula atravesando un material.



*Fig.2.4. El proyectil al penetrar una muestra es frenada por la estructura interna del material. La partícula a su paso advierte la presencia de electrones y por supuesto cargas mayores como son los núcleos atómicos.*

### 2.3) PROCESOS DE RADIACIÓN POR CARGAS EN MOVIMIENTO ACELERADO

Toda carga acelerada emiten radiación electromagnética<sup>[6]</sup>. El caso más simple corresponde a la radiación donde la fuente es una carga puntual moviéndose con una cierta aceleración. Para la evaluación de los campos eléctrico y magnético consideremos la figura 2.5, donde en la posición de la partícula y la del observador se toma en cuenta el tiempo para el cual la partícula comenzó a radiar y el retardo que se presenta en llegar la señal al punto de observación. Lo anterior significa que, el campo electromagnético observado en algún punto no depende de la posición ni del movimiento de la carga presente, sino del tiempo pasado en donde la carga comenzó a radiar, ya que la radiación tarda un tiempo  $t$  en llegar al punto  $P=(x, y, z)$  en donde se va detectar, recorriendo una distancia  $r'$  (llamada distancia de retardo). Es decir, no se debe considerar la densidad de la carga como puntual, ya que representa un pequeño volumen, por lo que el espacio ocupado por la partícula de carga  $q$  hace que varíe el tiempo de retardo de una parte de  $q$  y cualquier otra.

Se considera la partícula  $q$  moviéndose con una velocidad no necesariamente uniforme  $u$ , y ésta tarda un tiempo  $t'$  (tiempo de retardo) en llegar a  $P'=(x',y',z')$  donde éste punto representa la posición de algún elemento de la partícula (ver fig. 2.6), de manera que el tiempo de retardo se calcula como  $t' = t - \frac{r'}{c}$ , donde  $c$  se considera la velocidad de la luz, debido a que la radiación tarda un tiempo  $\frac{r'}{c}$  en llegar del punto  $P'$  al punto  $P$  y la distancia de retardo se estima como<sup>[26]</sup>

$$r'^2 = (x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2. \quad (2.20)$$

Cuando se calcula un campo  $d\psi$  en el punto  $P$  debido a una fuente  $s$  que se encontraba en el punto  $P'$  cuando comenzó a radiar y ésta tardó un tiempo  $t$  en llegar al observador, de manera que para evaluarse se puede integrar sobre todas las regiones donde  $s \neq 0$ , entonces<sup>[16]</sup>

$$\psi(P,t) = \int \frac{s(P', t - r'/c)}{4\pi r'} dV', \quad (2.21)$$

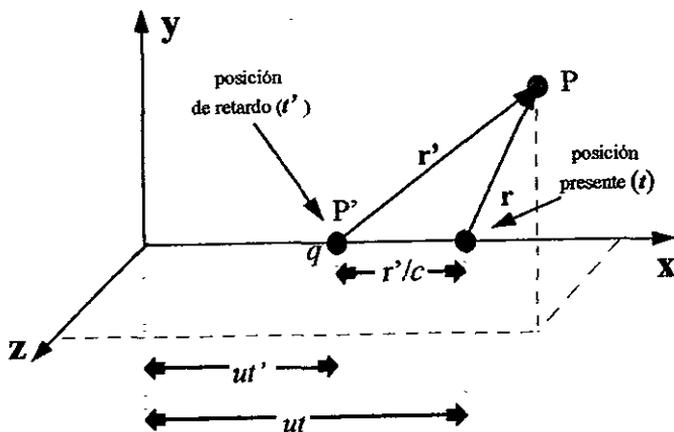
donde  $dV'$  es el elemento de volumen si se considera a la fuente como una carga no puntual.

Si  $s = \frac{\rho}{\epsilon_0}$ ,  $\psi = \phi$  es el potencial escalar y está dado como:

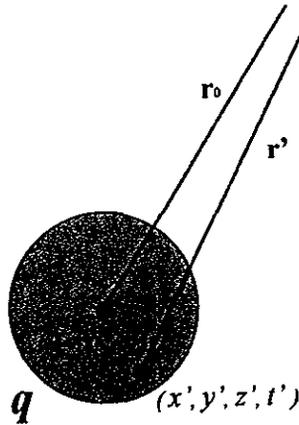
$$\phi(P,t) = \int \frac{\rho(P', t - r'/c)}{4\pi\epsilon_0 r'} dV', \quad (2.22)$$

y de forma análoga, si  $\vec{s} = \frac{\vec{j}}{\epsilon_0 c^2}$ ,  $\vec{\psi} = \vec{A}$ , es decir es el potencial vectorial

$$\vec{A}(P,t) = \int \frac{\vec{j}(P', t - r'/c)}{4\pi\epsilon_0 c^2 r'} dV'. \quad (2.23)$$



*Fig. 2.5. La radiación proveniente de la partícula en el punto  $P'$  tarda un tiempo  $r'/c$  en llegar al punto  $P$  (observador), por lo que cuando la señal es detectada por el observador, la partícula se encuentra a una distancia  $u(t-t')$  del lugar donde se generó la radiación.*



*Fig. 2.6. La partícula no se considera perfectamente como un punto, sino que está compuesta por pequeños elementos de volumen, los cuales al radiar, no lo harán al mismo tiempo pues esta radiación dependerá de la posición del punto P'.*

Se considera el tiempo de retardo  $t'$  distinto para diferentes partes de la carga  $q$  y el centro de masa de la partícula se encuentra colocado en la posición  $P_0 = (x_0, y_0, z_0)$  para un tiempo  $t_0$ , así que la mejor aproximación para un elemento de volumen en la posición  $P_0$  para  $t_0$ , que se desplace a la posición  $P'$  para  $t'$ , se lleva a cabo considerando que la densidad de carga cumple con  $\rho(x', y', z', t') = \rho(x_0, y_0, z_0, t_0)$  y desarrollando una serie de Taylor alrededor de  $P_0$  como<sup>[26]</sup>

$$x' = x_0 + u_x(t' - t_0) + \frac{1}{2} \dot{u}_x(t' - t_0)^2 + \dots \quad (2.24)$$

de manera similar para  $y'$  y  $z'$ .

Como la densidad de carga en toda la partícula no se puede calcular, ya que se esta evaluando el elemento de volumen  $dV' = dx' dy' dz'$  (el cual no se considera fijo), se tiene que

la transformación del elemento de volumen  $dV_0 = dx_0 dy_0 dz_0$  se calcula por medio de la siguiente expresión<sup>[27]</sup>

$$dV_0 = \frac{\partial(x_0, y_0, z_0)}{\partial(x', y', z')} dV', \quad (2.25)$$

donde  $\frac{\partial(x_0, y_0, z_0)}{\partial(x', y', z')}$  se considera el determinante Jacobiano y se representa por

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x_0}{\partial x'} & \frac{\partial x_0}{\partial y'} & \frac{\partial x_0}{\partial z'} \\ \frac{\partial y_0}{\partial x'} & \frac{\partial y_0}{\partial y'} & \frac{\partial y_0}{\partial z'} \\ \frac{\partial z_0}{\partial x'} & \frac{\partial z_0}{\partial y'} & \frac{\partial z_0}{\partial z'} \end{vmatrix}, \quad (2.26)$$

ahora para calcular el Jacobiano se despeja  $x_0$  de la ec. (2.24) y se deriva con respecto a  $x'$ ,  $y'$  y  $z'$  con lo que resulta

$$\frac{\partial x_0}{\partial x'} = 1 - \frac{\partial'}{\partial x'} (u_x + \dot{u}_x(t-t_0) + \dots) \quad (2.27.a)$$

$$\frac{\partial x_0}{\partial y'} = -\frac{\partial'}{\partial y'} (u_x + \dot{u}_x(t-t_0) + \dots) \quad (2.27.b)$$

$$\frac{\partial x_0}{\partial z'} = -\frac{\partial'}{\partial z'} (u_x + \dot{u}_x(t-t_0) + \dots) \quad (2.27.c)$$

de la misma manera para los demás elementos de la ec. (2.26), por lo que al calcular (2.26) se tiene

$$J = \frac{\partial(x_0, y_0, z_0)}{\partial(x', y', z')} = 1 - \left( u_x \frac{\partial'}{\partial x'} + u_y \frac{\partial'}{\partial y'} + u_z \frac{\partial'}{\partial z'} \right) + \\ - \left( \dot{u}_x(t-t_0) \frac{\partial'}{\partial x'} + \dot{u}_y(t-t_0) \frac{\partial'}{\partial y'} + \dot{u}_z(t-t_0) \frac{\partial'}{\partial z'} \right) + \dots \quad (2.28)$$

Si la partícula es pequeña en comparación con la distancia al punto P, los cambios en  $x'$ ,  $y'$ ,  $z'$  correspondientes en la carga  $q$  pueden despreciarse<sup>[26]</sup>, con lo cual, el intervalo de tiempo  $t' - t_0$  puede despreciarse y el Jacobiano de la expresión anterior no tomará en cuenta los términos de orden mayor a uno.

Para calcular el Jacobiano se tienen que desarrollar las derivadas parciales de  $t' = t - \frac{r'}{c}$ , por lo que utilizando la ec. (2.20) se obtiene

$$\frac{\partial t'}{\partial x'} = \frac{1}{c} \frac{x - x'}{r'}, \quad (2.29.a)$$

$$\frac{\partial t'}{\partial y'} = \frac{1}{c} \frac{y - y'}{r'}, \quad (2.29.b)$$

$$\frac{\partial t'}{\partial z'} = \frac{1}{c} \frac{z - z'}{r'}, \quad (2.29.c)$$

si se considera  $r'$  la distancia de retardo de la partícula entonces de la misma forma el vector posición de retardo se considera por  $\vec{r}' = (x - x', y - y', z - z')$  y el vector velocidad como  $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$ . De manera que, la ec. (2.28) se puede expresar en forma vectorial si se toma en cuenta la ec. (2.29) y las condiciones anteriores, y así<sup>[27]</sup>

$$J = \frac{\partial(x_0, y_0, z_0)}{\partial(x', y', z')} = 1 - \frac{\vec{r}' \cdot \vec{u}}{cr'} \quad (2.30)$$

por último para hacer la transformación del elemento de volumen se despeja  $dV'$  de la ec. (2.25), se tiene

$$dV' = \frac{dV_0}{J} = \frac{dV_0}{1 - \frac{\vec{r}' \cdot \vec{u}}{cr'}}, \quad (2.31)$$

y sustituyendo esta ecuación en las ecs. (2.22) y (2.23) para calcular la densidad de carga  $\rho$  y el flujo de corriente  $\vec{j}$ . Por lo tanto, el potencial escalar se expresa de la forma

$$\phi(P, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\left(r' - \frac{\vec{r}' \cdot \vec{u}}{c}\right)} \int \rho dV_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{\left(r' - \frac{\vec{r}' \cdot \vec{u}}{c}\right)}; \quad (2.32)$$

lo mismo para el potencial vectorial

$$\vec{A}(P, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 c^2} \frac{q\vec{u}}{\left(r' - \frac{\vec{r}' \cdot \vec{u}}{c}\right)} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q\vec{u}}{\left(r' - \frac{\vec{r}' \cdot \vec{u}}{c}\right)}; \quad (2.33)$$

estas ecuaciones representan los potenciales de *Liénard-Wiechert*<sup>[16]</sup>.

Si se tiene que la relación

$$s = \left(r' - \frac{\vec{r}' \cdot \vec{u}}{c}\right), \quad (2.34)$$

entonces los potenciales de Liénard-Wiechert por simplicidad se expresan como

$$\phi(P, t) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{s}, \quad (2.35)$$

$$\vec{A}(P, t) = \frac{\mu_0 q}{4\pi} \frac{\vec{u}}{s}. \quad (2.36)$$

Para calcular los campos electromagnéticos con la ayuda de la ec. (2.3) se necesita la derivada parcial de la posición de retardo con respecto al tiempo de retardo, la cual se considera negativa ( $-\vec{u}$ ), de manera que manteniendo el punto de observación fijo P :

$$\left(\frac{\partial'}{\partial t'}\right)_P = -\frac{\vec{r}' \cdot \vec{u}}{r'}, \quad (2.37)$$

pero nótese que para calcular los campos, las ecs.(2.3), están dadas en términos de la posición y tiempo presentes, lo cual, con la ayuda de

$$\frac{\partial'}{\partial t} = c \left(1 - \frac{\partial'}{\partial t}\right), \quad (2.38)$$

y utilizando la regla de la cadena y la ec. (2.37) se tiene:

$$\frac{\partial'}{\partial t} = \frac{\partial'}{\partial t'} \frac{\partial t'}{\partial t} = -\frac{\vec{r}' \cdot \vec{u}}{r'} \frac{\partial t'}{\partial t}, \quad (2.39)$$

de manera que al igualar la ec. (2.38) y la (2.39) se obtiene:

$$\frac{\partial'}{\partial t} = \frac{r'}{s}, \quad (2.40)$$

con lo cual la transformación de las derivadas del tiempo toma la forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{r'}{s} \frac{\partial}{\partial t'}. \quad (2.41)$$

En forma semejante para el operador gradiente se considera que<sup>[12]</sup>:

$$\nabla = \nabla_1 - \frac{\vec{r}'}{sc} \frac{\partial}{\partial t'}, \quad (2.42)$$

donde  $\nabla_1$  diferencia con respecto al primer argumento de  $r'(P, t')$ , es decir, se mantiene el tiempo de retardo constante.

Ahora, se pueden calcular los campos electromagnéticos utilizando la ecs. (2.41) y (2.42), y sustituyendo los potenciales de retardo de *Liénard-Wiechert* en

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad (2.43)$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}.$$

Así, las soluciones de las ecuaciones de Maxwell toman la forma<sup>[12, 13]</sup>:

$$\vec{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{1}{s^3} (\vec{r}' - r' \vec{\beta})(1 - \beta^2) + \frac{1}{c^2 s^3} \left[ \vec{r}' \times \left( \{ \vec{r}' - r' \vec{\beta} \} \times \dot{\vec{u}} \right) \right] \right\}, \quad (2.44)$$

$$\vec{B} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 c^2} \left\{ \frac{\dot{\vec{u}} \times \vec{r}'}{s^3} (1 - \beta^2) + \frac{1}{c s^3} \frac{\vec{r}'}{r'} \times \left[ \vec{r}' \times \left( \{ \vec{r}' - r' \vec{\beta} \} \times \dot{\vec{u}} \right) \right] \right\}, \quad (2.45)$$

desarrollando los productos vectoriales estas ecuaciones se pueden escribir de una manera más sencilla como:

$$\vec{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{1}{s^3} (\vec{r}' - r' \vec{\beta})(1 - \beta^2) + \frac{1}{c^2 s^3} (\vec{r}' \bullet \dot{\vec{u}}) (\vec{r}' - r' \vec{\beta}) - \frac{r' \dot{\vec{u}}}{c^2 s^2} \right\}, \quad (2.46)$$

$$\vec{B} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{1}{c s^3} (\vec{\beta} \times \vec{r}') (1 - \beta^2) + \frac{1}{c^3 s^3} (\vec{r}' \bullet \dot{\vec{u}}) (\vec{\beta} \times \vec{r}') + \frac{1}{c^3 s^2} (\dot{\vec{u}} \times \vec{r}') \right\}, \quad (2.47)$$

observando los términos de las ecuaciones anteriores se ve que algunos dependen de la velocidad de la partícula mientras que otros de su aceleración, es decir, si denotamos los términos que dependan de la velocidad como

$$\vec{E}_v = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{1}{s^3} (\vec{r}' - r' \vec{\beta}) (1 - \beta^2) \right\} \quad (2.48.a)$$

y

$$\vec{B}_v = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{1}{cs^3} (\vec{\beta} \times \vec{r}') (1 - \beta^2) \right\}, \quad (2.48.b)$$

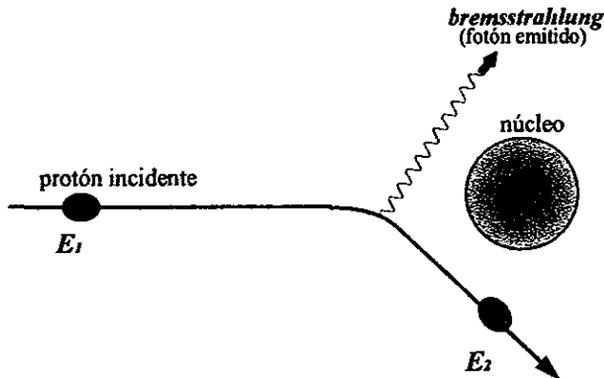
y los de la aceleración

$$\vec{E}_a = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{1}{c^2 s^3} (\vec{r}' \bullet \dot{\vec{u}}) (\vec{r}' - r' \vec{\beta}) - \frac{r' \dot{\vec{u}}}{c^2 s^2} \right\} \quad (2.48.c)$$

y

$$\vec{B}_a = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{1}{c^3 s^3} (\vec{r}' \bullet \dot{\vec{u}}) (\vec{\beta} \times \vec{r}') + \frac{1}{c^3 s^2} (\dot{\vec{u}} \times \vec{r}') \right\}; \quad (48.d)$$

así del mismo modo se puede notar que los términos del campo eléctrico que dependen sólo de la velocidad son perpendiculares a los términos del campo eléctrico que también dependen de ésta,  $\vec{E}_v \perp \vec{B}_v$  y  $\vec{E}_a \perp \vec{B}_a$ . Se puede observar de las ecs. (2.48) que los campos que relacionan directamente la velocidad se consideran esencialmente estáticos, ya que decrecen como el inverso de la distancia al cuadrado,  $s^2$ , por lo que se considera una radiación de poco alcance, en cambio la ec. (2.48.c) y la ec. (2.48.d) tienen mayor alcance debido a que decrecen más lentamente como  $s^1$ , conociéndose estos últimos como *campos de radiación*. De esta manera, si una partícula cargada penetra en un bloque de material, se produce una deceleración o aceleración en ella, y la radiación electromagnética generada en el proceso, se le considera *radiación X* o *bremsstrahlung*, como se observa en la figura 2.7.



*Fig.2.7. Una partícula que incide en una muestra puede desviarse por un núcleo atómico emitiendo radiación. La radiación se debe a que al cambiar de trayectoria, la carga disminuye su velocidad, es decir, se desacelera emitiendo bremsstrahlung.*

También se puede notar que el campo  $\vec{B}$  se puede expresar en términos de  $\vec{E}$  y expresar como

$$\vec{B} = \frac{\vec{r}' \times \vec{E}}{r'c} \quad (2.49)$$

Ahora, nótese que cuando una partícula se mueve con **velocidad constante** no contribuyen los términos  $\vec{E}_s$  y  $\vec{B}_s$  y no hay radiación, ya que estos dependen de que la carga se encuentre acelerada, en cambio, conforme  $\beta \rightarrow 1$  la deformación del campo eléctrico y magnético va cada vez siendo mayor<sup>[13]</sup>, es decir, la concentración del campo se encuentra cada vez más perpendicularmente a la dirección del movimiento conforme vaya incrementándose la velocidad (ver fig. 2.8).

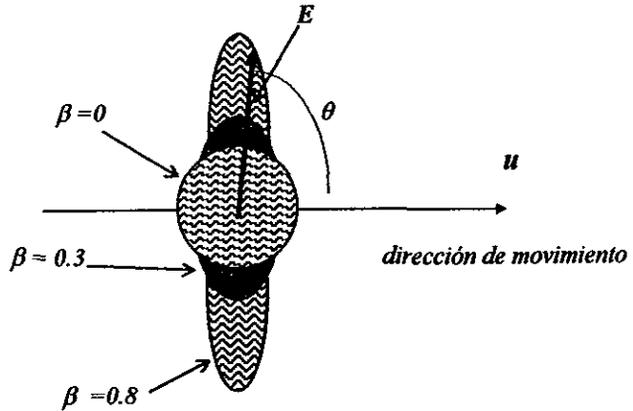


Fig.2.8. Patrón de campo eléctrico de una carga moviéndose a velocidad constante.

Considerando la radiación de una partícula cargada que se mueve a **baja velocidad** (no necesariamente constante) comparada con  $c$ , se tiene  $\beta \rightarrow 0$  y  $s \rightarrow r'$ , y los campos de radiación son<sup>[13]</sup>:

$$\vec{E}_{rad} = \vec{E}_{\dot{\vec{u}}} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 c^2 r'^3} \left[ (\vec{r}' \cdot \dot{\vec{u}}) \vec{r}' - r'^2 \dot{\vec{u}} \right] \quad (2.50)$$

y

$$\vec{B}_{rad} = \vec{B}_{\dot{\vec{u}}} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 c^3 r'^2} \dot{\vec{u}} \times \vec{r}' \quad (2.51)$$

con lo cual el vector de Poynting  $\vec{S}$ , tomándose en consideración que  $\vec{E}_{\dot{\vec{u}}} = \vec{E}_{rad}$  y  $\vec{B}_{\dot{\vec{u}}} = \vec{B}_{rad}$  (para simplificar consideresé  $\vec{E}_{rad}$  simplemente  $\vec{E}$ ) es:

$$\begin{aligned}
S &= \varepsilon_0 c^2 (\vec{E}_{rad} \times \vec{B}_{rad}) \\
&= \varepsilon_0 \frac{c}{r'} [\vec{E} \times (\vec{r}' \times \vec{E})] \\
&= \varepsilon_0 \frac{c}{r'} [(E^2) \vec{r}' - (\vec{E} \cdot \vec{r}') \vec{E}], \tag{2.52}
\end{aligned}$$

en vista que  $\vec{E} \perp \vec{r}'$ , el último término de la ec. (2.52) se anula y el vector de Poynting queda como:

$$\vec{S} = \varepsilon_0 c E^2 \frac{\vec{r}'}{r'}; \tag{2.53}$$

tomando en cuenta la ec. (2.50)

$$E^2 = \frac{q^2}{16\pi^2 \varepsilon^2 c^4} \frac{1}{r'^4} [r'^2 \dot{\vec{u}}^2 - (\vec{r}' \cdot \dot{\vec{u}})^2], \tag{2.54}$$

utilizando el producto escalar  $\vec{r}' \cdot \dot{\vec{u}} = r' |\dot{\vec{u}}| \cos \theta$  y factorizando, la potencia por unidad de área radiada es<sup>(12)</sup>:

$$\vec{S}_{rad} = \frac{q^2}{(4\pi)^2 \varepsilon_0} \frac{\dot{\vec{u}}^2 \sin^2 \theta}{c^3 r'^2} \hat{n}, \tag{2.55}$$

siendo  $\hat{n}$  el vector unitario en la dirección de  $\vec{r}'$ .

De manera que la distribución de radiación como la potencia radiada por unidad de ángulo sólido es:

$$\frac{dP}{d\Omega} = (\vec{S} \cdot \hat{n}) r'^2 = \frac{q^2 \dot{\vec{u}}^2}{(4\pi)^2 \varepsilon_0 c^3} \sin^2 \theta, \tag{2.56}$$

cuyo patrón de radiación se gráfica y se muestra en la fig. 2.9, para distintos valores de  $\beta$ . En el caso de partículas muy lentas, el patrón de radiación resulta perpendicular a la trayectoria.

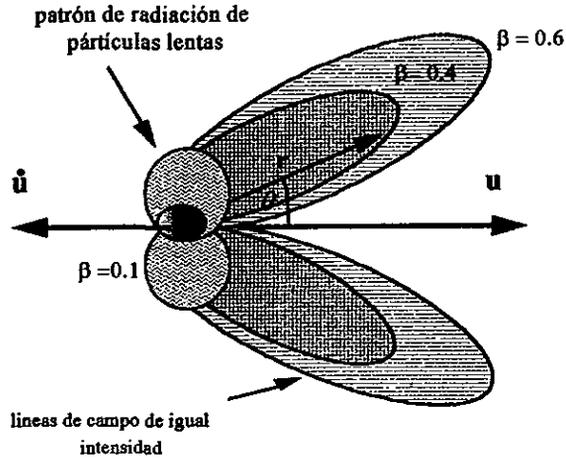


Fig. 2.9. Patrón de radiación de una partícula frenada con diferentes velocidades.

Si  $\beta \rightarrow 1$ , las ecuaciones  $\vec{E}_{\text{rad}}$  y  $\vec{B}_{\text{rad}}$  son

$$\vec{E}_{\text{rad}} = \frac{q}{4\pi_0 \epsilon_0 c^2} \left[ \frac{1}{s^3} (\vec{r}' \cdot \dot{\vec{u}}) \vec{r}' - \frac{r' \ddot{\vec{u}}}{s^2} \right] \quad (2.57)$$

y

$$\vec{B}_{\text{rad}} = \frac{qr'}{4\pi\epsilon_0 c^3 s^2} \dot{\vec{u}} \times \vec{r}' \quad (2.58)$$

Ahora, al calcular el vector de Poynting para velocidades de proyectiles cercanas a la velocidad de la luz, y siguiendo los mismos paso que el cálculo de la ec. (2.55) se tiene:

$$\vec{S}_{rad} = \frac{e^2 \dot{u}^2}{(4\pi)^2 \epsilon_0 c^3} \frac{r'^4 \sin^2 \theta}{s^6} \hat{n}, \quad (2.59)$$

donde ahora  $r' \neq s$ , entonces la cantidad de energía radiada por la partícula, por unidad de tiempo por unidad de ángulo sólido  $d\Omega$  y debido que la cantidad de potencia radiada por  $d\Omega$  que atraviesa una superficie a una distancia  $r'$  en un tiempo  $t$  en llevarse a cabo, es igual a la energía perdida por la carga en el tiempo  $t' es^{13}$ :

$$\frac{dP}{d\Omega} = - \frac{dU(\theta)}{dt'} = \frac{dU(\theta)}{dt} \frac{dt}{dt'}. \quad (2.60)$$

Como la energía por unidad de tiempo se considera  $(\vec{S}_{rad} \bullet \hat{n})r'^2$ , la ec. (2.60) se renombra

$$\frac{dP}{d\Omega} = (\vec{S}_{rad} \bullet \hat{n})r'^2 \frac{dt}{dt'}, \quad (2.61)$$

donde el producto punto  $(\vec{S}_{rad} \bullet \hat{n})$  es la componente del vector de Poynting evaluada en la posición del observador a un tiempo  $t$ , correspondiente a la radiación emitida de la partícula en el tiempo  $t'$ .

Considerando la inversa de la ec. (2.40) y como  $s = r' - (\vec{r}' \bullet \vec{\beta})$  se tiene:

$$\frac{dt}{dt'} = \frac{r' - (\vec{r}' \bullet \vec{\beta})}{r'}, \quad (2.62)$$

como  $\hat{n} = \frac{\vec{r}'}{r'}$  y, utilizando la relación los vectores  $\vec{\beta} \bullet \hat{n} = \beta \cos \theta$ , se tiene que la ec. (2.62)

toma la forma:

$$\frac{dt}{dt'} = 1 - \beta \cos\theta; \quad (2.63)$$

y al sustituir en la ec. (2.61), y tomar en cuenta que  $\frac{r'^6}{s^6} = \frac{1}{(1 - \beta \cos\theta)^6}$ , se tiene la ecuación de *Larmor*<sup>[12]</sup>:

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{e^2 \dot{\vec{u}}^2}{(4\pi)^2 \epsilon_0 c^3} \frac{\sin^2 \theta}{(1 - \beta \cos\theta)^3}, \quad (2.64)$$

mostrándose el patrón de radiación en la figura 2.9.

## 2.4) ENERGÍA RADIADA DEPENDIENTE DE LA FRECUENCIA

De la sección 2.3 se tiene que la potencia radiada por unidad de ángulo sólido esta dada con respecto al tiempo del observador como:

$$\frac{dP(t)}{d\Omega} = (\vec{S} \cdot \hat{n})r'^2 = \varepsilon_0 c |\vec{E}_{rad}|^2 r'^2. \quad (2.65)$$

Debido a que la ecuación anterior es una función del tiempo se puede utilizar una transformada de Fourier para expresar la función  $\vec{f}(t) = (\varepsilon_0 c)^{1/2} r' \vec{E}_{rad}$  como una función dependiente de sus frecuencias<sup>[6]</sup>

$$\vec{f}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{f}(t) e^{i\omega t} dt \quad (2.66)$$

ya que  $P = \frac{dW}{dt}$  entonces la ec. (2.65) se puede reescribir como

$$\frac{d^2W}{dt d\Omega} = (\vec{S} \cdot \hat{n})r'^2 = |\vec{f}(t)|^2,$$

e integrando respecto a  $t$

$$\begin{aligned} \frac{dW}{d\Omega} &= \int_{-\infty}^{\infty} |\vec{f}(t)|^2 dt \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \vec{f}^*(\omega') \cdot \vec{f}(\omega) e^{i(\omega' - \omega)t} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \vec{f}^*(\omega') \cdot \vec{f}(\omega) \delta(\omega' - \omega), \end{aligned} \quad (2.67)$$

donde se ha utilizado la definición de la delta de Dirac. Finalmente se tiene que la energía radiada por unidad de ángulo sólido es:

$$\frac{dW}{d\Omega} = \int_{-\infty}^{\infty} |\vec{f}(\omega)|^2 d\omega. \quad (2.68)$$

Como se puede ver el dominio de la frecuencia contiene dos contribuciones para generar el mismo período, es decir, mientras se puede hablar sólo de tiempos positivos, en el dominio

de las frecuencias se tienen positivas y negativas. Dicho de otra manera, para cada tiempo se tienen dos frecuencias que identifican ese período.

De lo anterior, se tiene que como  $\vec{f}(\omega)$  en el dominio de frecuencias es simétrica entonces se puede integrar sólo la parte positiva y multiplicarla por un factor de 2. Por lo cual, la energía radiada por ángulo sólido por unidad de intervalo de frecuencia se define como<sup>(6)</sup>:

$$\frac{d^2W}{d\omega d\Omega} = \frac{d^2I}{d\omega d\Omega} = 2|\vec{f}(\omega)|^2. \quad (2.69)$$

Utilizando la ec. (2.66), y con la definición de  $\vec{f}(t)$  se tiene:

$$\vec{f}(\omega) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 c}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} r' \vec{E}_{rad} e^{i\omega t} dt; \quad (2.70)$$

considerando la ec. (2.46) se tiene

$$\vec{E}_{rad} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{c^2 s^3} \vec{r}' \times \left[ (\vec{r}' - r' \vec{\beta}) \times \dot{\vec{u}} \right], \quad (2.71)$$

al sustituir  $\hat{n} = \frac{\vec{r}'}{r'}$  y  $s = r'(1 - \hat{n} \cdot \vec{\beta})$  la ecuación anterior se transforma en

$$\vec{E}_{rad} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{c} \frac{\hat{n} \times \left[ (\hat{n} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}} \right]}{r' (1 - \hat{n} \cdot \vec{\beta})^3}, \quad (2.72)$$

la cual se sustituye en la ec. (2.70), tomando la forma

$$\vec{f}(\omega) = \left( \frac{q^2}{32\pi^3 c \epsilon_0} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{n} \times \left[ (\hat{n} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}} \right]}{(1 - \hat{n} \cdot \vec{\beta})^3} e^{i\omega t} dt, \quad (2.73)$$

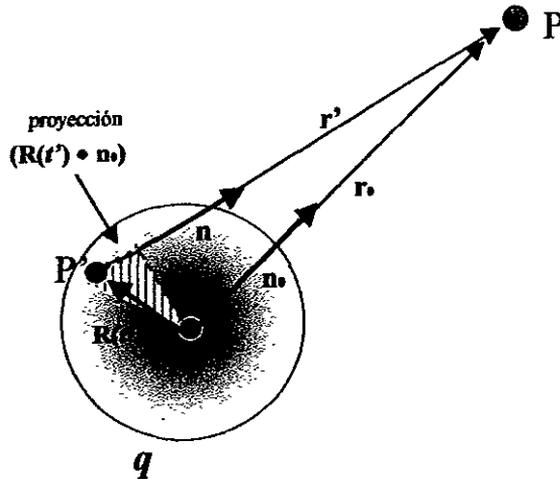
donde  $\dot{\vec{\beta}} = \frac{\dot{\vec{u}}}{c}$ . Haciendo el cambio de variable,  $\frac{dt}{dt'} = 1 - \hat{n} \cdot \vec{\beta}$ , es decir, se toma el tiempo de retardo en lugar del tiempo presente y además si la distancia  $r' \cong r_0 - [\hat{n} \cdot \vec{R}(t')]$ , donde  $r_0$

es la distancia del  $P_0$  al punto P, como se observa en la figura 2.10, y si se considera  $R \ll r'$  entonces  $\hat{n} \cong \hat{n}_0$ , y se tiene<sup>[6]</sup>

$$\vec{f}(\omega) = \left( \frac{q^2}{32\pi^3 c \epsilon_0} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{n} \times \left[ (\hat{n} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}} \right] e^{i\omega \left( t - \frac{\hat{n} \cdot \vec{R}(t')}{c} \right)}}{(1 - \hat{n} \cdot \vec{\beta})^2} dt', \quad (2.74)$$

con lo que la ec. (2.69) indica que la energía radiada por ángulo sólido por unidad de frecuencia es

$$\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} = \frac{q^2}{16\pi^3 c \epsilon_0} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{n}_0 \times \left[ (\hat{n}_0 - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}} \right] e^{i\omega \left( t - \frac{\hat{n}_0 \cdot \vec{R}(t')}{c} \right)}}{(1 - \hat{n}_0 \cdot \vec{\beta})^2} dt' \right|^2. \quad (2.75)$$



**Fig. 2.10.** La dirección del vector unitario  $\mathbf{n}$  se asemeja al vector  $\mathbf{n}_0$  cuando  $r' \gg R$ , es decir, cuando la distancia del punto P al centro de la carga ( $P_0$ ) es despreciable en comparación a la distancia al observador.

## 2.5) PROCESOS DE EMISIÓN POR DECAIMIENTO

La espectroscopia PIXE (*Particle Induced X-Ray Emission*) es un método de análisis de la materia, el cual consiste en estudiar la energía de los rayos X producidos en los átomos de la muestra por un haz de iones de cierta energía<sup>[2]</sup>. Por este medio podemos caracterizar a cada material sobre el cual haya incidido éste haz.

El haz de iones, al incidir en la muestra, puede transferir energía a un electrón de tal manera que a partir de cierto valor de energía, el electrón puede escapar del átomo dejándolo ionizado y en un estado excitado. Pero este átomo no permanece en dicho estado, ya que un electrón de niveles más altos de energía tiende a ocupar el lugar vacante, emitiendo un fotón cuya energía va depender de la capa en que se encontraba el electrón vacante, del electrón nuevo y del tipo de átomo que se trate. Los rayos X se producen de transiciones en las capas K y L principalmente, siendo las longitudes de onda del orden de  $10^{-8}$  -  $10^{-12}$  m.

La ionización de un átomo también puede realizarse por medio de radiación electromagnética (luz ultravioleta, rayos X o rayos  $\gamma$ ).

Los átomos componentes de una muestra pueden bombardearse con protones, alfas o iones pesados con energías comprendidas entre 1-10 MeV por nucleón. Las partículas pesadas que interactúan con los electrones del átomo tienen una probabilidad importante de expulsar alguno de estos electrones. Los huecos en las capas electrónicas interiores (K o L) son subsecuentemente llenadas por alguno de los electrones exteriores y la energía ganada, debida a las transiciones, puede ser emitida como radiación X característica, ya sea de la capa K o L. Esta radiación se aproxima muy bien a una distribución isotrópica<sup>[4]</sup>. La probabilidad de que se lleve a cabo la transición de un electrón a una vacante en las capas internas, para producir la emisión de un fotón de rayos X, debido a la colisión de un ion con un átomo, se le conoce como fluorescencia<sup>[2]</sup>.

La energía de los rayos X característicos de cada capa, van a depender de las transiciones que se efectúen entre las subcapas de las capas K, L, M, ... Estas transiciones están acompañadas por la emisión de un fotón de rayos X, con energía característica del elemento atómico y de los niveles entre los cuales ocurre la transición<sup>[2]</sup>. Las transiciones entre las capas K, L, M, etc; pueden ocurrir siempre y cuando cumplan con la reglas de

selección, las cuales establecen que para que un sistema atómico radie debido a la transición de un estado electrónico a otro, deben de tener alta probabilidad de ocurrir (también existen las transiciones prohibidas las cuales no tienen probabilidad de darse), lo cual se cumple, si las transiciones de los estados electrónicos son tales que el número cuántico orbital  $l$  y su número cuántico magnético  $m$  cambien de la siguiente manera<sup>[7]</sup>:

*reglas de selección*

$$\Delta l = \pm 1 \quad (2.76)$$

$$\Delta m = \pm 1 \text{ ó } 0$$

Por lo que la radiación característica de cada capa depende de las contribuciones producidas en las subcapas debido a las transiciones producidas en estas, lo que es lo mismo que la radiación total de una capa, es la suma correspondiente de transiciones de las subcapas.

De lo anterior es claro que, la probabilidad de ionizar un átomo tiene estrecha relación con la sección transversal de ionización. Un factor importante en la ionización es la fluorescencia que se refiere a la mayor sección transversal de rayos  $X^{[2]}$ , debido a la transición.

La estructura de los átomos se considerada como una distribución electrónica ordenada en varias capas K, L, M, ..., las cuales conforme están más cerca del núcleo tendrán más energía de amarre.

Las capas L son asimétricas y anisotrópicas en comparación con la capa K que presenta simetría esférica, ya que la capa L tiende a presentar una dirección preferencial al interactuar con un haz incidente, los rayos  $X_K$  inducidos de la muestra por iones son isotrópicos, mientras que los rayos  $X_L$  no lo son, siendo menor su intensidad de radiación en la dirección del haz incidente<sup>[1]</sup>.

# CAPÍTULO

# III

## *BREMSSTRAHLUNG DEL ELECTRÓN SECUNDARIO*

En el capítulo II se indicó que una partícula que se decelera o se acelera, ya sea por frenamiento o cambio de dirección, producirá radiación. De manera que al incidir un haz de partículas sobre una muestra de material, la muestra frenará a la partícula produciéndose radiación por frenamiento; además, debido a que a su paso a través de la muestra, el proyectil puede sacar un electrón de su órbita de algún átomo, el cual, al liberarse siente la presencia de núcleos cercanos y tienden a desviarlo produciendo nuevamente más radiación.

Este capítulo se apoya principalmente en los anteriores, pero el tratamiento se vuelve más riguroso. En la primera parte del capítulo se van a tomar en cuenta las contribuciones a la radiación producidas por estos mecanismos, señalando los más dominantes. Mientras que en las últimas secciones del capítulo se analizará cuál es la de mayor contribución que se presenta para las capas atómicas internas, dependiendo de la energía con la que se expulsa el electrón secundario y, también, cuál es el ángulo donde se observa la mayor contribución de este fenómeno.

### 3.1) RADIACIÓN DE FONDO

Existen dos tipos de radiación que se presentan siempre en la producción de rayos X al utilizar protones, estos son el bremsstrahlung de electrones secundarios y el bremsstrahlung del proyectil.

En general la radiación de fondo es muy baja en intensidad comparada con la hallada por bombardeo de electrones o por exposición a radiación electromagnética proveniente de tubos de rayos X o fuentes radiactivas.

### 3.2) PROCESOS CARACTERÍSTICOS

Los rayos X producidos por colisiones de un ion ligero con un átomo forman fondo o ruido continuo y determinan el límite de detección PIXE en el rango de energías del proyectil de 0.5 a 40 MeV, son agrupados y explicados en tres clases de procesos:

- bremsstrahlung del electrón secundario (SEB)<sup>A</sup>,
- bremsstrahlung atómico (AB)<sup>B</sup>,
- bremsstrahlung del electrón casi libre (QFEB)<sup>C</sup>.

Se ha reportado que, experimentalmente se observa que cuando la energía del proyectil es cercana a 1 MeV, el proceso dominante es AB<sup>[24]</sup>, en cambio el SEB tiene mayor relevancia sobre los otros cuando la energía se aproxima a los 4 MeV<sup>[23]</sup>. En caso de que el protón tenga suficiente energía y llegue a superar los 10 MeV, el proceso QFEB contribuirá en mayor medida<sup>[24]</sup>. De esta forma, estos tres procesos son los más importantes para la energía de los rayos X producidos; en cada caso se cumple que para el proceso AB,  $\hbar\omega \geq T_m$ ; en el SEB,  $T_e < \hbar\omega < T_m$  y en el proceso QFEB,  $\hbar\omega \leq T_e$ , siendo  $\hbar\omega$  la energía característica de los rayos X producidos,  $T_m$  la máxima transferencia de energía dada a un electrón por una partícula cargada y  $T_e$  la energía cinética del electrón vista desde el sistema de referencia del proyectil<sup>[24]</sup>.

A) Secondary Electron Bremsstrahlung, B) Atomic Bremsstrahlung, C) Quasi-Free Electron Bremsstrahlung

Aunque son tres los procesos dominantes en la producción de rayos X, sólo se hará referencia más a fondo en AB y SEB, ya que QFEB es un proceso de muy altas energías y no está contemplado en este trabajo, sólo se hará una pequeña consideración sobre este proceso más adelante.

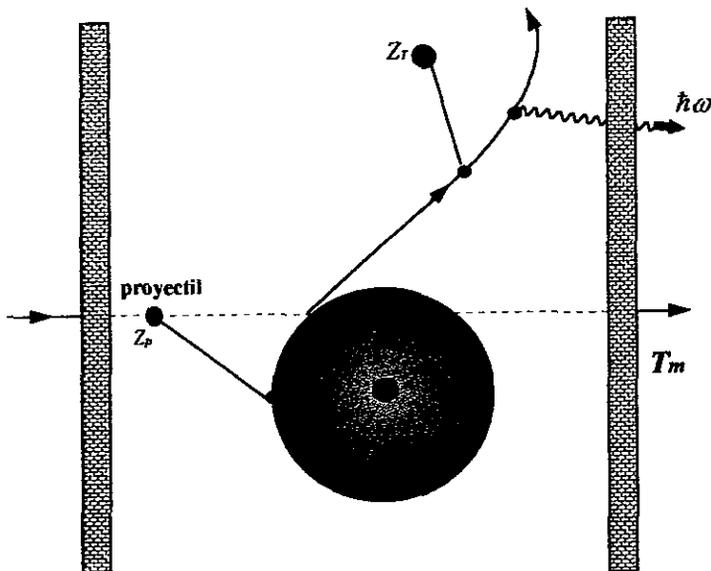
### 3.3) Bremsstrahlung del Electrón Secundario ( SEB )

En este proceso, el proyectil expulsa un electrón de un átomo bombardeado y este electrón pasa a través del material perdiendo su energía. Durante el trayecto, el electrón secundario se dispersa debido al campo coulombiano de un núcleo bombardeado y así se produce *bremsstrahlung* (fig.3.1). Experimentalmente se encuentra que el continuo de esta radiación es muy fuerte a bajas energías del proyectil, pero decrece rápidamente cuando la energía del electrón llega a ser mayor que<sup>[3]</sup>.

$$T_m = \left( \frac{4m_e}{M_p} \right) E_p, \quad (3.1)$$

donde  $m_e$  es la masa del electrón,  $E_p$  la energía del proyectil y  $M_p$  la masa del proyectil.

El espectro de SEB (fig. 3.3), se caracteriza por la cantidad  $T_m$ , de manera que el bremsstrahlung a energía del electrón más alta que  $T_m$  debe ser producida por un electrón secundario expulsado de la capa interior del átomo bombardeado. Como el número de electrones libres en la capa exterior es generalmente mucho mayor que los de la capa interior, la intensidad de SEB decrece rápidamente en la región por arriba de la máxima transferencia de energía  $T_m$ .



*Fig.3.1. Al incidir un proyectil sobre un blanco, éste penetra dentro del material expulsando un electrón de la capa interna de un átomo. El electrón al atravesar la muestra y ser desviado por algún otro núcleo emite radiación debido a la deceleración sufrida.*

De tal forma la sección transversal de la producción de SEB se evalúa como<sup>[24]</sup>:

$$\frac{d\sigma^{sb}}{d(\hbar\omega)d\Omega_L}(E_p, \hbar\omega, \theta_L) = \int_{\hbar\omega}^{\infty} dE_e \int d\Omega_e \frac{d\sigma_e(E_p, E_e, \theta_e)}{dE_e d\Omega_e} \times \int_{\hbar\omega}^{E_e} dE_e' \left( \frac{-N dx}{dE_e'} \right) \frac{d\sigma^{br}}{d(\hbar\omega)d\Omega_{br}}(E_e', \hbar\omega, \theta_{br}), \quad (3.2)$$

donde  $\Omega_L$  se considera el ángulo sólido subtendido por el detector, cuyo significado es:

♦ El primer término  $\frac{d\sigma_e}{dE_e d\Omega_e}(E_p, E_e, \theta_e)$  es la sección transversal del electrón expulsado por el proyectil como una función de la energía del electrón  $E_e$  y el ángulo de expulsión  $\theta_e$  con respecto a la dirección inicial del proyectil (fig.3.2). Esta sección se calcula en términos de

BEA ( ver cap. I). Esta aproximación se usa para estudiar la distribución de energía y transferencia de momento angular de partículas dispersadas por átomos de hidrógeno en varios estados iniciales, ya que se supone que los electrones atómicos son centros dispersores libres e independientes, lo cual es válido si hay grandes transferencias de momento y energías <sup>[18]</sup>.

Apoyándose en la BEA, se estudia la distribución de los electrones expulsados en lugar de la distribución de las partículas dispersadas; Rudd, Gregoire y García calcularon independientemente la sección transversal diferencial por unidad de energía transferida por la expulsión de electrones.

Para esto, primero se deriva la fórmula de la sección transversal para la expulsión de un electrón con una energía particular en una cierta dirección. Si se considera que los electrones del blanco tienen una distribución de velocidad isotrópica  $v_2$ , de manera que la sección transversal diferencial dada en términos de la transferencia de energía  $E$ , el ángulo de expulsión  $\theta$  y  $v_2$ , se caracteriza por la ec.(9) dada en la ref. 18 como

$$\sigma_e(E, v_2, \theta) = \frac{Z_p^2 Z_T^2 e^4 v_1 v_2'}{2m_e v_2 E^3} \times \left[ m_e v_2'^2 \sin^2 \theta_e - E \left\{ 1 - \frac{v_2'}{v_1} \left( 1 - \frac{m_e}{M_p} \right) \cos \theta_e + \frac{m_e v_2'^2}{M_p v_1^2} \right\} \right] |v_1 - v_2'|^{-3}, \quad (3.3)$$

para  $Z_p$  la carga del proyectil,  $Z_T$  la carga del blanco,  $v_1$  la velocidad del proyectil incidente y  $v_2'$  la velocidad de expulsión del electrón.

♦ El segundo término  $\frac{-Ndx}{dE_e'}$  muestra la pérdida de energía de los electrones secundarios en su paso a través del material bombardeado<sup>[4]</sup>, decreciendo la energía del electrón de  $E_e$  hasta una energía menor  $E_e'$ . Este término se calcula utilizando la relación de Bethe obtenida en la ec. (2.19) dada como

$$-\frac{dE'_e}{Ndx} = \frac{4\pi e^4}{m_e v^2} Z_r \ln\left(\frac{1.16}{I} E'_e\right), \quad (3.4)$$

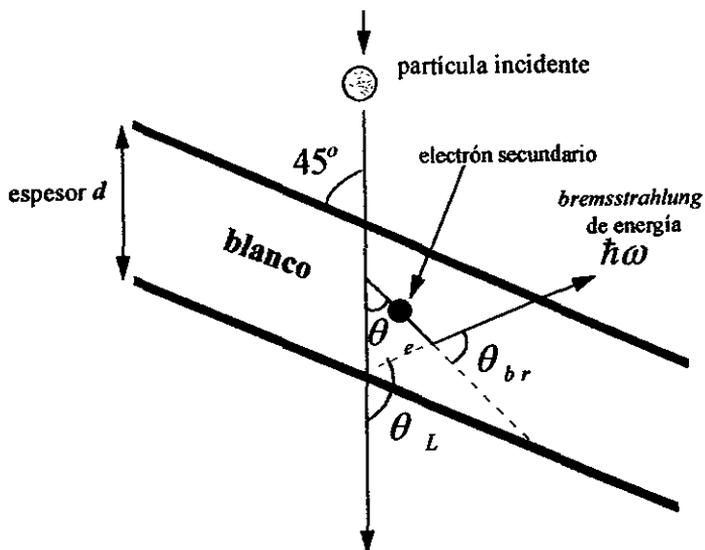
siendo  $I$  la energía de excitación media del blanco.

♦ El último término de la ec. (3.2) evalúa la sección transversal para la producción de bremsstrahlung debido a un electrón de energía  $E'_e$  como una función de la energía del fotón  $\hbar\omega$  y el ángulo de emisión  $\theta_{br}$ , con respecto a la dirección incidente del electrón<sup>[6, 24]</sup>. Para el caso de la producción de bremsstrahlung para altas energías cuando la energía del electrón secundario es igual a la energía característica de radiación electromagnética ( $E'_e = \hbar\omega$ ), es decir igual al bremsstrahlung está dada como<sup>[4]</sup>:

$$\frac{d\sigma^{br}}{d(\hbar\omega)d\Omega_L} = \frac{2}{\pi} \frac{Z^2 e^2}{\hbar c} \left(\frac{e^2}{m_e c^2}\right) \left(\frac{c}{v}\right)^2 \frac{1}{\hbar\omega} \ln\left(4 \frac{E'_e}{\hbar\omega}\right) \sin^2 \theta_{br}, \quad (3.5)$$

donde  $v$  es la velocidad del electrón secundario. En la ec. (3.2) la principal contribución proviene de la región donde la energía del fotón  $\hbar\omega$  es comparable a la energía del electrón secundario  $E'_e$ , de manera que la ec. (3.5) puede tomarse aproximadamente como la mayor contribución para la producción de bremsstrahlung.

Al analizar la ec. (3.3), en la fig. 3. 3 reportada por Ishii en 1976, para un caso en el cual se bombardea una muestra de aluminio (Al) con protones de 4 MeV, se observa que las secciones transversales decrecen muy rápidamente cuando la energía del electrón secundario  $E'_e > T_m$ . Por lo cual, se considera que los electrones expulsados cuya energía cinética  $E_e$  sea menor que  $T_m$  contribuyen en mayor medida a la producción de la sección transversal, los cuales son provenientes de las capas externas (L, M) mientras que los de las capas interiores contribuyen en forma importante para cuando  $E_e > T_m$ . Este mismo comportamiento también se observa cuando un blanco de Ca, (fig 3.4), se bombardea con protones de 3 MeV, en ambos casos se usa la aproximación BEA (ver cap.1).



*Fig.3.2. El electrón expulsado al atravesar el blanco es frenado por la estructura interna, y la radiación emitida puede ser detectada a un ángulo  $\theta_L$  de la dirección del haz incidente.*

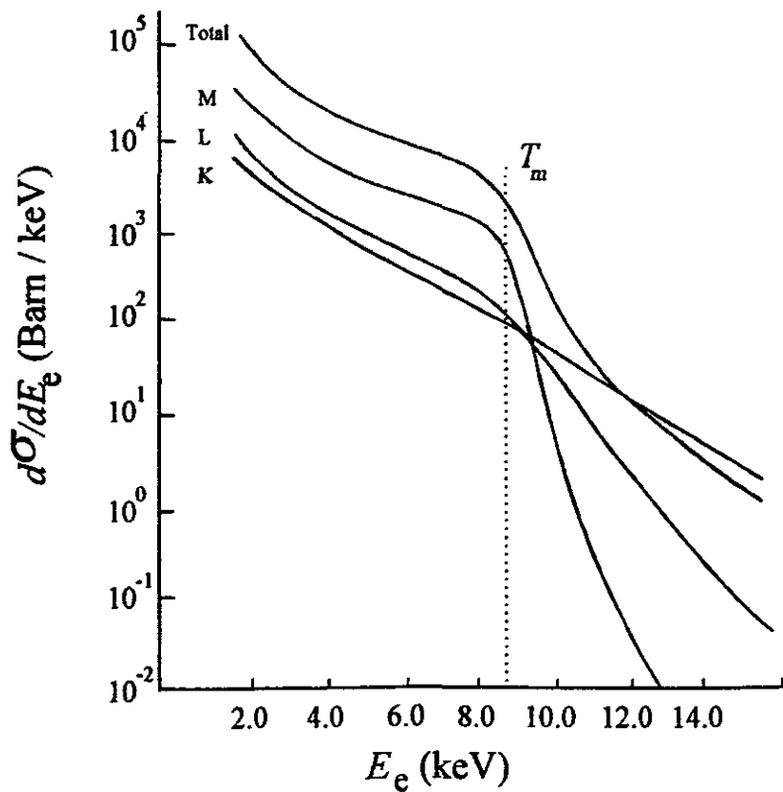
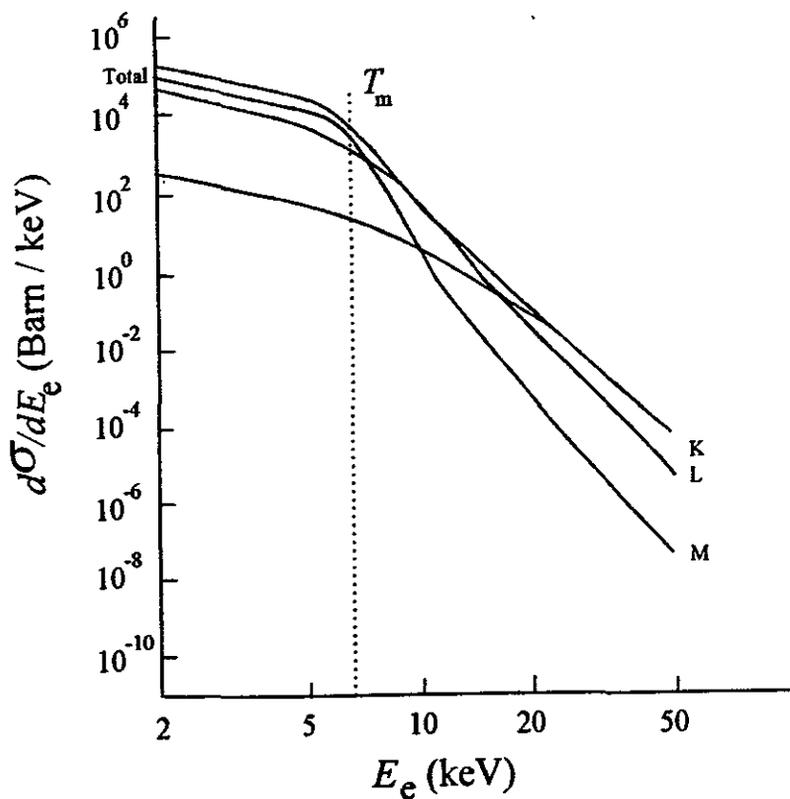


Fig.3.3. Distribución de energía de los electrones secundarios para un blanco de Al bombardeado con protones de 4 MeV (dada por Ishii en 1976), ref. 4.



*Fig.3.4. Distribución de energía de los electrones secundarios para un blanco de Ca bombardeado con protones de 3 MeV (dada por Folkmann en 1974), ref. 3.*

### 3.4) BREMSSTRAHLUNG DEL PROYECTIL

Como se mencionó anteriormente otra radiación de fondo que es relevante es aquella producida por el proyectil. Debido a que ocurren aceleraciones durante las colisiones cercanas entre el proyectil y los núcleos de los átomos blancos, esto da como resultado una producción directa de bremsstrahlung nuclear, la cual llega a ser de interés a muy altas energías de radiación<sup>[3, 4]</sup>. A este proceso se le llama bremsstrahlung bipolar eléctrico.

Si se compara la sección transversal de la producción de bremsstrahlung provenientes de colisiones nucleares con la producción de los electrones secundarios, se encuentra que el bremsstrahlung proveniente del proyectil puede ser despreciable comparado con el de los electrones secundarios, lo cual se observa en la tabla 3.1.

$E/\text{amu}$	$\hbar\omega$	$\frac{d\sigma^{br}}{d(\hbar\omega)d\Omega} \{ \text{barns} / \text{keV} \}$	$\frac{d\sigma^{SEB}}{d(\hbar\omega)d\Omega} \{ \text{barns} / \text{keV} \}$	
(MeV)	(keV)	p(protón)	<sup>3</sup> He	
1.0	100	1.5 × 10 <sup>-2</sup>	0.7 × 10 <sup>-2</sup>	2.9 × 10 <sup>-2</sup>
5.0	500	7.8 × 10 <sup>-3</sup>	0.39 × 10 <sup>-2</sup>	1.5 × 10 <sup>-2</sup>
5.0	500	0.3 × 10 <sup>-2</sup>	0.02 × 10 <sup>-2</sup>	0.3 × 10 <sup>-2</sup>

**TABLA 3.1.** Se muestra la sección transversal para diferentes energías de incidencia de la partícula. La sección transversal producida por el frenamiento de una partícula incidente es muy pequeña en comparación a la sección transversal de los electrones secundarios.

De manera que puede decirse que la verdadera contribución en una colisión se debe a los electrones secundarios de la muestra.

### 3.5) DISTRIBUCIÓN ANGULAR DE SEB

Al agrupar las ecs. (3.3), (3.4) y (3.5) en (3.2) e integrando se puede expresar la sección transversal de la producción de SEB (ec.3.2) por<sup>[24]</sup>:

$$\frac{d\sigma^{seb}}{d(h\omega)d\Omega_L} = \frac{1}{2\pi} Z_p^2 \left(\frac{e^2}{hc}\right)^2 a_0^2 Z_T \frac{m_e c^2}{(h\omega)^2} (C_1 + C_2 \sin^2 \theta_L), \quad (3.6)$$

para lo cual  $a_0$  es el radio de Bohr, siendo los factores  $C_1$  y  $C_2$  funciones dadas como<sup>[17]</sup>

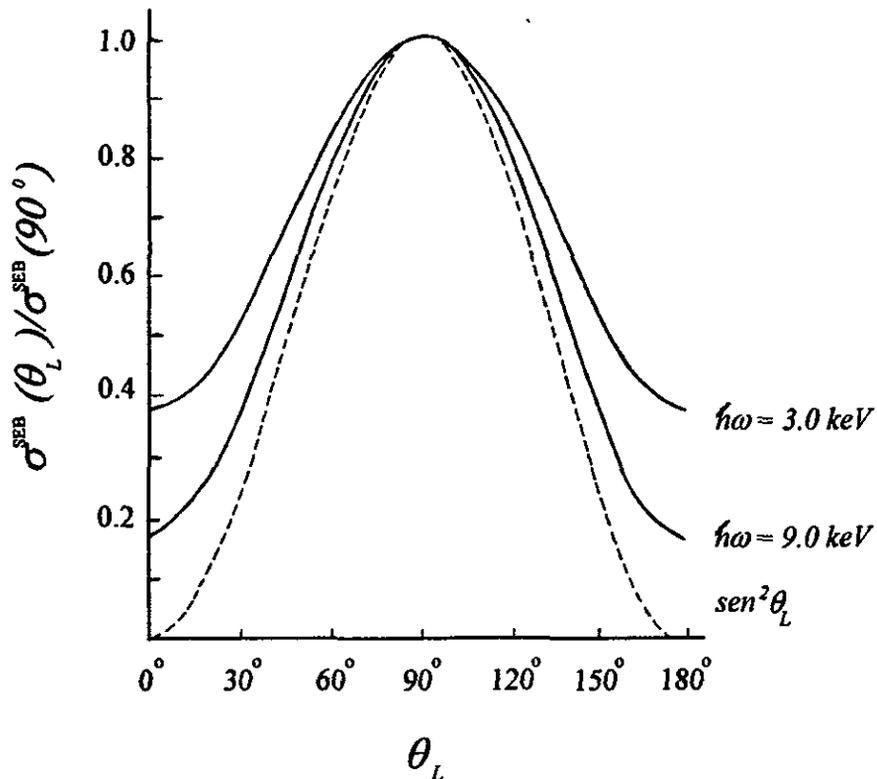
$$C_1 = \int_1^\infty d\left(\frac{E_e}{h\omega}\right) \int_0^\infty f_i(v_2) dv_2 \left(\frac{h\omega}{E}\right)^3 \frac{v_1}{v_2} \times \left[ g_0 \left( \frac{3}{4} f_1 - \frac{1}{4} f_2 + \frac{1}{2} f_3 \right) + g_2 \left( -\frac{1}{4} f_1 + \frac{3}{4} f_2 - \frac{3}{2} f_3 \right) \right],$$

$$C_2 = \int_1^\infty d\left(\frac{E_e}{h\omega}\right) \int_0^\infty f_i(v_2) dv_2 \left(\frac{h\omega}{E}\right)^3 \frac{v_1}{v_2} \times \left[ g_0 \left( -\frac{1}{2} f_1 + \frac{3}{2} f_2 - \frac{3}{4} f_3 \right) + g_2 \left( \frac{3}{4} f_1 - \frac{2}{4} f_2 + \frac{2}{4} f_3 \right) \right]$$

donde  $f_i(v_2)$  es la distribución de velocidad normalizada de los electrones en la capa  $i$ ; los demás parámetros se caracterizan en el apéndice A.

La ec. (3.6) muestra simetría en la distribución angular de SEB alrededor de los  $90^\circ$  debido al término dependiente de la dirección del bremsstrahlung con respecto al proyectil,  $\sin \theta_L$ . Esta distribución resulta de que los electrones secundarios son preferentemente emitidos en la dirección frontal y las radiaciones electromagnéticas sobresalen con mayor intensidad a  $90^\circ$  con respecto a la dirección del electrón secundario<sup>[24]</sup>.

Conforme se acerque la energía del electrón a  $T_m$ , la intensidad en el espectro lo hará a los  $90^\circ$  llegando a ser menor en las direcciones hacia el frente y hacia atrás. Esto muestra que la distribución angular de los electrones expulsados se comporta de la misma forma que la dirección a la cual se está emitiendo bremsstrahlung, es decir, tiene una dirección preferencial<sup>[4]</sup>. Si se calcula la dependencia angular de bremsstrahlung producido por electrones secundarios cuando se bombardea una muestra con protones de 4 MeV de energía, la sección transversal para la producción de bremsstrahlung tienen un máximo para  $\theta_L = 90^\circ$  (ver fig.3.5).



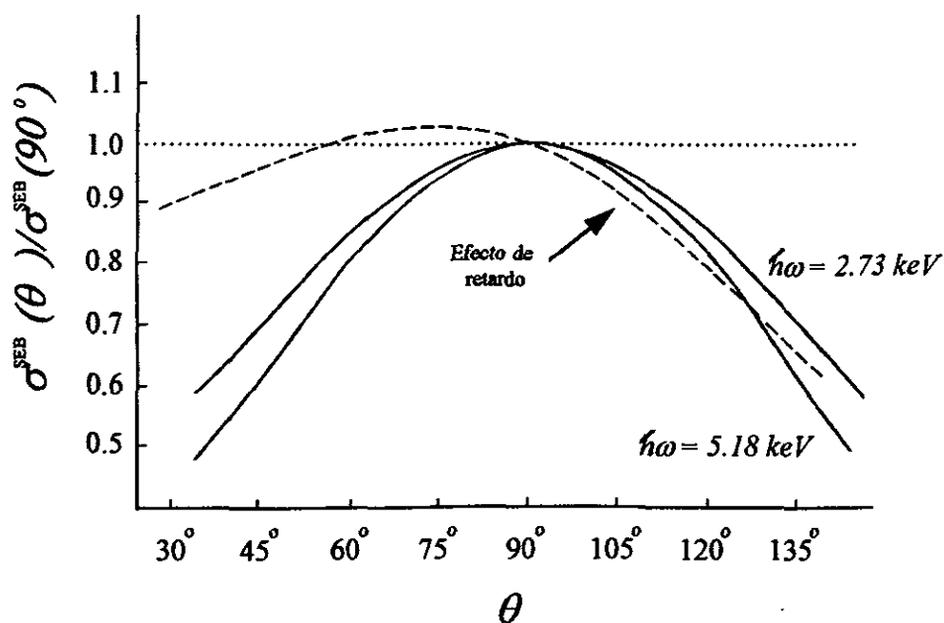
**Fig.3. 5.** Distribución angular del bremsstrahlung producido por electrones secundarios cuando se bombardea un blanco con protones de 4 MeV (dada por Ishii en 1976), ref. 4.

### 3.6) EFECTO DE RETARDO

Si ahora, para calcular la producción de la sección transversal de SEB se toma en cuenta el efecto de retardo relativista en la producción de bremsstrahlung, se tiene que al agregar el factor<sup>[25]</sup>  $\frac{1}{(1 - \beta \cos \theta_{br})^4}$  a la ec.(3.5) la ec.(3.6) es<sup>[24]</sup>:

$$\frac{d\sigma^{seb}}{d(h\nu)d\Omega_L} = C_1 + C_2 \sin^2 \theta_L + \cos \theta_L \times (C_1^R + C_2^R \sin^2 \theta_L). \quad (3.7)$$

Así, el segundo término de la ecuación anterior muestra el efecto de retardo relativista, el cual incrementa el bremsstrahlung en intensidad en la dirección frontal y decrece en la dirección posterior. Debido a que este término depende de la energía cinética del electrón  $E_e$ , la cual emite bremsstrahlung, cada vez que esta energía se incremente afectara la producción de SEB. En la fig.3.6 se compara la distribución angular teórica con los resultados experimentales cuando se bombardea una muestra con protones de 4 MeV de energía, con lo que se observa que la distribución angular de SEB juega un papel importante en la estimación del límite de detección PIXE. También, se muestra en esta figura una distribución anisotrópica del bremsstrahlung alrededor de los  $90^\circ$  y la dirección de mayor intensidad ya no es la misma que cuando no se tomaba en cuenta éste efecto. Esta distribución se debe a que los protones al atravesar una muestra expulsan electrones secundarios.



**Fig. 3.6.** Distribución angular del bremsstrahlung producido por electrones secundarios cuando se bombardea un blanco con protones de 4 Mev tomando en cuenta el efecto de retardo (dada por Ishii en 1990), ref. 24.

# CAPÍTULO IV

## *BREMSSTRAHLUNG ATÓMICO*

En la región de baja energía (ésta se considera del orden desde los 0.5 MeV hasta aproximadamente 1.5 MeV) se presenta un fenómeno intermedio el cual se observa cuando el proyectil expulsa un electrón de una capa interna del blanco y éste brinca a un estado del continuo; al regresar a la posición original emite radiación produciendo bremsstrahlung. Esta radiación es distinta a PIXE, ya que esta corresponde a la emisión de las capas internas entre la capa K y cualquiera de las capas L o M.

Para el cálculo de la sección transversal del bremsstrahlung atómico se toma en consideración la aproximación PWBA, que toma en cuenta a la partícula incidente como un paquete de ondas y es la aproximación que da mejor resultado. También se desarrolla la parte teórica para el cálculo de la sección transversal utilizando la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo.

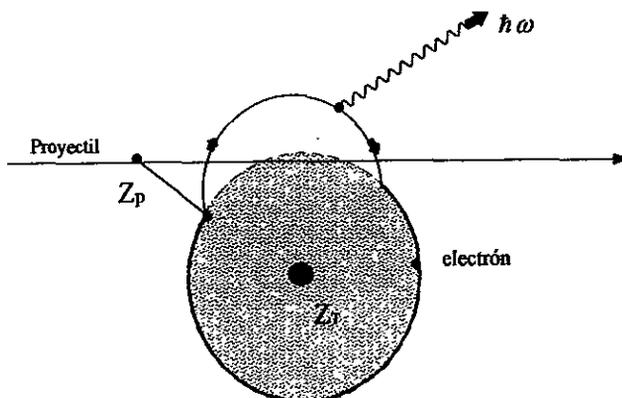
El desarrollo teórico de la sección transversal de AB es muy útil y también se puede utilizar haciendo las correspondientes correcciones para hallar la sección transversal de RI y QFEB, aunque este último se refiere a un proyectil acelerado alta energía mayor a 10 MeV.

### **4.1) BREMSSTRAHLUNG ATÓMICO ( AB )**

Se ha calculado<sup>[23]</sup> que la sección transversal de producción de bremsstrahlung atómico proviene de la estructura atómica de la muestra bombardeada, nombrándole bremsstrahlung atómico (AB). Dicha situación se presenta cuando la muestra se impacta con electrones, protones o iones. Se halló que el AB es la componente que más predomina en la

región de rayos X con energía de  $\hbar\omega \geq T_m$ ; de esta forma se considera la sección transversal de producción de AB para los rayos X de energía cercana al potencial de ionización.

AB es el segundo proceso en importancia para la producción de rayos X en colisiones de iones ligeros a bajas energías<sup>[24]</sup> (QFEB es el de mayor importancia, pero éste se caracteriza en iones a altas energías). En este proceso el proyectil penetra en el blanco y uno de los electrones de la capa interna del átomo bombardeado se excita a un estado continuo, poco después éste regresa a su estado amarrado inicial, emitiendo un fotón (bremsstrahlung) de espectro continuo, esta radiación es característica de la estructura interna del átomo bombardeado (fig.4.1). En este caso la función de onda del estado final del electrón es igual a la del estado inicial,  $|\Psi_f\rangle = |\Psi_i\rangle$ . Si en lugar de ello, el estado final no es un estado ligado sino un estado continuo, entonces en el proceso se produce una ionización acompañada por la emisión de un fotón nombrándole ionización radiactiva<sup>[5]</sup> (RI).



*Fig.4.1. El proyectil al impactarse con un átomo expulsa un electrón al continuo, de manera que éste al regresar al estado inicial emite radiación característica, llamado bremsstrahlung atómico..*

## 4.2) MATRIZ DE TRANSICIÓN

Antes de hablar más formalmente de la sección transversal de AB, se analizará la base teórica sobre la cual está fundamentado el cálculo de la sección transversal. Existen dos aproximaciones para el problema de dispersión en la mecánica cuántica, en la medida que se consideran las teorías dependientes e independientes del tiempo.

En la teoría independiente del tiempo, se considera que un haz monoenergético de partículas de flujo constante penetra en una región de dispersión conteniendo uno o más centros dispersores; esta descripción puede ser estacionaria. En la aproximación dependiente del tiempo se efectúa una variación de la energía total y el sistema no se puede describir estacionariamente<sup>[19]</sup>.

En este proceso, cualquier colisión puede ser visualizada en términos de tres intervalos de tiempo:

- 1<sup>o</sup>) el proyectil y el blanco se preparan con ciertos estados iniciales,
- 2<sup>do</sup>) durante este intervalo la interacción toma lugar,
- 3<sup>ro</sup>) los productos de la interacción se observan por algunos dispositivos de medición.

Para el intervalo primario, la preparación de los estados iniciales se refiere a asignarle un paquete de onda para a el blanco y otro para el proyectil. La interacción del blanco y el proyectil alteran la distribuciones de momentos en los paquetes de onda, por lo que en un problema de dispersión en paquete inicial se prepara al tiempo  $t = -\infty$  y la detección ocurre al tiempo  $t = +\infty$ .

La ecuación de movimiento se representa en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo como

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(t), \quad (4.1)$$

si  $\hat{H}$  se refiere al Hamiltoniano del sistema, de manera que la solución de la ecuación anterior se representa tomando en cuenta que el estado del sistema para un tiempo en particular es la función de onda  $\Psi(t_0)$ , la solución general es

$$\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}\Psi(t_0). \quad (4.2)$$

Si el Hamiltoniano del sistema se puede expresar como  $H = H_0 + V$  donde  $H_0$  denota la parte no perturbada y  $V$  la parte perturbadora y, además, se supone que se conocen los eigenvalores y eigenfunciones de la parte no perturbada  $H_0$ , se define la función en términos de la ec. (4.2) como

$$\Psi_1(t) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \Psi(t), \quad (4.3)$$

y sustituyendo en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, ec. (4.1), se tiene:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi_1(t)}{\partial t} &= i\hbar \left( i \frac{H_0}{\hbar} \Psi(t) + \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} \right) e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \\ &= e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} (-H_0 + H) \Psi(t) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} V \Psi(t), \end{aligned} \quad (4.4)$$

donde  $V$  es la parte perturbada del hamiltoniano  $H$ . Sustituyendo la ec. (4.3) en la ec. (4.4) la expresión final queda en términos de  $\Psi_1$ ,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_1(t)}{\partial t} = V(t) \Psi_1(t), \quad (4.5)$$

donde  $V(t) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} V e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}$ . De la misma forma, utilizando las ecs. 4.2 y 4.3 se determina para  $\Psi_1(t)$  su evaluación en el tiempo, a partir de  $\Psi_1(t_0)$  como

$$\Psi_1(t) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)} \Psi(t_0) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)} e^{-\frac{iH_0 t_0}{\hbar}} \Psi_1(t_0), \quad (4.6)$$

si se define el operador

$$U(t, t_0) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)} e^{-\frac{iH_0 t_0}{\hbar}}, \quad (4.7)$$

la función  $\Psi_1(t)$  se representa ahora por

$$\Psi_i(t) = U(t, t_0)\Psi_i(t_0). \quad (4.8)$$

De manera, que la superposición de los eigenestados de la parte no perturbada  $H_0$  representa el estado final del sistema  $\Psi_i(+\infty)$  mientras que el estado inicial  $\Psi_i(-\infty) = \psi_i$ , donde  $\psi_i$  es una eigenfunción de  $H_0$ , por lo que la ec. (4.8) se puede expresar como  $\Psi_i(+\infty) = S\Psi_i(-\infty)$ , así, la amplitud de transición de un estado inicial  $\psi_i$  a un estado final  $\psi_f$  es

$$S_f = \langle \psi_f | S | \psi_i \rangle, \quad (4.9)$$

donde  $S$  representa al operador de transición del estado inicial al final para  $t = \pm\infty$  en el sistema dado

$$S \equiv \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t \rightarrow +\infty}} U(t, t_0), \quad (4.10)$$

nótese que:

$$U^*(t, t_0) = U(t_0, t), \quad (4.11)$$

$$U(t, t')U(t', t_0) = U(t, t_0),$$

la ec. (4.9) se denomina como la *matriz de dispersión* y debido a la ec. (4.10)

$$S_f = \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t \rightarrow +\infty}} \langle U(0, t)\psi_f | U(0, t)\psi_i \rangle. \quad (4.12)$$

En el análisis de los límites para  $t \rightarrow \pm\infty$  de la ec. (4.12), considérese los límites de una función  $f(t)$  definida con  $\varepsilon > 0$  como<sup>[19]</sup>

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} f(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \varepsilon \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon t'} f(t') dt', \quad (4.13)$$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} f(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \varepsilon \int_0^{\infty} e^{\varepsilon t'} f(t') dt', \quad (4.14)$$

integrando por partes el miembro derecho de la ec. (4.13) para demostrar las identidades

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \varepsilon \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon t'} f(t') dt' &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \varepsilon \left[ \frac{e^{\varepsilon t'}}{\varepsilon} f(t') \Big|_{-\infty}^0 - \frac{1}{\varepsilon} \int_{-\infty}^0 f'(t') e^{\varepsilon t'} dt' \right] \\ &= f(0) - \int_{-\infty}^0 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{df(t')}{dt'} e^{\varepsilon t'} dt' \\ &= f(0) - \int_{-\infty}^0 \frac{df(t')}{dt'} dt', \\ &= \lim_{t \rightarrow -\infty} f(t), \end{aligned} \quad (4.15)$$

donde se ha utilizado el límite de  $f(t)$ ; siguiendo los mismos pasos también se obtiene la ec. (4.14).

Si  $f(t) = U(0, t)$ , la ec. (4.13) se define como el operador de Møller  $\Omega^*$  y aplicando éste a una eigenfunción arbitraria continua  $\psi_a$ , cuyo eigenvalor es  $E_a$  se tiene

$$\begin{aligned} \Omega^* \psi_a &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} U(0, t) \psi_a = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \varepsilon \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon t'} U(0, t') \psi_a dt' \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \varepsilon \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon t'} e^{i \frac{E_a}{\hbar} t'} e^{-i \frac{E_a}{\hbar} t'} \psi_a dt'; \end{aligned} \quad (4.16)$$

al integrar para  $\hbar = 1$  la ec. (4.16) queda:

$$\Omega^* \psi_a = \lim_{t \rightarrow -\infty} U(0, t) \psi_a; \quad (4.16.a)$$

ahora igualando con la ec. (4.15)

$$\begin{aligned}
\Omega^+ \psi_a &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^0 e^{i(H-E_a-i\varepsilon)t'} \psi_a dt' \\
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\varepsilon}{\varepsilon + i(H-E_a)} e^{a'} e^{iHt'} e^{-iE_a t'} \psi_a \Big|_{-\infty}^0 \\
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{i\varepsilon}{E_a - H + i\varepsilon} \psi_a, \tag{4.17}
\end{aligned}$$

debido a que  $H_0 \psi_a = E_a \psi_a$ , entonces  $(E_a - H_0) \psi_a = 0$  y la ec. (4.17) se escribe tomando en cuenta  $H = H_0 + V$  como

$$\begin{aligned}
\Omega^+ \psi_a &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{i\varepsilon + (E_a - H_0)}{E_a - H + i\varepsilon} \psi_a \\
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{i\varepsilon + E_a + V - H}{E_a - H + i\varepsilon} \psi_a; \tag{4.17.a}
\end{aligned}$$

es decir, agrupando

$$\begin{aligned}
\Omega^+ \psi_a &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{i\varepsilon + E_a - H}{E_a - H + i\varepsilon} \psi_a + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{V}{E_a - H + i\varepsilon} \psi_a \\
&= \psi_a + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{V}{E_a - H + i\varepsilon} \psi_a = \Psi_a^+. \tag{4.18}
\end{aligned}$$

Lo mismo se hace para el otro operador de Møller  $\Omega^-$ ,  $\Psi_a^- = \Omega^- \psi_a$ ; con lo que en general se define (ver apéndice D):

$$\begin{aligned}
\Psi_a^\pm &= \psi_a + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{V}{E_a - H \pm i\varepsilon} \psi_a \\
&= \psi_a + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{V}{E_a - H_0 \pm i\varepsilon} \Psi_a^\pm, \tag{4.19}
\end{aligned}$$

utilizando las ecs. (4.16) y (4.18) en la ec. 4.12, se calcula la matriz de dispersión en términos de eigenfunciones continuas del Hamiltoniano del sistema  $H$  con energía  $E_a$  que satisfacen las condiciones de frontera<sup>[19]</sup>

$$S_{ij} = \langle \Psi_j^- | \Psi_i^+ \rangle, \quad (4.20)$$

como  $\Psi_j^- = \Psi_j^+ + \Psi_j^- - \Psi_j^+$  entonces sustituyendo en la ecuación anterior

$$S_{ij} = \langle \Psi_j^+ | \Psi_i^+ \rangle + \langle \Psi_j^- - \Psi_j^+ | \Psi_i^+ \rangle, \quad (4.21)$$

con la ayuda de la primera relación de (4.19) para  $\psi_j$  se expresan

$$\Psi_j^+ = \psi_j + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{V}{E_j - H + i\varepsilon} \psi_j \quad (4.21.a)$$

$$\Psi_j^- = \psi_j + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{V}{E_j - H - i\varepsilon} \psi_j, \quad (4.21.b)$$

de modo que al restar la ec.(4.21.a) y la ec.(4.21.b) se tiene

$$\Psi_j^- - \Psi_j^+ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{2i\varepsilon}{(E_j - E_i)^2 + \varepsilon^2} V \psi_j;$$

sustituyendo en (4.21) y tomando en cuenta que las eigenfunciones son normalizadas, se tiene que  $\langle \Psi_j^+ | \Psi_j^+ \rangle = \delta_j$  donde  $\delta_j$  es una delta de Dirac para las energías continuas y delta de Kronecker para otros números cuánticos. De modo que los elementos de la matriz de dispersión son

$$S_{ij} = \delta_{ij} - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{2i\varepsilon}{(E_j - E_i)^2 + \varepsilon^2} \langle \psi_j | V | \Psi_i^+ \rangle, \quad (4.22)$$

debido a que en el limite cuando  $\varepsilon \rightarrow 0$ , el primer factor del segundo término es la delta de Dirac<sup>[7]</sup>

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{(E_f - E_i)^2 + \varepsilon^2} = \pi \delta(E_f - E_i),$$

por lo que finalmente, los elementos de matriz quedan en el límite cuando  $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} S_{ij} &= \delta_{ij} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle \psi_f | V | \Psi_i \rangle \\ &= \delta_{ij} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) T_{ij}; \end{aligned} \quad (4.23)$$

ahora con lo anterior se puede calcular la probabilidad de transición del estado  $i$  al estado  $f$  como  $|S_{ij}|^2$ ; sin embargo cuando se toma en cuenta que la duración de tiempo de interacción es finito, la probabilidad de transición por unidad de tiempo es físicamente significativa y está dada como<sup>[19]</sup>

$$W_{ij} = \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \frac{\partial}{\partial t} \left| \langle \psi_f | U(t, t_0) | \psi_i \rangle \right|^2,$$

de acuerdo a la ec.(4.8)

$$= \frac{d}{dt} \left| \langle \psi_f | \Psi_1(t) \rangle \right|^2; \quad (4.24)$$

como  $\left| \langle \psi_f | \Psi_1 \rangle \right|^2 = \langle \psi_f | \Psi_1 \rangle^* \langle \psi_f | \Psi_1 \rangle$ , al desarrollar la derivada en ecuación se obtiene

$$\begin{aligned} W_{ij} &= \left\langle \psi_f \left| \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1(t) \right. \right\rangle^* \langle \psi_f | \Psi_1(t) \rangle + \langle \psi_f | \Psi_1 \rangle^* \left\langle \psi_f \left| \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1(t) \right. \right\rangle \\ &= \left\langle \psi_f \left| \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1(t) \right. \right\rangle^* \langle \psi_f | \Psi_1(t) \rangle + c.c., \end{aligned} \quad (4.25)$$

utilizando la ecuación de Schrödinger dada por la expresión (4.5), resulta para el primer factor del primer término de la ec.(4.25) se tiene:

$$\left\langle \psi_f \left| \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1(t) \right. \right\rangle = -i \left\langle \psi_f \left| e^{H_0 t} V e^{-H_0 t} \Psi_1(t) \right. \right\rangle, \quad (4.26)$$

dado que  $\Psi_1(t_0 = 0) = \Psi_1^*$  y ayudándose de las ecs. (4.7) y (4.8), se representa a la ec. (4.26) como

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_f \left| \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1(t) \right. \right\rangle &= -i \left\langle \psi_f \left| e^{H_0 t} V e^{-H_0 t} U(t, t_0 = 0) \Psi_1(t_0 = 0) \right. \right\rangle \\ &= -i \left\langle \psi_f \left| e^{H_0 t} V e^{-H_0 t} e^{H_0 t} e^{-iHt} \Psi_1^* \right. \right\rangle \\ &= -i \left\langle \psi_f \left| e^{H_0 t} V e^{-iHt} \Psi_1^* \right. \right\rangle; \end{aligned} \quad (4.27)$$

al sustituir los operadores Hamiltonianos por sus respectivos eigenvalores, por ser  $\Psi_1^*$  eigenfunción de  $H$  y  $H_0$ :

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_f \left| \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1(t) \right. \right\rangle &= -ie^{i(E_f - E_i)t} \left\langle \psi_f \left| V \right| \Psi_1^* \right\rangle \\ &= -ie^{i(E_f - E_i)t} T_{fj}, \end{aligned} \quad (4.28)$$

donde  $\left\langle \psi_f \left| V \right| \Psi_1^* \right\rangle = T_{fj}$  es la matriz de transición.

Para el segundo factor del primer término de la ec.(4.25), se obtienen las ecs (4.7) y (4.8)

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_f \left| \Psi_1(t) \right. \right\rangle &= \left\langle \psi_f \left| U(t, t_0 = 0) \Psi_1(t_0 = 0) \right. \right\rangle \\ &= \left\langle \psi_f \left| e^{H_0 t} e^{-iHt} \Psi_1^* \right. \right\rangle, \end{aligned} \quad (4.29)$$

donde  $\Psi_i^*$  es eigenfunción de  $H$  y  $H_0$ , y si se toma en cuenta la segunda ec. de (4.19); la relación anterior se puede reescribir, y después de sustituir los eigenvalores en los exponenciales y en el denominador de la ec.(4.19):

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | \Psi_i(t) \rangle &= e^{i(E_f - E_i)t} \left\langle \psi_f \left| \psi_i + \frac{V}{E_i - E_f + i\varepsilon} \Psi_i^* \right. \right\rangle \\ &= e^{i(E_f - E_i)t} \left[ \langle \psi_f | \psi_i \rangle + \frac{1}{E_i - E_f + i\varepsilon} \langle \psi_f | V \Psi_i^* \rangle \right], \end{aligned} \quad (4.29.a)$$

y nuevamente por la ortogonalidad de la función

$$\langle \psi_f | \Psi_i(t) \rangle = e^{i(E_f - E_i)t} \left[ \delta_{if} + \frac{1}{E_i - E_f + i\varepsilon} T_{if}^* \right], \quad (4.30)$$

por lo tanto, la probabilidad de transición por unidad de tiempo se considera al sustituir la ec.(4.28) y la ec.(4.30), y evaluar la c.c. directamente como

$$W_{if} = iT_{if}^* \left\{ \delta_{if} + \frac{T_{if}}{E_i - E_f + i\varepsilon} \right\} - iT_{if} \left\{ \delta_{if} + \frac{T_{if}^*}{E_i - E_f - i\varepsilon} \right\};$$

tomando el límite

$$W_{if} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left\{ i(T_{if}^* - T_{if})\delta_{if} + \frac{2\varepsilon}{(E_i - E_f)^2 + \varepsilon^2} |T_{if}|^2 \right\},$$

y nuevamente con la definición de la delta de Dirac  $\delta(E_i - E_f)$

$$W_{if} = 2\text{Im} T_{if} \delta_{if} + 2\pi \delta(E_i - E_f) |T_{if}|^2. \quad (4.31)$$

Después de hallar la probabilidad de transición por unidad de tiempo entre un estado inicial y un estado final, considérese una colisión entre sistemas atómicos cuyo Hamiltoniano del sistema está formado por con una aproximación más generalizada basada en la teoría de perturbaciones, denotando los Hamiltonianos inicial  $H_i$  y final  $H_f$  de la parte no perturbada y con la perturbada  $(V_i, V_f)$ , respectivamente

Al evaluar  $S_{ij}$  como  $S_{ij} = \langle \Psi_f^- | \Psi_i^+ \rangle$ , y ahora con  $\Psi_i^+ = \Psi_i^- + \Psi_i^+ - \Psi_i^-$ , de manera que  $S_{ij} = \langle \Psi_f^- | \Psi_i^- \rangle + \langle \Psi_f^- | \Psi_i^+ - \Psi_i^- \rangle$ ; los elementos de la matriz de transición  $T_{ij}$  son

$$T_{ij} = \langle \Psi_f^- | V_f | \psi_i \rangle,$$

como  $\Psi_f^- = \psi_f + \frac{V_i}{E_f - H - i\epsilon} \psi_f$  y al tomar la c.c., finalmente queda<sup>[19]</sup>

$$T_{ij} = \langle \psi_f | V_f | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V_f \frac{1}{E - H + i\epsilon} V_i | \psi_i \rangle. \quad (4.32)$$

### 4.3) MATRIZ DE TRANSICIÓN PARA UN SISTEMA DE PARTÍCULAS

Antes de calcular la sección transversal de AB, considérese un sistema de un ion sencillo y un átomo, los cuales interactúan en presencia de un campo de radiación electromagnético<sup>[5]</sup>. Un campo de radiación puede ser formado por la superposición de ondas transversales, de tal forma que pueda ser derivado por un potencial vectorial magnético, el cual se representa por una serie de ondas planas<sup>[19]</sup>.

El Hamiltoniano que describe el movimiento del centro de masa y el movimiento relativo de las partículas, puede ser expresado en forma no relativista como<sup>[24]</sup>:

$$H_{tot} = \frac{P_c^2}{2M} + H_0 + H_R + V_c + V_R, \quad (4.33)$$

donde  $P_c$  se considera el momento del centro de masa, y  $M$  la masa total del sistema dada como:

$$M = m_T + m_p + Nm_e \quad (4.34)$$

siendo  $m_T$ ,  $m_p$  y  $Nm_e$ , la masa del blanco, la masa del proyectil y la cantidad total de electrones en el sistema. De la misma forma,  $H_0$  es el Hamiltoniano del sistema proyectil-blanco<sup>[5]</sup>

$$H_0 = \frac{m_p + m_T}{2m_p m_T} P^2 + \frac{1}{m_T} \left( \sum_{k=1}^N \vec{P}_k \right) \cdot \vec{P} + H_{atomo}, \quad (4.35)$$

para

$$H_{atomo} = \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1}^N P_i^2 + \frac{1}{2m_T} \left( \sum_{k=1}^N \vec{P}_k \right)^2 - \sum_{i=1}^N \frac{Z_T e^2}{r_i} + \sum_{i=1}^N \sum_{i>j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad (4.36)$$

que incluyen el movimiento de los electrones e interacciones coulombianas. Por último,  $V_c$  y  $V_R$  representan (Apendice B), respectivamente el potencial electrostático entre el proyectil y

el blanco con respecto al centro de masa del sistema y el potencial debido al campo de radiación, mientras que  $H_R$  corresponde al Hamiltoniano del mismo campo<sup>[5]</sup>.

Si se considera que el hamiltoniano  $H_o$  tiene como eigenfunción  $\Psi_i$  (eigenfunción del estado inicial del sistema proyectil-blanco) expresada<sup>[5]</sup> como

$$\Psi_i = \exp\left\{i\vec{k} \cdot \left(\vec{r}_p - \frac{m_e}{m_p + Nm_e} \sum_{k=1}^N \vec{r}_k\right)\right\} \psi_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N), \quad (4.37)$$

de tal forma que  $\Psi_i$  y  $\psi_i$  se consideran las respectivas eigenfunciones asociadas con sus respectivos eigenvalores, por lo cual, utilizando la condiciones de la sección 4.2 se escriben la ecuación de los núcleos del proyectil y el blanco, que satisfacen

$$H_o \Psi_i = \left[ \frac{M\hbar^2}{2m_p(m_p + Nm_e)} \nabla_i^2 + \varepsilon_i \right] \Psi_i, \quad (4.38)$$

donde  $\varepsilon_i$  satisface la ecuación de Schrödinger para todos los electrones

$$H_A \psi_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N), \quad (4.39)$$

siendo  $H_A$  el Hamiltoniano de los electrones bombardeados<sup>[5]</sup> (Apéndice B). Sustituyendo ahora los eigenvalores y operadores correspondientes al Hamiltoniano del sistema en la ec. (4.32), el cual, como en la sección anterior, se considera una parte perturbada y una no perturbada de tal forma que los elementos de la matriz de transición considerados en la sección.4.2 se reescriben de acuerdo a la ec. (4.32) para  $V_i = V_f$  como

$$T_{if} = \langle \Psi_f | (V_c + V_R) | \Psi_i \rangle + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left\langle \Psi_f \left| (V_c + V_R) \frac{1}{E_i - (H_o + H_R) + i\varepsilon} (V_c + V_R) \right| \Psi_i \right\rangle + \dots \quad (4.40)$$

esta ecuación es una buena aproximación cuando se impactan iones ligeros ( $Z_T \gg Z_p$ ).

Al calcular el  $T_f$  para la emisión de un fotón, de la ec. (4.40) el primer término se considera nulo, debido a que físicamente no se toma en cuenta la transición de un electrón del blanco al sistema del proyectil<sup>(5)</sup>.

Si la longitud de onda del fotón emitido es grande en comparación con el radio de la región de colisión y del átomo bombardeado se puede aplicar la aproximación bipolar. La cual considera que  $qc \gg \omega$  y  $Z_T R_p \gg \alpha \hbar \omega$ , donde  $\hbar \omega$  es la energía del fotón emitido,  $\hbar q$  es el momento transferido del proyectil,  $\alpha$  es la constante de estructura fina y  $R_p$  la constante de Rydberg. De esta manera,  $T_f$  de la ec.(4.40) toma la forma

$$\begin{aligned}
 T_f = & \frac{4\pi}{q^2} \left( \frac{2\pi\hbar}{\omega} \right)^{1/2} \frac{Z_p e^3}{\hbar\omega} \left\{ \hbar(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{q}) \left[ \frac{Z_p}{m_p} - \frac{Z_T}{m_T} \left( 1 + \frac{Nm_e}{m_T + Nm_e} \right) \right] \langle \psi_f | f(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) | \psi_N \rangle + \right. \\
 & - \hbar(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{q}) \left( \frac{1}{m_e} + \frac{Z_T}{m_T} \right) \langle \psi_f | \sum_{i=1}^N e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} e^{-i \frac{m_e}{m_T + Nm_e} \vec{q} \cdot \sum_{i=1}^N \vec{r}_i} | \psi_i \rangle + \\
 & - \left( \frac{1}{m_e} + \frac{Z_T}{m_T} \right) \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \sum_m \frac{\langle \psi_f | f(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \left( H_0, \vec{\varepsilon} \cdot \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) | \psi_i \rangle}{\varepsilon_i - \varepsilon_m - \hbar\omega + i\varepsilon} + \\
 & \left. + \sum_m \frac{\langle \psi_f | H_0, \vec{\varepsilon} \cdot \sum_{i=1}^N \vec{p}_i | \psi_m \rangle \langle \psi_m | f(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) | \psi_i \rangle}{\varepsilon_f + \hbar\omega - \varepsilon_m + i\varepsilon} \right\}, \tag{4.41}
 \end{aligned}$$

donde  $f(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \left( Z_T - \sum_{i=1}^N e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \right) e^{-i\frac{m_e}{m_T + Nm_e}\vec{q}\cdot\sum_{i=1}^N \vec{r}_i}$ . El primer término de la ec. (4.41) se refiere al bremsstrahlung nuclear mientras que el segundo y tercer término corresponden a la contribución de los electrones del blanco.

Al considerarse el caso cuando el potencial es constante, el electrón se considera casi libre debido a  $\left( H_0, \vec{\varepsilon} \cdot \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) \approx 0$ , por lo que el tercer término de la ec. (4.41) se desprecia. Pero si la transferencia de momento  $q$  es grande, el tercer término no puede despreciarse si dicha condición es tal que  $\frac{m_T}{m_e} \gg qa$ , por lo que en tal situación los elementos de la matriz de transición<sup>[5]</sup>, de acuerdo a la ec. (4.41), son:

$$T_{if} = \frac{4\pi}{m_e q^2} \left( \frac{2\pi\hbar}{\omega} \right)^{1/2} \frac{Z_p e^3}{\omega} \left\{ (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{q}) \left\langle \psi_f \left| \sum_{i=1}^N e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \right| \psi_i \right\rangle - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left[ \sum_m \frac{\left\langle \psi_f \left| \sum_{i=1}^N e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \right| \psi_m \right\rangle \left\langle \psi_m \left| i \sum_{k=1}^N \vec{\varepsilon} \cdot \vec{\nabla}_k U(\vec{r}_k) \right| \psi_i \right\rangle}{\varepsilon_i - \varepsilon_m - \hbar\omega + i\varepsilon} \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_m \frac{\left\langle \psi_f \left| i \sum_{k=1}^N \vec{\varepsilon} \cdot \vec{\nabla}_k U(\vec{r}_k) \right| \psi_m \right\rangle \left\langle \psi_m \left| \sum_{i=1}^N e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \right| \psi_i \right\rangle}{\varepsilon_f - \varepsilon_m + \hbar\omega + i\varepsilon} \right] \right\}, \quad (4.42)$$

esta ecuación se considera la amplitud del AB cuando el estado final del electrón del átomo bombardeado es el mismo que el estado inicial, de manera que utilizando la ec. (4.42) se pueden calcular las secciones transversales producidas por el impacto de iones ligeros de AB y RI de acuerdo a la ec. (4.31) y al siguiente apartado.

#### 4.4) SECCIÓN TRANSVERSAL

Tomándose en cuenta que se conocen los elementos de la matriz de transición de la sección 4.3, se puede calcular a continuación la sección transversal total para un sistema de partículas en términos de estos elementos.

Se considera la densidad de estados centrados en  $E = E_f$  como  $\rho(E)$  por unidad de ángulo sólido  $d\Omega$  y por unidad de energía  $dE$ , con energías en el intervalo  $(E, E + dE)$ , de manera, que el número de estados tomado en un intervalo de ángulo sólido con un incremento de energía es  $\rho(E)dEd\Omega$ .

La probabilidad de transición para grupo de estados centrados desvanecen la singularidad presentada por la delta de Dirac de la ec. (4.31) para un estado continuo específico; entonces si el estado  $\psi_i$  no pertenece a un grupo de los estados finales, la probabilidad total de transición por unidad de tiempo de  $\psi_i$  considerando que el estado final es el mismo que el inicial en el intervalo  $2\Delta E$  de energía<sup>19)</sup>

$$\kappa_{if} = \int_{E^-}^{E^+} W_{if} \rho(E) dEd\Omega = 2\pi \rho(E_f) |T_{if}|^2 d\Omega \quad (4.43)$$

donde  $E^\pm = E_f \pm \Delta E$ .

Ahora, se analiza un sistema de partículas contenidas en un cubo en cuyos extremos la función de onda que describe a éstas se anula y en el interior se considera periódica por lo que cada lado de la caja se puede considerar como múltiplo entero de longitudes de onda, con la cual se desplaza la partícula. Por consiguiente, las componentes del vector de propagación tridimensional se denotan como<sup>15)</sup>  $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z) = \frac{2\pi}{L} (N_x, N_y, N_z)$ , por lo tanto, el número de estados con momento en el rango de  $(\vec{k}, \vec{k} + d\vec{k})$  es  $\frac{d\vec{k}}{(L/2\pi)^3}$ , y el número de estados por unidad de volumen en el mismo intervalo es<sup>19)</sup>

$$\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} = \frac{k^2}{(2\pi)^3} d\Omega dk = \rho(E) dEd\Omega, \quad (4.44)$$

y se toma en cuenta la energía para un sistema de partículas libres en la caja,  $E = k^2/2\mu$ , donde  $\mu$  es la masa reducida del sistema, a manera que derivando  $E$  con respecto a  $k$  e introduciendo en la ec. (4.44) se obtiene la densidad de estados  $\rho(E) = \frac{\mu k}{8\pi^3}$ ; al aplicar esta expresión en la ec. (4.43) da como resultado

$$\kappa_{if} = \frac{\mu k_f}{4\pi^2} |T_{if}|^2 d\Omega, \quad (4.45)$$

donde  $k_f$  es el momento relativo final. Por lo tanto, esta ecuación se considera la probabilidad total de transición por unidad de tiempo de los estados  $\psi_i$ .

#### 4.5) SECCIÓN TRANSVERSAL DE AB

Al calcular los elementos de matriz  $T_{if}$ , se considera que las funciones de onda cumplen con la condición que el estado inicial es igual al final  $|\psi_i\rangle = |\psi_f\rangle$ , de manera que se puede calcular el primer término de la ec. (4.42) utilizando la función de onda hidrogenoide  $\chi_{nlm}$  donde  $n, l, m$  son los números cuánticos principal, azimutal y magnético. Con esto, el primer término se puede representar por<sup>[5]</sup>

$$\begin{aligned} F(\vec{q}) &= -\frac{4\pi}{m_e q^2} \left( \frac{2\pi\hbar}{\omega} \right)^{1/2} \frac{Z_p e^3}{\omega} (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{q}) \left[ 2 \sum_{n,l,m} \langle \chi_{nlm} | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \chi_{nlm} \rangle \right] \\ &= -\frac{8\pi}{m_e q^2} \left( \frac{2\pi\hbar}{\omega} \right)^{1/2} \frac{Z_p e^3}{\omega} (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{q}) S_1(q), \end{aligned} \quad (4.46)$$

donde para una gran transferencia de momento  $S_1(q)$  se denota aproximadamente como

$$S_1(q) \approx 16 \left( \frac{2m_e R_y}{\hbar^2 q^2} \right)^2 \left( Z_1^2 + \frac{Z_2^2}{2^3} + \frac{Z_3^2}{3^3} + \dots \right), \quad (4.47)$$

para la carga nuclear efectiva  $Z_n$ . De la misma forma, se calcula el segundo término de la ec.

(4.42) tomando en cuenta que  $\bar{\nabla}U(\vec{r}) = Z_n e^2 \frac{\vec{r}}{r^3}$ , entonces

$$F_2(\vec{q}) = \frac{8\pi}{m_e q^2} \left( \frac{2\pi\hbar}{\omega} \right)^{1/2} \frac{Z_p e^3}{\omega} \times \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[ \sum_{n,l,mn',l',m'} \sum_{n',l',m'} \frac{iZ_n e^2 \langle \chi_{nlm} | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \chi_{n'l'm'} \rangle \left\langle \chi_{n'l'm'} \left| \frac{\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r}}{r^3} \right| \chi_{nlm} \right\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'} - \hbar\omega + i\varepsilon} \right. \\ \left. + \sum_{n,l,mn',l',m'} \frac{iZ_n e^2 \left\langle \chi_{nlm} \left| \frac{\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r}}{r^3} \right| \chi_{n'l'm'} \right\rangle \langle \chi_{n'l'm'} | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \chi_{nlm} \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'} + \hbar\omega + i\varepsilon} \right]; \quad (4.48)$$

de tal forma que se determina como solución la función de onda del estado intermedio  $|\chi_{n'l'm'}\rangle$  para el potencial efectivo utilizado también por la función  $|\chi_{nlm}\rangle$ . Con esto, el primer término de la ec. (4.51) se expresa<sup>[5]</sup>

$$\sum_m \sum_{l',m'} \langle \chi_{nlm} | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \chi_{n'l'm'} \rangle \left\langle \chi_{n'l'm'} \left| \frac{\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r}}{r^3} \right| \chi_{nlm} \right\rangle = i \sum_{l'} \frac{(2l+1)(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{q})}{q} \left( \frac{Z_n}{a_0} \right)^2 S_{n,l;l',l'}(q), \quad (4.49)$$

donde el factor  $S_{n,l;l',l'}(q)$  está asociado con funciones de Bessel esféricas (ver apéndice D) entonces al desarrollarse y sustituirse en el término  $F_2(q)$ , éste se reescribe como<sup>[5]</sup>

$$F_2(\vec{q}) = \frac{8\pi}{m_e q^2} \left( \frac{2\pi\hbar}{\omega} \right)^{1/2} \frac{Z_p e^3}{\omega} (\vec{\varepsilon}\cdot\vec{q}) S_2(q), \quad (4.50)$$

para

$$S_2(q) = \sum_n \sum_i \frac{Z_n^3 e^2 (2l+1)}{q a_0^2} \left\{ \sum_{n'} \sum_{l'} \frac{2(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)}{(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)^2 - (\hbar\omega)^2} S_{n',l',l'}(q) + \int dk \frac{2(k^2 T_n - \varepsilon_n)}{(k^2 T_n - \varepsilon_n)^2 - (\hbar\omega)^2} S_{n,l;k,l'}(q) \right. \\ \left. + i\pi \frac{1}{T_n} \sum_{l'} \frac{S_{n,l;k,l'}(q)}{2k} \right\},$$

donde  $T_n = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{Z_n}{a_0} \right)^2$  y  $k = \sqrt{\frac{\hbar\omega + \varepsilon_n}{T_n}}$ . Por lo tanto, debido al desarrollo del último término de  $T_{l'}$ , se puede ahora calcular la ec. (4.48) que es la sección transversal de la producción de bremsstrahlung atómico y se expresa por la siguiente relación

$$\frac{d\sigma^{AB}}{d(\hbar\omega)d\Omega_\omega} = \frac{1}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{(\hbar\omega)^2}{(2\pi\hbar c)^3} \frac{\hbar^2}{V_p^2} \int_{v_p}^{\infty} q dq \int_0^{2\pi} d\phi_q \sum_{\vec{i}} |T_{\vec{i}}|^2 \\ = \frac{8\alpha_0^2 \alpha^3}{\pi \hbar \omega} Z_p^2 \left( \frac{c}{v_p} \right)^2 \int \frac{dq}{q} \left\{ 1 - \left( \frac{\omega}{qv_p} \right)^2 + \left[ \frac{3}{2} \left( \frac{\omega}{qv_p} \right)^2 - \frac{1}{2} \right] \sin^2 \theta_\omega \right\} |S_1(q) - S_2(q)|^2, \quad (4.51)$$

donde  $\theta_\omega$  es el ángulo de emisión del fotón con respecto a la dirección de la partícula incidente. Cuando se calcula el bremsstrahlung atómico para una enorme transferencia de momento, la sección transversal de éste aumenta conforme se incremente el número atómico del blanco<sup>[5]</sup>  $Z_p$ . Para un blanco de Al bombardeado con protones de 1 MeV (fig.4.2), se observa que la sección transversal de bremsstrahlung depende directamente de la diferencia  $S_1 - S_2$ , es decir de la diferencia de las principales componentes en la región de rayos X. Así,  $S_1$  representa el coeficiente de la densidad electrónica (coeficiente de Fourier) e indica la aportación electrónica en la región central para una grande transferencia de momento  $q$ .

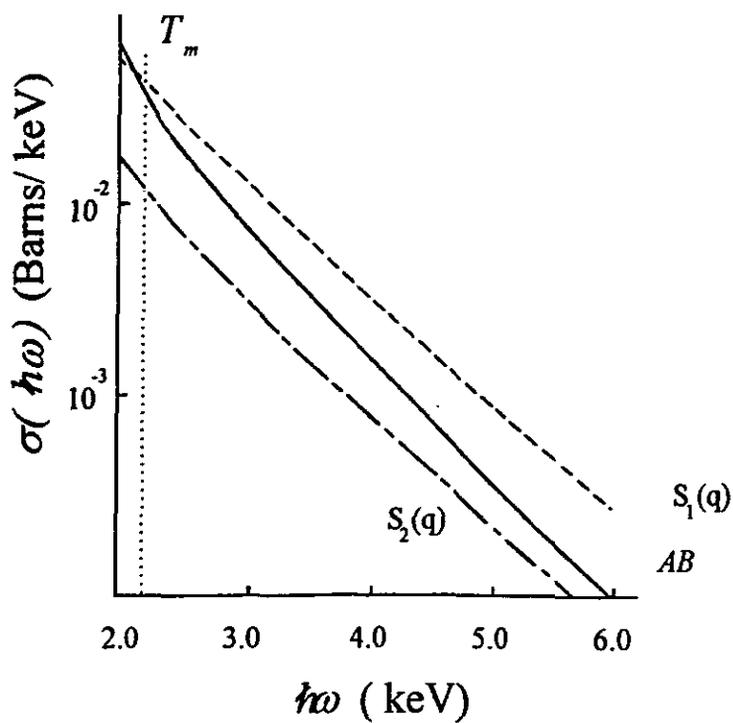
Para el cálculo de la sección transversal de la producción de bremsstrahlung atómico debe de considerarse<sup>[5]</sup>

a) que para una gran transferencia de momento  $\left(\frac{\omega\alpha_0}{v_p Z_T}\right)^2 \gg 1$

b) que para una pequeña transferencia de momento  $\left(\frac{\omega Z_p}{v_p Z_T}\right)^2 \ll 1$ .

Por último, la función de onda hidrogenoide sirve para describir de la mejor manera el comportamiento de los electrones orbitales en la región central del átomo cuando se estima la sección transversal de la producción de bremsstrahlung atómico.

En el caso de que se bombardee el blanco con iones pesados, donde el proyectil tiene sus propios electrones en órbita, se puede utilizar la ec. (4.54), pero ahora se toma en cuenta el Hamiltoniano de los electrones del proyectil y se desprecia la interacción coulombiana entre un electrón del blanco y un electrón del proyectil; la estimación de AB se basa en la aproximación de onda plana<sup>[24]</sup>.



**Fig.4.2.** Sección transversal del bremsstrahlung atómico para un blanco de Al bombardeado con protones de 1 MeV de energía y observada a un ángulo de  $\theta = 90^\circ$  (Ishii, 1984), ref. 5.

#### 4.6) CONSIDERACIONES POSTERIORES

Existen varios procesos como RI, QFEB y bremsstrahlung nuclear los cuales se pueden tratar con el mismo desarrollo de las secciones anteriores pero tomando en cuenta la energía de incidencia del proyectil que va a ser mucho mayor que en AB y, debido a esto, puede considerarse alguna contribución de efecto relativista.

Cuando se habla de considerar el proceso en donde el proyectil tiene su propia estructura electrónica se tendrán que mencionar los iones pesados, este el tratamiento es un más complicado, debido a que el proyectil no sólo interactúa con el blanco como una partícula solitaria sino que se deben de considerar todas combinaciones del arreglo del proyectil con la estructura electrónica del blanco, esto se considera más complicado ya que poco se ha estudiado al respecto<sup>[22]</sup>.

Al estimar la sección transversal de AB se tomaron en cuenta para su cálculo la aproximación de onda plana y el efecto de deflexión coulombiano del proyectil, mientras que se despreciaron el efecto de apantallamiento de la carga eléctrica del proyectil y el efecto de la energía de amarre<sup>[24]</sup>.

## CONCLUSIONES

El presente trabajo trata los métodos de análisis para la interpretación de los fenómenos de radiación emitida durante la colisión de iones pesados con átomos de un blanco en donde se han considerado las aceleraciones y deceleraciones tanto del ion incidente como de los electrones participantes.

El dominio de los procesos importantes son:

- 1) AB predomina principalmente en la región de 0.5 MeV a 1 MeV,
- 2) SEB se considera en la región de 1.5 MeV a 4 MeV,
- 3) QFEB se refiere a altas energías mayores que 10 MeV,
- 4) el efecto de retardo se considera cuando la energía del electrón secundario es grande.

El conocimiento de estos efectos son de trascendencia en:

⇒ la caracterización de materiales, ya que la radiación debida a la capa K de cada átomo permite identificar a cada uno de los componentes de un sistema. Esta es la técnica PIXE (Particle Induced X-Ray Emission),

⇒ establecer el límite mínimo de detección en PIXE,

⇒ la aplicación tecnológica en la fabricación de detectores, pues en cada uno de los efectos se puede minimizar la radiación de ruido y optimizar el intervalo de observación,

⇒ el diseño de un equipo experimental, en donde debido a la geometría de la observación de los efectos SEB y AB, se ve que a  $90^\circ$  respecto del haz incidente se tiene la mejor observación del efecto, pero no ocurre cuando se toma en cuenta el efecto de retardo debido a que el ángulo ahora decrece y que es la mejor aproximación.

Para el AB la mejor aproximación se da cuando se aplica la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo.

Este trabajo nos sirve para comprender algunos de los proceso más importantes que se dan a bajas energías en una simple colisión entre dos partículas, pero también presenta que para hallar la mejor aproximación se tienen que considerar muchos más parámetros, ya sean clásicos, cuánticos y relativistas.

APÉNDICE A

$$f_1 = \int_1^{E_1/\hbar\omega} \frac{\ln\left(\frac{1+T}{1-T}\right)}{\ln\left(\frac{1+16}{T}\right)(\hbar\omega)^2} dt,$$

$$f_2 = \int_1^{E_1/\hbar\omega} T^2 \frac{\ln\left(\frac{1+T}{1-T}\right)}{\ln\left(\frac{1+16}{T}\right)(\hbar\omega)^2} dt,$$

$$f_3 = \int_1^{E_1/\hbar\omega} \frac{T}{\ln\left(\frac{1+16}{T}\right)(\hbar\omega)^2} dt,$$

$$g_0 = \begin{cases} \frac{1}{6x} [8 + (s-x)^3] & \text{para } \left| \frac{\gamma}{4} - 1 \right| < s < \infty, \\ \frac{s}{3x} [s^2 + 3x^2] & \text{para } 1 - \frac{\gamma}{4} \geq s \geq 0, \\ 0 & \text{para } s \leq \frac{\gamma}{4} - 1, \end{cases}$$

$$g_1 = \frac{\gamma}{2x} \left[ 1 - \left( \frac{\gamma - 2s}{2x} \right)^2 \right] + \frac{1}{7 \times 6 \times 5 \times 4x^3} \left\{ 5 \times 4 \times 3 \left[ (1+s)(\gamma - 2s)^3 - 8x^3(x-1) \right] + \right. \\ \left. + 9(\gamma + 8s^2 + 8) \left[ (1+s)(\gamma - 2s)^2 - 4x^2(x-1) \right] + \right. \\ \left. + 4(8\gamma - 3\gamma^2 - 27\gamma s^2 + 22s^2 - 24s^4 - 24) \left[ 2(x-1)(x^2 + x + 1) - (1+s)(2x^2 + 2 - 2s + \gamma) \right] \right\}$$

$$\text{para } \left| \frac{\gamma}{4} \right| \leq s < \infty$$

$$g_2 = \left\{ \frac{s}{x^3} \left( \frac{\gamma^3}{4} + \gamma^2 s^2 + \frac{\gamma}{3} s^2 + \frac{4}{15} s^4 + \frac{6}{5} \gamma s^4 + \frac{16}{35} s^6 \right) \right\} \text{ para } 1 - \frac{\gamma}{4} \geq s \geq 0$$

6

$$g_2 = 0 \text{ para } s \leq \frac{\gamma}{4} - 1,$$

donde  $E = E_e + U_i$ ,  $x^2 = s^2 + \gamma$ ,  $T = \sqrt{1-1/t}$ ,  $\gamma = E/T_e$ ,  $s = v_e/v_p$  siendo  $E_e$  la energía del electrón expulsado del átomo,  $t$  la energía del electrón que pasa a través del material bombardeado en unidades  $\hbar\omega$  e  $I$  es el potencial de ionización promedio del átomo blanco.

### APENDICE B

$$V_c = -\sum_{i=1}^N \frac{z_p e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_p|} + \frac{Z_T Z_p e^2}{r_p},$$

$$\begin{aligned} V_R = & -\frac{e}{c} \vec{p} \cdot \left[ \frac{Z_p}{m_p} \vec{A}(\vec{r}'_p) - \frac{Z_T}{m_T} \vec{A}(\vec{r}'_T) \right] + \sum_{i=1}^N \frac{e}{c} \vec{p}_i \cdot \left[ \vec{A}(\vec{r}'_i) + \frac{Z_T}{m_T} \vec{A}(\vec{r}'_T) \right] + \\ & -\frac{e}{c} \frac{\vec{P}_c}{M} \cdot \left[ Z_T \vec{A}(\vec{r}'_T) + Z_p \vec{A}(\vec{r}'_p) - \sum_{i=1}^N \vec{A}(\vec{r}'_i) \right] + \frac{e^2 Z_T^2}{2m_T c^2} \vec{A}^2(\vec{r}'_T) + \\ & + \frac{e^2 Z_p^2}{2m_p c^2} \vec{A}^2(\vec{r}'_p) + \sum_{i=1}^N \frac{e^2 \vec{A}^2(\vec{r}'_i)}{2m_e c^2}; \end{aligned}$$

$$\vec{A}(\vec{r}'_p) = \sqrt{4\pi c^2} \sum (a_\lambda \vec{e}_\lambda e^{i\vec{k}_\lambda \cdot \vec{r}'_p} + a_\lambda^* \vec{e}_\lambda e^{-i\vec{k}_\lambda \cdot \vec{r}'_p}),$$

donde

- ♣  $N$  es el número de electrones ,
- ♣  $a^*$  es el operador de creación del fotón con un vector de onda  $\vec{K}_\lambda$  y un vector de polarización  $\vec{e}_\lambda$

- ♣  $\bar{P}_c$  es el operador de momento para la coordenada del centro de masa
- ♣  $P$  y  $\bar{p}_i$  son los operadores correspondientes para los vectores que se consideran con respecto al núcleo del blanco ( $\bar{r}_p, \bar{r}_i$ )

$$\bar{r}'_T = -\frac{m_p \bar{r}_p + m_e \sum_{i=1}^N \bar{r}_i}{M}$$

$$\bar{r}'_p = \bar{r}_p + \bar{r}'_T,$$

$$\bar{r}'_i = \bar{r}_i + \bar{r}'_T;$$

$$H_A = \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1}^N \bar{p}_i^2 + \frac{1}{2m_p} \left[ \sum_{k=1}^N \bar{p}_k \right]^2 + \sum_{i=1}^N U(\bar{r}_i),$$

donde

$$U(\bar{r}_i) = -\frac{Z_p e^2}{r_i} + \frac{1}{2} \sum_{j(i \neq j)} \frac{e^2}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|}.$$

APÉNDICE C

$$\Psi_a = \psi_a + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{V}{E_a - H + i\varepsilon} \psi_a,$$

para hacer más cómodo el procedimiento, se va a considerar el limite hasta el final del desarrollo

$$\begin{aligned} \Psi_a &= \frac{E_a - H + i\varepsilon}{E_a - H + i\varepsilon} \psi_a + \frac{V}{E_a - H + i\varepsilon} \psi_a \\ &= \frac{E_a - H + i\varepsilon + V}{E_a - H + i\varepsilon} \psi_a; \end{aligned}$$

ahora cambiando el factor al primer miembro de la ecuación se tiene

$$\left( \frac{E_a - H + i\varepsilon}{E_a - H + i\varepsilon + V} \right) \Psi_a = \psi_a,$$

si se suma  $V-V = 0$  en la ecuación anterior y se reagrupa se tiene

$$\left( \frac{E_a - H + i\varepsilon - V + V}{E_a - H + i\varepsilon + V} \right) \Psi_a = \left( \frac{E_a - H + V + i\varepsilon - V}{E_a - H + V + i\varepsilon} \right) \Psi_a,$$

como  $H = H_0 + V$  entonces

$$\left( \frac{E_a - H + V + i\varepsilon - V}{E_a - H + V + i\varepsilon} \right) \Psi_a = \left( \frac{E_a - H_0 + i\varepsilon - V}{E_a - H_0 + i\varepsilon} \right) \Psi_a = \psi_a,$$

si se considera en dos términos el miembro izquierdo de la ecuación y se escribe

$$\frac{E_a - H_0 + i\varepsilon}{E_a - H_0 + i\varepsilon} \Psi_a - \frac{V}{E_a - H_0 + i\varepsilon} \Psi_a = \psi_a,$$

y por último pasando el término que contiene el potencial al segundo miembro y simplificando el primer término se tiene

$$\Psi_a = \psi_a + \frac{V}{E_a - H_0 + i\varepsilon} \Psi_a.$$

#### APENDICE D

$$S_{n,l,r}(q) = \begin{cases} \frac{l+l+1}{2} \left(\frac{a_0}{Z_n}\right)^2 \int dr R_{n,l}(r) R_{n,l}(r) \int dr r^2 R_{n,l}(r) j_l(qr) R_n(r), \exists l = l \pm 1 \\ 0, \exists l \neq l \pm 1 \end{cases}$$

siendo  $j_l(qr)$  la función de Bessel esférica y  $a_0$  el radio de Bohr. Utilizándose la función hipergeométrica se calcula

$$S_{n,l,r}(q) = f_{n,l,r}(q) \frac{1}{n'^3} \left(\frac{\frac{1}{n} - \frac{1}{n'}}{\frac{1}{n} + \frac{1}{n'}}\right)^n \frac{1}{Q_n} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right)^{-n+1} \left(\left[\frac{1}{n} - \frac{1}{n'}\right]^2 + Q_n\right)^{(n'-n)/2} \\ \times \left(\left[\frac{1}{n} + \frac{1}{n'}\right]^2 + Q_n\right)^{\frac{-(n'+n)}{2}} \operatorname{sen} \left( n' \tan^{-1} \frac{2\sqrt{Q_n}}{n \left[Q_n + \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right]} + n \tan^{-1} \frac{2\sqrt{Q_n}}{n \left[Q_n + \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right]} \right),$$

y para

$$S_{n,l,k,r}(q) = f_{n,l;k,r}(q) \frac{k}{1 - e^{-2\pi k}} \left(k^2 + \frac{1}{n^2}\right)^{-n+1} \frac{1}{Q_n} e^{\left[ \frac{-\frac{2}{k} \tan^{-1}(nk) - \frac{1}{k} \tan^{-1}\left(\frac{2k}{n\left(Q_n - k^2 + \frac{1}{n^2}\right)}\right)}{\right]} \times$$

$$\times \left(\frac{1}{n^2} + (k - \sqrt{Q_n})^2\right)^{-n_2} \left(\frac{1}{n^2} + (k + \sqrt{Q_n})^2\right)^{-n_2} \operatorname{sen} \left[ n \tan^{-1} \frac{2\sqrt{Q_n}}{n\left(Q_n - \frac{k^2}{n^2}\right)} + \frac{1}{2k} \ln \frac{\frac{1}{n^2} + (k + \sqrt{Q_n})^2}{\frac{1}{n^2} + (k - \sqrt{Q_n})^2} \right]$$

con  $Q_n = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e Z_n^2 R_y}$ , al desarrollar algunos valores de  $f$  se tiene

$$f_{1,0;n,1}(q) = -2^4,$$

$$f_{2,0;n,1}(q) = 2\left(1 - \frac{1}{n^2}\right)\left(Q_n + \frac{1}{n^2} - \frac{1}{4}\right),$$

$$f_{2,1;n,0}(q) = \frac{1}{6}\left(3Q_n + \frac{1}{n^2} - \frac{1}{4}\right),$$

$$f_{2,1;n,2}(q) = -\frac{4}{3}\left(1 - \frac{1}{n^2}\right).$$

## BIBLIOGRAFÍA

- [1] Luis Ricardo de la Vega Ballesteros. Tesis de licenciatura. Facultad de Ciencias, UNAM, (1994).
- [2] Luis Rodríguez Fernández. Tesis de licenciatura. Facultad de Ciencias, UNAM, (1988).
- [3] F. Folkmann, C. Gaarde *et al.* Nuclear Instruments and Methods, II6 487 (1974).
- [4] K. Ishii and S. Morita. Phys. Rev. A, vol. 13, num. 1, 131 (1976).
- [5] K. Ishii and S. Morita. Phys. Rev., vol. 30, num.5, 2278 (1984).
- [6] J. D. Jackson. Classical Electrodynamics, seccs. 13, 14, 15. Second Edition (1962).
- [7] Stephen Gasiorowicz. Quantum Physics; caps. 4, 16, 19 y apéndice A. John Wiley & Sons, 1974.
- [8] G. Basbas, W. Brandt and R. Laubert. Phys. Rev. A, vol. 7, num. 3, 983 (1973).
- [9] G. Basbas, W. Brandt and R. Laubert. Phys. Rev. A, vol. 17, num. 5, 1655 (1978).
- [10] W. Brandt and G. Lapicki. Phys. Rev. A, vol. 23, num. 4, 1717 (1981).
- [11] Rufo José Vitela Escamilla. Tesis de licenciatura. Facultad de Ciencias, UNAM, (1983).
- [12] W. K. H. Panofsky and M. Phillips. Classical Electricity and Magnetism, chap. 19, 20. Second edition. Addison-Wesley (1962).
- [13] J. B. Marion. Classical Electromagnetic Radiation, chap. 7. Academic Press (1965).
- [14] J. D. García. Phys. Rev. A1 (1970) 280.
- [15] M. Gryzinski. Phys. Rev. 138 (1965) A 336.
- [16] R. P. Feynman et al. The Feynman Lectures on Physics, vol. 2, chap. 21, 26, 25. Addison-Wesley (1964).
- [17] A. Yamadera, K. Ishii and K. Sera. Phys. Rev., vol.23, num.1, 24 (1981).
- [18] T. F. M. Bensen and L. Vriens. Physica 47 (1970) 307-319.

- [19] M. R. C. McDowell and J. P. Coleman. Introduction to the theory of ion-atom collisions, Caps. 5, 6. North-Holland Publishing Company (Amsterdam-London), 1970.
- [20] W Brandt and G. Lapicki. Phys. Rev. A, vol. 20, num.2, 465 (1979).
- [21] Luis Rodríguez Fernández. Tesis doctoral. Facultad de Ciencias, UNAM, (1994).
- [22] K. Ishii, K. Maeda and M. Takami. Nuclear Instruments and Methods in Physical Research, B75 (1993) 73-76.
- [23] K. Ishii and S. Morita. Nuclear Instruments and Methods in Physical Research B22, 68 (1987).
- [24] K. Ishii and S. Morita. Internacional Journal of PIXE, (1990) 1.
- [25] K. Ishii, M. Kamiya, K. Sera, S. Morita and H. Tawara. Phys. Rev. A15 (1977) 2126.
- [26] Sir James Jeanes. The Mathematical Theory of Electricity and Magnetism, chap. XIX. Fifth edition. Cambridge, 1969.
- [27] John R. Reitz y F. J. Milford. Fundamentos de la Teoría Electromagnética, cap.19. UTEHA, 1981.