



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO

PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS
QUÍMICAS

Experimentos de fotoionización en Berilio atómico en la región de las resonancias autoionizantes $3snp$ y $3pns,nd$ entre los umbrales $3s$ y $3p$ y distribución angular de fotoelectrones durante el decaimiento de las resonancias autoionizantes $1s-np$ ($n=2-9$).

TESIS
PARA OPTAR POR EL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIAS

PRESENTA

Paul Olalde Velasco.



TUTOR: Dr. José Jiménez Mier y Terán.
AÑO: 2006



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

AGRADECIMIENTOS

A la Universidad Nacional Autónoma de México y a mis maestros.

Al CONACyT por su apoyo al proyecto 32204-E y por la beca número 173240.

Al Dr. José I. Jiménez Mier y Terán por su paciencia, disposición y ejemplo.

A los jurados: Dr. Carlos Bunge, Dr. Antonio Cogordán, Dr. Miguel Costas, Dr. Renato Lemus y al Dr. José L. Hernández por su tiempo dedicado a la lectura del manuscrito y por sus valiosos comentarios.

Al Dr. Jesús Flores Mijangos y al Dr. Edgar Méndez por su disposición a compartir el conocimiento.

Al ICN de la UNAM por las facilidades prestadas.

Dedico este trabajo a todos los que me acompañan y apoyan: mis muertos, mis vivos (mi familia, mis amigos, Issis) y por supuesto a la mar y sus olas.

Este trabajo fue realizado en el Instituto de Ciencias Nucleares de la Universidad Nacional Autónoma de México y los experimentos conducidos en el Synchrotron Radiation Center de la Universidad de Wisconsin.

CONTENIDO

Introducción (5)

1. Teoría. (8)

Efecto fotoeléctrico, fotoionización, sección eficaz de fotoionización (total, parcial y parcial diferencial), parámetro de distribución angular de fotoelectrones, estado excitado, transición resonante, autoionización, efecto Auger, canal de salida, satélites, procesos shake-(up, off, down, espectador), perfil de Fano, series de Rydberg, defecto cuántico.

2. Fuente de radiación, radiación sincrotrónica. (20,21)

- 2.1 Operación de un anillo de almacenamiento para producción de radiación sincrotrónica. (21)
- 2.2 Parámetros en el anillo de almacenamiento “Aladdin”. (24)
- 2.3 Radiación sincrotrónica de imán de doblado. (32)
- 2.4 Radiación de dispositivos de inserción. (36)

3. Óptica. (41)

- Rejilla de difracción, círculo de Rowland, monocromador Seya-Namioka.(41)
- 3.1 Línea Stainless-Steel Seya-Namioka. (45)
- 3.2 Línea PGMA. (47)

4. Espectrómetro. (49)

- 4.1 Sistema de vacío. (49)
- 4.2 Fuente de átomos. (53)
 - 4.2.1 horno externo. (57)
 - 4.2.2 horno interno. (58)
- 4.3 Detección. (59)
 - 4.3.1 Analizadores Electrostáticos (ESAs). (60)
 - 4.3.2 “Chaneltrones” (CEMs). (62)

5. Maneras de registrar un espectro de fotoelectrones. (65)

- 5.1 Espectrometría de fotoelectrones (PES). (65)
- 5.2 Espectrometría de estado iónico constante (CIS). (67)

6. Calibraciones. (68)

- 6.1 Alineamiento. (69)
- 6.2 Calibración del volumen de la fuente de fotoelectrones. (70)
- 6.3 Calibración de la polarización de los fotones. (71)
- 6.4 Calibración de la energía de los fotones. (74)

7. Experimentos. (77)

- 7.1 Medición de la sección eficaz parcial de fotoionización para el canal 2s entre los umbrales 2s y 3p en Berilio atómico. (77)

7.1.2 Tratamiento de espectros CIS para reportar la sección eficaz parcial de fotoionización para el canal 2s entre los umbrales 2s y 3p en Berilio atómico. (79)

7.2 Medición del parámetro de distribución angular (β) de los fotoelectrones producidos durante el decaimiento de las resonancias $1s \rightarrow np$ ($n=2-9$). (81)

7.2.1 Tratamiento de espectros CIS para reportar el parámetro de distribución angular (β) de los fotoelectrones que decaen de las resonancias $1s \rightarrow np$ ($n=2-9$) y la sección eficaz parcial de fotoionización (σ_i). (82)

8. Resultados y discusión. (85)

9. Conclusiones. (102)

Bibliografía. (104)

INTRODUCCIÓN

Después del He el Be es el átomo más simple de capa cerrada que existe. El tener cuatro electrones hace que se manifiesten en él efectos de muchos cuerpos al mismo tiempo que puede ser tratado teóricamente de manera rigurosa [1]. En este sentido, a nivel atómico se han hecho sobre el Be cálculos variados que incluyen efectos multiconfiguracionales para calcular rendimientos fluorescentes [2], su energía en el estado base [3], y secciones eficaces totales de fotoionización [4,5]. Consecuentemente sobre él se han hecho varios tipos de experimentos que aportan información que se complementa entre sí. Estos han sido desde absorción en una fuente de plasma [6, 7], de un haz de iones dirigido hacia una lámina de Berilio (beam-foil)[8], de espectrometría de fotoelectrones para excitaciones múltiples [1], rendimiento de iones por fotoionización simple [9], doble [10-12] y hasta observaciones astronómicas que buscan dar con claves sobre la evolución del universo a lo largo del tiempo [13].

Para conducir nuestros experimentos utilizamos como fuente de radiación la radiación sincrotrónica. Radiación sincrotrónica es radiación electromagnética producida por una partícula cargada moviéndose en una trayectoria circular a velocidades relativistas. Fue observada por primera vez en los laboratorios de General Electric en 1946 y en ese momento fue vista como un inconveniente por los investigadores que estudiaban colisiones. Posteriormente se encontró que sus propiedades (alta intensidad, el ser linealmente polarizada, de estrecho ancho de línea, continua y sintonizable desde la región de el infrarrojo lejano hasta los rayos x) la hacían una fuente de radiación ideal para hacer estudios espectroscópicos. Desde entonces a la fecha ha jugado un papel fundamental en las esferas del quehacer científico y tecnológico. Por ejemplo con ella se han podido estudiar con detalle nunca antes imaginado la estructura electrónica de la materia (átomos, moléculas y sólidos), dinámicas celulares (estudios de estructura y actividad enzimática de proteínas, membranas celulares, mecanismos de fijación de virus) a nivel atómico, molecular e incluso resueltas en tiempo; e incluso se han estudiado con radiación sincrotrónica nanoestructuras con posibles aplicaciones en telecomunicaciones y almacenamiento cuántico de información. Información actualizada sobre las aplicaciones de la radiación sincrotrónica puede encontrarse en: www.src.wisc.edu/highlights/index y www-als.lbl.gov/als/als_news/.

El tipo de experimentos que nosotros realizamos son de espectrometría de fotoelectrones usando radiación sincrotrónica (ESSR por sus siglas en inglés). De manera general los experimentos de fotoelectrones en Be atómico pueden dividirse en dos grupos: uno en el que se estudian los procesos relacionados con los electrones en la capa de valencia (2s) y el otro relacionado con los electrones fuertemente ligados (1s). En los veranos del 2003 y del 2004, empleando la técnica mencionada, se realizaron dos experimentos en Be atómico: uno que involucra la capa K y otro que involucra los electrones en la capa L. La motivación para cada experimento surge de trabajos anteriores [19-21].

Comenzaremos exponiendo lo referente al experimento a bajas energías. Por lo general en sistemas atómicos, si ocurre una excitación resonante a un estado que está por encima del primer límite de ionización, puede ocurrir un proceso conocido como autoionización [14]. Este proceso ocurre por la interacción entre el estado discreto y el continuo dando lugar a perfiles de línea asimétricos [15] en la sección eficaz de fotoionización conocidos como perfiles de Fano [16, 17]. Las excitaciones múltiples y la autoionización son consecuencia de la correlación electrónica. Por ello, mediciones

de la sección eficaz parcial de fotoionización en las regiones donde se dan estas resonancias autoionizantes pueden ser útiles para hacer comparaciones con cálculos teóricos que buscan profundizar en el entendimiento de estas dinámicas; más aun si se trata de un sistema “simple” como el Be.

La sección eficaz total de fotoionización (σ_{tot}) en la región de las resonancias autoionizantes $2p$ ns y nd fue estudiada experimentalmente por Wehlitz [10]. Esta región energética ($9.32 \leq h\nu$ (eV) ≤ 13.277) comienza desde el umbral $2s^{-1}$ y cubre hasta el primer límite de las excitaciones dobles $\text{Be}^+ 1s^2 2p \ ^2P$. En su experimento Wehlitz y colaboradores midieron el rendimiento del ión Be^+ por tiempo de vuelo (TOF por sus siglas en inglés). Los resultados de su medición fueron comparados con cálculos variados y se encontró que los basados en la formulación de la matriz-R, en especial el de Kim [5], modelaban bien las resonancias autoionizantes para el Be. Mediciones de la sección eficaz parcial fotoionización (σ) de Be por encima del umbral $\text{Be}^+ 2p$ no han sido reportadas. En este sentido nosotros medimos durante los veranos del 2003 y 2004 la sección eficaz parcial de fotoionización de Be para el canal $2s$ (σ_{2s}). El experimento se llevó a cabo en el Synchrotron Radiation Center de la Universidad de Wisconsin. Los espectros fueron tomados con el espectrómetro de fotoelectrones de Oak Ridge [18]. La nube de átomos de Be fue producida por un crisol que se calentó resistivamente hasta ≈ 1200 °C. Los fotones fueron provistos por un imán de doblado (línea SS-Seya-Namioka) y por un ondulador (línea PGMA) en corridas diferentes. Tras interactuar con los átomos los fotoelectrones producidos fueron contados y los espectros registrados.

Como resultado de nuestras mediciones, en este trabajo reportamos la sección eficaz parcial de fotoionización para el canal $2s$ de Be atómico en el intervalo de energía de fotones comprendido entre 16.5 y 20.23 eV. Es decir, desde algunos eV por encima del umbral $\text{Be}^+ 1s^2 2p$ (13.277 eV) y hasta el umbral $\text{Be}^+ 1s^2 3p$ (21.2688 eV) pasando por el umbral $\text{Be}^+ 1s^2 3s$ (20.2305 eV). La sección eficaz parcial medida (σ_{2s}) fue comparada con el cálculo para la sección eficaz total (σ_{tot}) hecho por Kim [5]. Encontramos en general un buen acuerdo en cuanto a anchos, formas y posiciones de las resonancias.

Por otro lado, el primer trabajo de espectrometría de fotoelectrones en Be atómico fue hecho por Krause en 1987, e involucró a los electrones de la capa K [1]. En aquella ocasión se estudió en detalle la región cercana al umbral $1s$ y efectos de la correlación electrónica se hicieron visibles. Posteriormente Caldwell y colaboradores [19] estudiaron el decaimiento de las resonancias $1s 2s^2 np$ ($n=2,3$) en Be producidas por interacción con fotones. Encontrando que las resonancias decaen preferentemente a los estados satélite del ión ($1s 2s^2 np$ (1P) $\rightarrow 1s^2 np$ (2P) ($n=2,3$)) en vez de al estado base $\text{Be}^+ 1s^2 2s$. Todo indica que los 2 electrones $2s$ participan en el decaimiento mientras que el electrón np permanece como “espectador”. Con esto en mente, Jiménez y colaboradores [20] buscaron extender el trabajo a resonancias superiores ($n=2-6$). Los datos reportados en el trabajo de Caldwell fueron entonces confirmados y para las resonancias ($n=4-6$) se encontró que los canales de salida $(n+1)p'$ (shake-up) dominaban sobre los procesos $(n-1)p'$ (shake-down) y espectador. Los estudios de distribución angular complementan la información sobre el proceso de decaimiento al estar esta relacionada con los ímpetus angulares de los electrones implicados. Entonces el siguiente paso fue estudiar la distribución angular de los fotoelectrones provenientes del decaimiento de dichas resonancias. El experimento fue conducido por Jiménez y colaboradores [21]. En su medición buscaron los máximos de las resonancias ($1s \rightarrow np$ ($n=2-6$)), y a esas energías de fotones tomaron espectros PES a cero y noventa grados

con respecto al vector de polarización de la radiación incidente. A partir de estos se obtuvo el parámetro de asimetría β para los principales canales de salida de las resonancias. Como resultado de sus mediciones reportaron que la distribución angular para las resonancias estaba cerca de ser isotrópica con una emisión ligeramente preferente a noventa grados. Sin embargo, en el contexto del modelo del espectador se esperaba que la distribución angular de los fotoelectrones fuera esférica pues solo los electrones 2s y el hueco 1s participaban en el decaimiento. La desviación del comportamiento isotrópico fue explicada en términos de la polarización inducida por el electrón en el estado resonante np. Con las distribuciones angulares de los canales de salida principales en los máximos de cada resonancia (n=2-6) surgió el interés de estudiar el comportamiento dinámico de β al cambiar la energía de fotones a lo largo de las resonancias. Dando seguimiento a esa inquietud realizamos una corrida experimental en el verano del 2004 en el SRC de la Universidad de Wisconsin. Las condiciones experimentales fueron muy similares. En este experimento los fotones fueron provistos por un ondulator (línea PGMA). Como resultado de nuestras mediciones reportamos los parámetros de distribución angular (β) para el decaimiento de las resonancias 1s-np (n=2-9) así como sus secciones eficaces parciales de fotoionización (σ). Encontramos que cerca del máximo todas las β son ligeramente negativas, lo cual implica que, aunque están cerca de ser isotrópicas los fotoelectrones tienen una dirección de emisión preferente a 90° (salvo la β de la resonancia 2p en el canal 3p' la cual es ligeramente positiva) con respecto al vector de polarización de la radiación incidente. También encontramos que, al alejarnos del máximo, el valor de β se vuelve más negativo tendiendo a -1 (salvo la β de la resonancia 2p en el canal 2p'). es conveniente resaltar que la β del canal 2p' proveniente de la resonancia 2p se mantuvo relativamente constante más allá del máximo de la resonancia 2p.

Adicionalmente, usando la relación de Rydberg y con las posiciones de las resonancias tomada de nuestros espectros, se midieron el umbral de fotoionización para el electrón 1s de Be y el defecto cuántico (δ) para los orbitales p. El primero fue de 123.678 ± 0.008 eV y el segundo 0.55826.

En la parte final de la escritura de esta tesis apareció publicado un trabajo experimental [73] en el que por tiempo de vuelo (TOF), Yoshida y colaboradores determinan por rendimiento de iones de Be^+ la sección eficaz total de fotoionización en la región de las resonancias autoionizantes 3snp ($17.2 \leq h\nu$ (eV) ≤ 20.1). Como consecuencia de esto en un futuro inmediato debemos comparar nuestros datos experimentales de la sección eficaz parcial para la misma región energética. Podemos adelantar que hay un buen acuerdo entre ambas mediciones.

1. Teoría

En una primera aproximación el *efecto fotoeléctrico* es un proceso mediante el cual pueden emitirse electrones de la superficie de un metal tras hacer incidir luz sobre su superficie; a estos electrones emitidos se les llama fotoelectrones. Hoy se sabe que para energías de fotones comprendidas entre 8 eV y 10 keV el efecto fotoeléctrico domina sobre la dispersión Compton [22]. El efecto fotoeléctrico fue uno de los problemas centrales de la física de inicio del siglo XX. Fue explicado por Einstein en 1905 basado en su novedosa teoría de los cuantos de luz. Por ello se le otorgaría en 1921 el premio Nobel en física.

El efecto fotoeléctrico se conecta con la estructura atómica por medio de la mecánica cuántica. La mecánica cuántica nos dice que los estados ligados corresponden a niveles discretos de energía mientras que los estados no ligados corresponden a un continuo de niveles de energía. También nos dice que un electrón puede transitar de un estado discreto a un continuo de niveles (entre otras causas) por interacción con fotones. Estas transiciones están sujetas a balances de energía, paridad y momento angular. Sabemos también que el estado base de un átomo es el más estable y que los electrones en él, están acomodados en orbitales atómicos según el principio de construcción (o de Aufbau) y el principio exclusión de Pauli. Estos orbitales atómicos están caracterizados por su número cuántico principal n , el momento angular l , la proyección del momento angular m_l y la del espín m_s . Puede haber $2(2l+1)$ orbitales en una capa (o subcapa) nl en particular. Si una capa tiene todos los orbitales disponibles ocupados se dice que está llena o cerrada, en caso contrario se dice abierta.

En la Figura 1 se muestra un diagrama simplificado de los niveles de energía de un átomo representativo de un metal de transición (Cr). El dibujo no es a escala. Podemos ver que el cromo es un átomo de capa abierta. Los niveles de energía son negativos y están considerados respecto al nivel de ionización, marcado por una línea horizontal con líneas inclinadas (Figura 1). Por encima de este nivel de ionización se encuentra un continuo ϵl ("peine" en Figura 1) de energía en el que cualquier electrón está desligado del átomo. Los puntos oscuros representan los electrones que ocupan las distintas subcapas (líneas continuas) de las capas K, L y M. La capa K tiene 2 electrones en orbitales 1s, la capa L tiene dos subcapas, la 2s con dos electrones y la 2p con seis electrones. La capa M tiene tres subcapas, la 3s con dos electrones, la 3p con seis electrones y la 3d que puede tener hasta 10 electrones. El número de electrones en el átomo neutro es el que determina el elemento químico.

Un fotón de energía $h\nu$, indicado por la flecha de puntos en la Figura 1, puede promover un electrón desde alguna de las subcapas hasta el continuo. En este caso un electrón 3p es promovido al continuo creándose un hueco en la subcapa correspondiente. El llenado de ese hueco ocurre ya sea por procesos Auger o de emisión de rayos x característicos (dominando la fluorescencia para valores de Z pequeños). Para desligar este electrón, la energía $h\nu$ del fotón debe ser igual o mayor a la energía de amarre E_A del electrón para la subcapa correspondiente. Entonces la energía de amarre E_A es la energía mínima característica que se debe proporcionar al sistema para que se de la excitación de un electrón desde esa subcapa hasta el continuo.

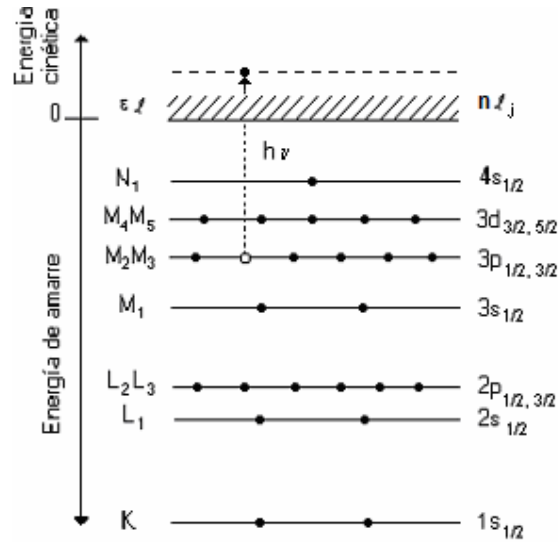
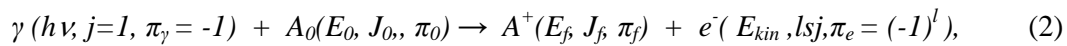


Figura1. Niveles de energía del cromo. Las líneas continuas indican la posición de las subcapas. El dibujo no es a escala. Por interacción con radiación electromagnética, un electrón 3p es promovido al continuo con una energía cinética igual a la diferencia entre $h\nu$ y la energía de amarre característica del electrón.

En la Figura 1 la energía de amarre corresponde a la diferencia en energías entre la línea en “cero” y las líneas que indican la posición de las subcapas. Si la energía de los fotones $h\nu$ es mayor a la energía de amarre E_A , por conservación de la energía el electrón sale con el exceso en forma de energía cinética E_{kin} . La ecuación que describe este balance es conocida como la ecuación de Einstein del fotoefecto

$$h\nu = E_{kin} + E_A, \quad (1)$$

y es la base de la espectrometría de fotoelectrones [23]. Para una descripción más detallada de la interacción de un fotón γ (con energía $h\nu$, momento angular j , y paridad π) con un átomo A_0 (caracterizado por su energía total en el estado base E_0 , momento angular total J_0 , paridad π_0), la ecuación (1) se puede escribir en forma de reacción:



donde el átomo ionizado está caracterizado por los parámetros del estado final E_f, J_f, π_f y el fotoelectrón por E_{kin}, l, s, j, π_e . La reacción (2) se ha escrito para el caso de la eyección de un solo electrón del átomo en una interacción dipolar eléctrica. Toda interacción entre fotones y átomos debe de respetar el balance de energía, de momento angular y de paridad. Para el caso particular de la fotoionización los balances serían:

$$h\nu + E_0 = E_f + E_{kin}, \quad (3)$$

$$\mathbf{J}_0 + \mathbf{j}_\gamma = \mathbf{J}_f + \mathbf{s} + \mathbf{l} \quad (4)$$

y

$$\pi_0 \cdot \pi_\gamma = \pi_f \cdot \pi_e = -\pi_0 = (-1)^l \pi_f. \quad (5)$$

Recordemos que el operador de paridad Π es un operador hermitiano que conmuta con el operador Hamiltoniano en la medida que el potencial sea invariante respecto de la

inversión de las coordenadas cartesianas. La acción del operador de paridad sobre una función de onda monoeléctronica $\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)=R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ produce una inversión de la coordenada de posición \mathbf{r} respecto del origen en la misma función, de manera que

$$\Pi\Psi(r,\theta,\varphi)=\Pi R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)=R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\pi-\theta,\varphi+\pi),$$

y como este cambio en θ y φ para los armónicos esféricos se puede expresar como [14]

$$Y_{l,m}(\pi-\theta,\varphi+\pi)=(-1)^l Y_{l,m}(\theta,\varphi),$$

donde el armónico esférico $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ tiene la paridad de l . Así

$$\Pi R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)=R_{n,l}(r)(-1)^l Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

y entonces la función de onda $\Psi_{E,l,m}(r)$ tiene la paridad de l (par para l par e impar para l impar).

Entonces, **fotoionización** es el proceso por el cual un fotón es absorbido por un sistema cuántico (átomos, moléculas o sólidos) seguido por la eyección de un electrón (Figura 1). Si el proceso de fotoionización tiene lugar con fotones de energía $h\nu$ bien definida, la energía cinética de los fotoelectrones E_{kin} relacionada con la energía de amarre E_A (que es una característica del elemento y de su entorno químico) nos permite construir un espectro de fotoelectrones, el cual para capas externas de los átomos es un excelente indicador de la densidad electrónica de los estados de valencia. El efecto fotoeléctrico es pues un proceso físico resultado de la interacción entre radiación electromagnética y los electrones de la materia que nos da información sobre la estructura de esta.

En el dominio de la espectrometría de fotoelectrones usando radiación sincrotrónica (ESSR por sus siglas en inglés) las propiedades más frecuentemente determinadas para los sistemas cuánticos son: la sección eficaz parcial de fotoionización σ y el parámetro de distribución angular o de asimetría β . Una de las cualidades más importantes de esta técnica es que permite diferenciar a nivel detallado, por ejemplo, la sección eficaz total de fotoionización en sus secciones eficaces parciales de acuerdo con las subcapas del sistema en estudio, los procesos de ionización de acuerdo al número de electrones que participan en él, y los procesos de decaimiento según el número de huecos o vacancias presentes en las diferentes subcapas [23].

La **sección eficaz de fotoionización** es la probabilidad por unidad de área por unidad de tiempo para que un fotón de cierta energía pueda ser absorbido por un átomo y este emita un fotoelectrón. El término sección eficaz es parecido al término sección transversal utilizado en los procesos clásicos de dispersión. Imaginemos que tenemos un haz de proyectiles dirigidos hacia un objetivo. Si se hace un corte transversal al objetivo, este corresponderá al área de posible impacto que vería el proyectil dirigiéndose hacia él. Usando como proyectiles fotones y como objetivo un átomo, teniendo caracterizada tanto la energía de los fotones $h\nu$ como su flujo $I(h\nu)$ en *Número de fotones / cm²s*, con un detector colocado después de que los fotones impactan el átomo podemos saber la cantidad de fotones absorbidos por el átomo por unidad de tiempo $P(h\nu)$ a esa energía de fotones $h\nu$. Entonces la sección eficaz está definida como [24]

$$\sigma(h\nu)=P(h\nu)/I(h\nu), \quad (6)$$

de modo que la sección eficaz es un área ficticia que representa la fracción de fotones incidentes que serán absorbidos en el proceso de fotoionización. Cuando el haz de

fotones viaja una distancia dx en un objetivo que tiene n átomos por unidad de volumen, el número de átomos que puede absorber un fotón es ndx , y el número total de fotones absorbidos (o de fotoelectrones generados) dI , ambos se relacionan con I por

$$\frac{dI}{I} = -n\sigma dx \quad (7)$$

que al ser integrada proporciona

$$I(x) = I_0 e^{-n\sigma x} \quad (8)$$

donde I_0 es el flujo de fotones previo a interactuar con la muestra. La unidad en que se expresa σ es el barn (10^{-24}cm^2), pero en la práctica se utiliza el Megabarn (Mb) 10^{-18}cm^2 . Un átomo con σ de 1 Mb necesita un flujo de 10^{18} fotones / $\text{cm}^2 \text{s}$ para generar un fotoelectrón por segundo

La probabilidad de transición (M_{if}) entre un estado inicial Φ_i y un estado final Φ_f , en la aproximación dipolar eléctrica (longitud de onda grande comparada con el tamaño del sistema en estudio) viene dada por la expresión

$$|M_{if}|^2 = \left| \langle \Phi_f | \sum_{\mu} r_{\mu} | \Phi_i \rangle \right|^2 \quad (9)$$

donde $\sum_{\mu} r_{\mu}$ es el operador dipolar en el sistema de n -electrones. Es importante mencionar en este punto, que el estado final del átomo $\langle \Phi_f |$ debe estar normalizado por unidad de energía, y que esta normalización debe incorporar como factor la densidad de estados, misma que de otra manera debe ponerse de manera explícita en la ecuación (9) [72]. Los fotones con energía en el ultravioleta solo pueden excitar los electrones de valencia en las subcapas más externas del átomo. En este caso la sección eficaz de fotoionización del átomo es determinada por esta subcapa y se conoce como **sección eficaz parcial de fotoionización**. Una expresión ampliamente aceptada para expresar la sección eficaz parcial de fotoionización es [25]

$$\sigma_{if}(h\nu) = \frac{4\pi^2 \alpha a_0^2}{3} h\nu |M_{if}|^2 \quad (10)$$

donde α es la constante de estructura fina ($1/137$), a_0 es el radio de Bohr (0.53\AA) y $h\nu$ es la energía de los fotones incidentes en Rydbergs ($1\text{Ry} = 13.605 \text{ eV}$).

Si nosotros sumamos las secciones eficaces parciales de fotoionización (σ_{if}) de todos los canales de salida abiertos para una energía de fotones dada obtenemos la **sección eficaz total de fotoionización** (σ_{Total})

$$\sigma_{Total}(h\nu) = \sum_{if} \sigma_{if}(h\nu) \quad (11)$$

Aunque la sección eficaz total de fotoionización es por si misma interesante, no es muy sensible a los detalles de la estructura electrónica pues no nos da información relativa a las subcapas dado que es la suma de intensidades de varias de ellas a la misma energía de fotones [24]. Como la sección eficaz de fotoionización depende de Φ_i y Φ_f , el efecto fotoeléctrico es una prueba directa de las propiedades atómicas y moleculares tanto del estado basal como de los estados finales, permitiéndonos revelar de manera sensible la estructura energética de los sistemas atómicos. La teoría entonces, se debe concentrar en calcular las mejores Φ_i y Φ_f con las mejores aproximaciones a la solución de la ecuación de Schrödinger o Dirac [23]. En este sentido se han construido modelos para poder predecir su comportamiento principalmente en el régimen del UV de vacío y rayos x

blandos (8eV–2keV); esta labor ha sido llevada a cabo principalmente por Cooper [26] y Manson [27], Amusia [28], Kelly [29-30], Johnson[31] entre otros.

La información que nos da la sección eficaz parcial de fotoionización nos permite separar todos los procesos que dan lugar a líneas de fotoelectrones no degeneradas como secciones eficaces parciales independientes con un comportamiento individual. Este comportamiento no solo refleja la estructura orbital de una subcapa en particular, sino también las diferentes interacciones entre las subcapas [25]. Hay que hacer énfasis en que la determinación de la sección eficaz de fotoionización debe hacerse variando la energía de los fotones; lo que se conoce como estudio del comportamiento dinámico de la fotoionización, y, esto es posible gracias a la radiación sincrotrónica.

Un paso más en el entendimiento de las dinámicas de fotoionización se dio al hacer estudios de fotoionización en la dirección de un ángulo predeterminado. Cuando la sección eficaz parcial de fotoionización es medida a un ángulo específico es denominada *sección eficaz parcial diferencial* $d\sigma_{if}/d\Omega$. Esta es proporcional a la intensidad de los fotoelectrones emitidos y está relacionada con σ_{if} por el parámetro de distribución angular o de asimetría β_{if} . La sección eficaz parcial diferencial, en la aproximación dipolar eléctrica viene dado por [23,32-33]

$$\frac{d\sigma_{if}(h\nu)}{d\Omega} = \frac{\sigma_{if}}{4\pi} \left[1 + \beta_{if}(h\nu) P_2(\cos\theta) \right] \quad (12)$$

donde $P_2(\cos\theta) \equiv \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)$ es el polinomio de Legendre de segundo orden, θ es el ángulo entre el vector de polarización de la luz incidente y el fotoelectrón.

Ahora, si en (12) se toma en cuenta el grado de polarización de la luz llegamos a [23]

$$\frac{d\sigma_{if}(h\nu)}{d\Omega} = \frac{\sigma_{if}}{4\pi} \left[1 + \frac{\beta_{if}(h\nu)}{4} [1 + 3p \cos(2\theta)] \right] \quad (13)$$

Donde p es la polarización

$$p = \frac{I_x - I_y}{I_x + I_y} \quad (14)$$

expresada en términos de las intensidades I_x e I_y del vector eléctrico a lo largo de los ejes correspondientes. Un valor de p igual a 1 nos dice que el componente eléctrico del campo electromagnético oscila en la dirección del eje x .

En el modelo desarrollado por Cooper y Zare [32] dentro del esquema LS y para transiciones de un electrón, el parámetro de asimetría tiene la forma

$$\beta = \frac{l(l-1)\sigma_{l-1}^2 + (l+1)(l+2)\sigma_{l+1}^2 - 6l(l+1)\sigma_{l-1}\sigma_{l+1} \cos(\delta_{l+1} - \delta_{l-1})}{3(2l+1)[l\sigma_{l-1}^2 + (l+1)\sigma_{l+1}^2]} \quad (15)$$

donde

$$\sigma_{l\pm 1} = r^2 \int_0^\infty R_{nl} r R_{kl\pm 1} dr = \int_0^\infty f(r)_{nl} r f(r)_{kl\pm 1} dr \quad (16)$$

son los elementos de matriz del operador de transición dipolar, mismos que son integrales radiales y δ_l son los corrimientos en fase de las ondas parciales respectivas. La extensión de este modelo a una formulación de acoplamientos independientes llevó a la teoría de transferencia de momento angular (AMT por sus siglas en inglés). Los resultados más importantes de esta formulación (AMT) son el hecho de que σ es esencialmente determinada por las propiedades radiales de los orbitales y funciones de onda involucradas en el proceso de fotoionización, mientras que β refleja básicamente el momento angular transferido [25].

Colocando los analizadores a 0 y 90 grados con respecto al plano del laboratorio, el parámetro de distribución angular β para cierto fotoelectrón (de cierta subcapa) puede ser obtenido a partir de un espectro de fotoelectrones (PES) de la relación de intensidades $R = I(0^\circ)/I(90^\circ)$ como [34]

$$\beta = \frac{4(R-1)}{[3p(R+1) - (R-1)]} \quad (17)$$

donde $I(0^\circ)$ e $I(90^\circ)$ son el número de electrones que detectan los analizadores en ese ángulo. El hecho de que $d\sigma/d\Omega$ (13) sea positivo para todos los valores de θ obliga a que los valores que puede tomar β estén comprendidos entre -1 y 2. En la Figura 2 se muestra un corte transversal sobre el plano xy de la distribución angular de fotoelectrones para $\beta = -1, 0$ y 2 . La radiación incidente está polarizada en x ($p=1$), en la Figura esto se representa como la flecha que apunta 0° y 180° . La dirección de propagación de la radiación es en el eje z (perpendicular al plano xy). Al rotar este plano xy hacia el frente tenemos la distribución angular en tres dimensiones. Así cuando $\beta=0$ (círculo) tenemos una esfera y en cualquier lugar que pongamos el analizador observamos la misma cantidad de fotoelectrones. Para $\beta=2$ (lóbulos horizontales) el máximo de emisión es en 0° y 180° con nula intensidad a 90° ; por último cuando $\beta=-1$ el máximo de emisión es a 90° mientras que a 0° no se registran cuentas .

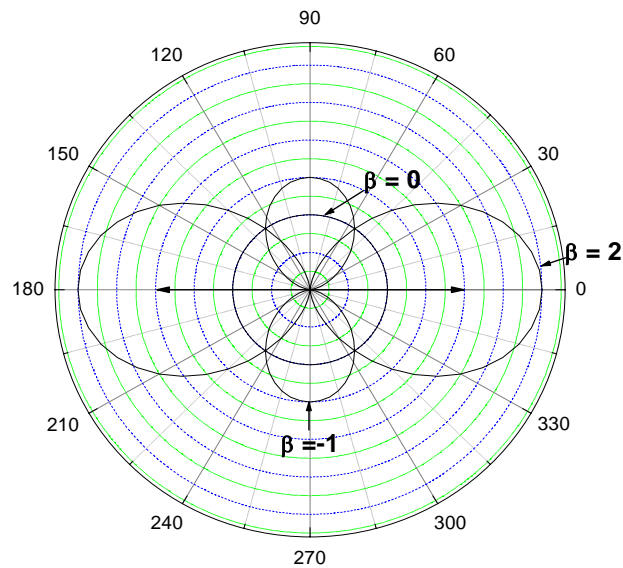


Figura 2. Parámetro de distribución angular para $\beta = -1, 0, 2$.

Existe un ángulo para el cual se registra la misma cantidad de fotoelectrones (ver Figura 2) independientemente del valor de β , conocido como **ángulo mágico**. El valor de este ángulo se puede deducir de la ecuación (13) tomando el término $[1 + 3p \cos 2\theta]$ e igualándolo a cero, donde para radiación polarizada en el eje x propagándose sobre el eje z ($p=1$) y despejando se encuentra que $\theta_{\text{mágico}} = 54.73^\circ$. Para determinar la sección eficaz parcial de fotoionización para cierto átomo los analizadores son generalmente colocados en este ángulo, de manera que pueden determinarse las secciones eficaces al ángulo mágico y entonces $d\sigma_n/d\Omega(54.73^\circ) = \sigma_{nl}/4\pi$.

Se dice que un electrón en un átomo (y el átomo mismo) está en un **estado excitado** cuando este se encuentra en un nivel energético superior al que se considera como base (Figura 3). El proceso de excitación que lo llevó ahí pudo ser de origen diverso (fotones, colisiones con electrones, iones o átomos). En este trabajo nos centraremos en el caso de luz como fuente de excitación y nos restringiremos a las reglas de selección para radiación dipolar eléctrica. Si la energía $h\nu$ de los fotones coincide con la diferencia en energía entre cierta subcapa y algún estado excitado del átomo se tendrá una **transición resonante**. Cuando el estado excitado está por encima del primer umbral de fotoionización (dado que estos estados son muy inestables frente a la ionización), se produce la emisión de un electrón (fotoelectrón). El proceso se conoce como **autoionización** y los estados excitados que lo originan son **estados autoionizantes** [15]. Los procesos de autoionización también respetan los balances de energía, paridad y momento angular.

Podemos extraer de un átomo neutro un electrón de capa interna si lo hacemos interactuar con fotones o partículas de energía suficiente, generando así un “hueco” y un ión positivo. A su vez, un posterior llenado de este hueco puede ser por un proceso radiativo (fluorescencia) o no radiativo. En el proceso de llenado no radiativo algún

electrón de capas superiores puede ocupar la vacancia. Si lo anterior ocurre el ión se libera del exceso de energía emitiendo otro electrón. La energía cinética de este segundo electrón corresponde a la que se obtiene del balance de energía. Este proceso de llenado no radiativo se conoce como *efecto Auger normal*, y el electrón eyectado se conoce como *electrón Auger* [35]. Al final de este proceso, el átomo queda doblemente ionizado en dos pasos. Por otro lado, si como resultado de una transición resonante a un estado ligado que está por encima del primer umbral de fotoionización se genera un hueco en capa interna, un posterior llenado del hueco ocurre por autoionización. En este caso el proceso de autoionización se conoce como *efecto Auger resonante*, y a diferencia del proceso *Auger normal* (en donde el átomo queda doblemente ionizado) el átomo queda ionizado una vez.

En la Figura 3 se muestra esquemáticamente un proceso de autoionización. Se aprecia una transición resonante en la que un átomo en su estado base (A_0) por interacción con radiación electromagnética $h\nu$ es llevado un estado resonante o excitado (A_0^{xx}), seguido por el decaimiento a niveles de energía del ión en su estado base o excitados (dando origen a la aparición de líneas satélites) con la correspondiente formación de un fotoelectrón (efecto Auger resonante) o de un electrón Auger. Los distintos caminos por los que puede decaer el estado excitado se conocen como *canales de salida*. Entonces en la Figura 3 tenemos tres canales de salida. En general, tanto en fotoionización como en procesos Auger, cualquier línea que no es la del estado base del ión se conoce como *satélite*. En la Figura 3 las líneas que corresponden a los fotoelectrones e_I y e_{III} son líneas satélites. El origen de las líneas satélites está relacionado directamente con efectos de correlación electrónica asociados con el proceso de fotoionización. Por esta razón su estudio se ha convertido en un área muy activa en la espectrometría de fotoelectrones.

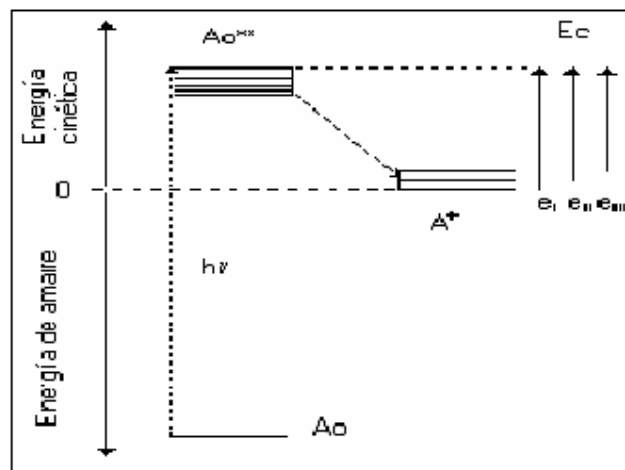


Figura 3. Autoionización o efecto Auger resonante. Las líneas continuas indican la posición de distintos niveles de energía del átomo en su estado base (A_0), los estados excitados (A^{**}) y del ión A^+ . Por interacción con radiación electromagnética un electrón es promovido a un estado excitado (A_0^{**}). Este posteriormente decae a cualquiera de los tres estados del ión disponibles (hay tres canales de salida abiertos). Si el estado excitado decae al estado base del ión será emitido un fotoelectrón con una energía cinética e_I de magnitud igual a la diferencia entre $h\nu$ y la energía de amarre característica del electrón. Si el estado excitado decae por cualquiera de los otros dos canales de salida abiertos el ión quedará en estados excitados o satélites.

El término “*proceso shake-(up, off, down)*” [36-37] es usado para describir los satélites que aparecen debido a una respuesta de los electrones pasivos que no alcanzan a relajarse completamente durante la fotoionización. Es dinámica en el sentido de que depende de la energía cinética del fotoelectrón [36] tendiendo a disminuir cerca del umbral, donde el apantallamiento cambia más lentamente. Otros aspectos de la correlación dinámica han sido abordados en el contexto de la interacción de configuraciones en el continuo (CSCI) por Manson [38].

El modelo shake-(up, off o down) está basado en la llamada “aproximación repentina” (*sudden approximation*). Esta teoría fue aplicada en un principio para cálculos de autoionización de átomos durante el decaimiento β y después para la aparición de líneas satélites en gases nobles irradiados con rayos x [36-37, 39 y referencias en ellos]. La idea central es que como consecuencia de la formación “repentina” de un hueco en capa interna hay un cambio en el campo coulombico. Este cambio en el campo coulombico da origen a configuraciones anómalas [37]. Para que el modelo sea valido, el fotoelectrón debe ser removido con gran velocidad y en principio debe cumplirse que

$$(E_f - E_i)t / \hbar \gg 1 \quad (18)$$

donde E_f es la energía del estado final, E_i es la energía del estado inicial, t es el tiempo durante el que el Hamiltoniano se transforma y \hbar es la constante de Planck (h) entre 2π . Sin embargo Carlson y Krause [36,39] encontraron que para shake-off en neón $(E_f - E_i)t / \hbar$ pudo ser incluso de 0.4.

Las probabilidades de transición por procesos tipo *shake* vienen dadas por [36,37,39]

$$P = \left| \int \psi_{nl}(Z) \psi_{n'l'}^*(Z + \Delta Z) d\tau \right|^2 = \left\langle \psi_{n'l'}(Z + \Delta Z) \middle| \psi_{nl}(Z) \right\rangle^2 \quad (19)$$

donde $\psi_{nl}(Z)$ y $\psi_{n'l'}(Z + \Delta Z)$ son las funciones de onda inicial y final del electrón pasando del orbital nl al $n'l'$ y ΔZ es el cambio en la carga nuclear efectiva. Si $n' > n$ tenemos un proceso tipo *shake-up* o *shake-off*, si $n' < n$ tenemos un proceso tipo *shake-down* y si $n' = n$ tenemos un *espectador* puro [40]. Una revisión teórica reciente del proceso puede encontrarse en el trabajo de Pattard et al [41].

Hemos visto que pueden llevarse acabo excitaciones resonantes de estados discretos a estados ligados por encima del primer potencial de ionización. Estos estados discretos embebidos en el continuo (resonancias) cuando decaen pueden hacerlo vía autoionización. El espectro de emisión de este tipo de procesos es asimétrico y tiene una forma característica conocida como perfil tipo Beutler-Fano [16]. Estos perfiles fueron observados primero por Beutler y después por Madden y Codling en su histórico trabajo sobre Helio, Neón y Argón [15]. En la Figura 4 se muestran perfiles tipo Beutler-Fano. El tratamiento teórico fue hecho por Fano y el perfil de línea se ha parametrizado [16] de la forma:

$$\sigma(h\nu) = \sigma_r \frac{(q + \varepsilon)^2}{1 + \varepsilon^2} + \sigma_0, \quad \text{con} \quad \varepsilon = \frac{h\nu - E_0}{\Gamma/2} \quad (20)$$

donde E_0 es la energía de la resonancia, $h\nu$ la energía de los fotones, Γ el ancho de la resonancia, q el parámetro de asimetría, σ_r y σ_0 las secciones eficaces de fotoionización resonante y no resonante respectivamente.

De manera más explícita el ancho de la resonancia (Γ) viene dado por [35]

$$\Gamma = \pi \langle \Phi^\varepsilon | H | \Psi^\varepsilon \rangle^2 = \pi V_\varepsilon^2 \quad (21)$$

Donde Φ^ε es la función de onda del estado discreto sin perturbar en el continuo, H el operador hamiltoniano y Ψ^ε la función de onda que describe los estados del continuo. De modo que V_ε es el elemento de matriz que representa las interacciones entre el estado discreto y el continuo. Por otro lado, el parámetro de asimetría q es de la forma [35]

$$q = \frac{\langle \Psi_g | \sum_\mu r | \Phi^\varepsilon \rangle}{\pi V_\varepsilon \langle \Psi_g | \sum_\mu r | \Psi^\varepsilon \rangle}, \quad (22)$$

donde el estado base para la transición Ψ_g es un estado discreto de menor energía que el estado discreto Φ^ε , o los estados del continuo Ψ^ε , y $\sum_\mu r_\mu$ es el operador dipolar o de transición. Podemos ver que q incluye el término de interacción entre el discreto y el continuo, y un cociente entre las amplitudes de probabilidad para transitar del estado base discreto (Ψ_g) al estado discreto (Φ^ε) en el continuo, o directamente a los estados del continuo (Ψ^ε). El máximo del perfil se interpreta como el resultado de la interferencia constructiva entre los estados discretos y continuos mientras que el mínimo como interferencia destructiva entre los mismos. Por último, para $q=0$ tenemos las resonancias conocidas como ventanas y para $q \gg 1$ se recupera el perfil de emisión “normal” o lorentziano. Con lo anterior en mente podemos identificar el primer término de $\sigma(h\nu)$ en (20) como el responsable de la forma del perfil Beutler-Fano.

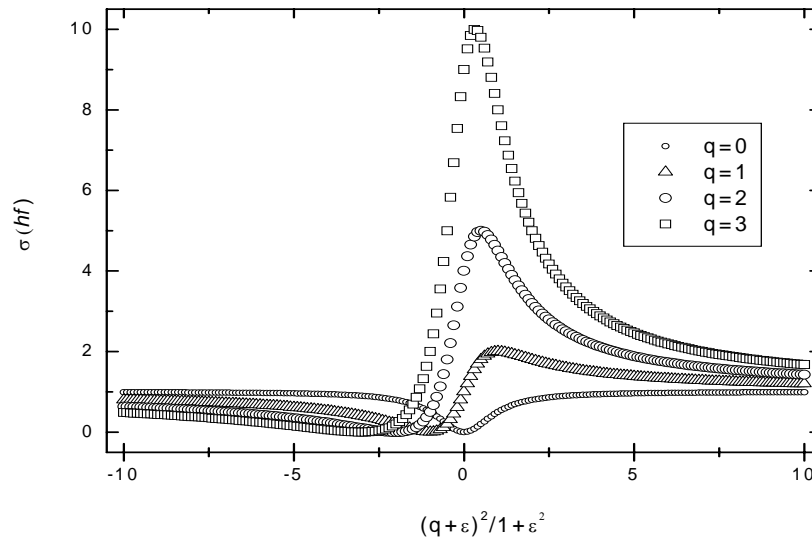


Figura 4. Perfil de Fano para diferentes valores de q .

Para continuar con nuestro entendimiento sobre los estados excitados de los átomos, es necesario introducir el concepto de serie de Rydberg.

Los estados electrónicos de un átomo cerca de un umbral de ionización tienen valores de n grandes y están muy cerca entre sí. Un electrón en uno de estos estados buscará liberarse de este exceso de energía decayendo, (según las reglas de selección) a estados con energía más baja. Si no hay canales autoionizantes abiertos el decaimiento será emitiendo un fotón de energía igual a la diferencia energética de los niveles involucrados. El decaimiento radiativo de los estados excitados subsecuentes hacia un mismo estado “base” da origen a las series de Rydberg. De manera inversa, estas series de Rydberg también se pueden observar si hacemos excitaciones resonantes continuas convergentes a umbrales de ionización. Usualmente por encima de estos umbrales se observan satélites cuyo origen ha sido atribuido a procesos tipo shake-up [42].

En la Figura 5 se muestra una serie de Rydberg de Kr $4p_{1/2}$ tal como se observa en el laboratorio. Se obtuvo barriendo la energía de los fotones provenientes de un ondulator con un monocromador de rejilla plana. Estas resonancias en kriptón son tan bien conocidas que sus posiciones se utilizan para calibrar la escala de energía de los fotones durante las corridas de experimentos. Podemos ver que los picos en el espectro presentan perfil tipo Beutler-Fano; en este espectro hay dos series presentes la ns y la nd .

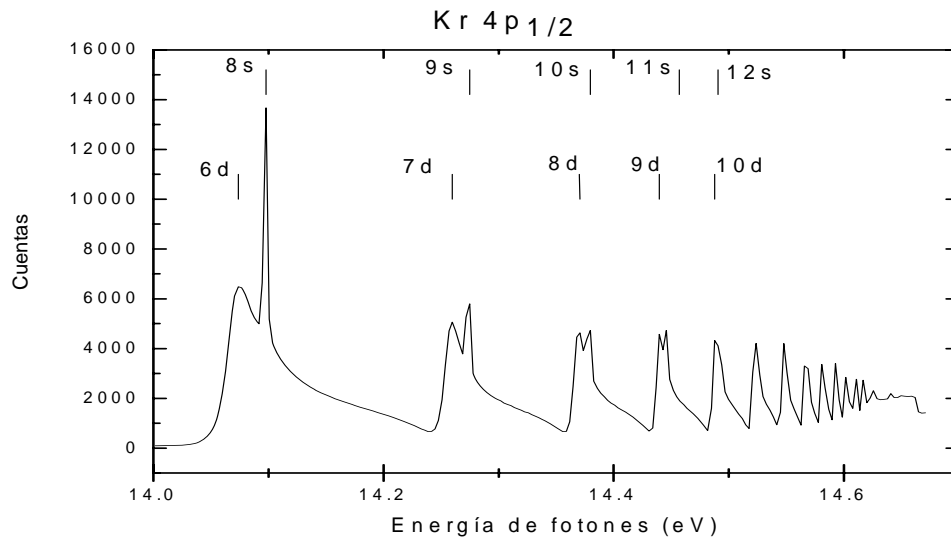


Figura 5. Series de Rydberg ns y nd en kriptón tomadas en la línea PGM-B del SRC de la Universidad de Wisconsin y utilizadas para calibrar la energía de fotones.

A partir de la posición en energía de las resonancias que integran una serie es posible estimar el valor de la energía necesaria para desligar el electrón convergente del átomo. Esto se hace graficando $1/n^*$ contra la posición en energía de las resonancias. La recta que se forma corresponde a una cuya pendiente es el valor del Rydberg del átomo en cuestión con masa reducida μ y ordenada al origen igual al valor de la energía de amarre E_b del electrón que se promueve en dicha serie

$$E = -\frac{\mu}{2\hbar^2} \left(\frac{Z_{ef} e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^{*2}} + E_b, \quad (23)$$

donde n^* es conocido como número cuántico efectivo y es en realidad igual al número cuántico principal n menos un parámetro δ conocido como defecto cuántico ($n^* = n - \delta$), $Z_{\text{ef}} = Z - N + 1$ es la carga nuclear efectiva que ve el electrón promovido, Z es el número atómico y N es el número de electrones presentes en el átomo. El defecto cuántico δ es una corrección que se hace a las ecuaciones que describen el comportamiento de los átomos de Rydberg para reflejar el hecho de que los electrones de las capas internas no apantallan enteramente su carga correspondiente en el núcleo. El defecto cuántico se debe a la parte no coulombica de la interacción electrón-núcleo. Algunas de sus propiedades son que: aparece en átomos no hidrogénicos, su valor se incrementa con Z , es función del momento angular orbital (l) y decrece para l grandes [14].

En este capítulo se han dado los conceptos teóricos esenciales para comprender la técnica de espectrometría de electrones usando radiación sincrotrónica. Así, hemos visto que el efecto fotoeléctrico nos permite profundizar en el estudio de la estructura de la materia, y que la ecuación de Einstein para el fotoefecto es la ecuación central en nuestros estudios. Hemos visto que por interacción con radiación electromagnética en un átomo pueden darse transiciones de electrones de niveles discretos a continuos y a discretos embebidos en el continuo (excitaciones resonantes), en ambos casos respetando los balances de energía, paridad y momento angular. Vimos también que estos estados excitados decaen preferentemente por autoionización o efecto Auger resonante dando origen a picos asimétricos con un perfil característico conocido como de Beutler-Fano, y, en algunos casos la aparición de líneas satélites en los espectros de fotoelectrones. También hemos visto que estas líneas satélites son de alguna manera prueba directa de la correlación electrónica. Y que, en el dominio de la espectrometría de fotoelectrones usando radiación sincrotrónica las propiedades dinámicas que con mayor frecuencia se determinan en los sistemas atómicos son la sección eficaz de fotoionización y el parámetro de distribución angular de fotoelectrones.

En los tres capítulos siguientes (capítulos 2, 3 y 4) se trata todo lo referente al dispositivo experimental. Nuestros experimentos son de espectroscopía. La espectroscopía como sabemos es una ciencia que se avoca al estudio de la interacción entre la radiación electromagnética y la materia ya sea como átomos, moléculas o sólidos. El tipo de información que se obtiene de la materia al hacerla interaccionar con la radiación electromagnética depende de la energía de los cuantos de luz. Nosotros hacemos espectroscopía con fotones con energías desde 8 hasta cientos de eV, esto corresponde a la región del ultravioleta de vacío - rayos X blandos. Con estas energías nosotros podemos estudiar la estructura electrónica de la materia, en particular las capas de valencia. Los dispositivos donde se hacen los experimentos espectroscópicos se conocen como espectrómetros. Todos los espectrómetros están compuestos por tres elementos esenciales: una *fente de radiación* que provee los fotones, una región donde ocurre la interacción entre la radiación y la materia conocido como *celda*, y un *sistema de detección* que de alguna forma (directa o indirecta), mide los cambios en alguna(s) propiedades de la radiación o la materia después de la interacción entre ambas. No debemos olvidar que la óptica es la componente que nos permite establecer la comunicación entre la radiación electromagnética, la materia y nuestro sistema de detección. Pasemos a revisar los componentes de nuestro dispositivo experimental.

2.0 Fuente de radiación.

Radiación Sincrotrónica.

Es un principio de la electrodinámica que las cargas aceleradas emiten radiación electromagnética. Radiación sincrotrónica es radiación electromagnética producida por electrones que se mueven a velocidades comparables a la de la luz sobre una trayectoria curva de radio grande (desde metros hasta decenas de metros). En un principio la radiación sincrotrónica se identificó como un problema que limitaba la energía que podían alcanzar las partículas en los aceleradores. La primera vez que se observó experimentalmente fue en 1946 en los laboratorios de General Electric [43]. Un modelo teórico que explicara su origen y características se volvió indispensable. Debido a que las velocidades alcanzadas por las partículas eran cercanas a la de la luz, el tratamiento teórico del problema debía incluir aspectos relativistas. El problema fue abordado por varios teóricos, entre ellos Schwinger, Sokolov y Ternov [44-46]. Después, en el período de finales de los 40 a finales de los 60, varios grupos investigaron la distribución espectral y otras propiedades de esta radiación en diferentes aceleradores de electrones. De ellos se encontró una buena correspondencia con las predicciones teóricas. Hasta finales de los 50 el estudio de la radiación sincrotrónica era motivado por su impacto negativo en la tecnología de los aceleradores de electrones. Sin embargo, en 1956 Tomboulion y Hartman [47] iniciaron una nueva disciplina de investigación al utilizar esta radiación para hacer espectroscopía de absorción en la región del ultravioleta lejano - rayos X blandos. Su potencial se volvió evidente, pues aunque para la producción de fotones en el ultravioleta y hasta rayos X duros existen diferentes fuentes convencionales disponibles [ver Figura 18] hay regiones entre éstas que no pueden ser cubiertas [ver Figura 18]. Se deseaba entonces una fuente continua, sintonizable, con alto brillo e intensidad, y esta es precisamente la radiación sincrotrónica. En esta región del espectro (desde el ultravioleta de vacío hasta rayos X duros) la longitud de onda de los fotones es comparable al tamaño de las moléculas, de las longitudes de enlace de los átomos en ellas, distancias interatómicas en cristales, de proteínas e incluso virus. En otras palabras, la longitud de onda tiene el tamaño adecuado para interactuar con ellos. Por otro lado, desde el punto de vista energético,

en este intervalo de energía están comprendidas las energías de amarre de los electrones de las capas internas, de enlace y de valencia de dichos sistemas. De manera que, con estos fotones podemos estudiar su estructura electrónica. El estudio de la estructura electrónica de estos sistemas y su comportamiento al variar de manera continua la energía de los fotones es importante porque, a partir de ella, podemos entender muchas de sus propiedades físicas y químicas. En particular, el estudio de las dinámicas de fotoionización es indispensable, para entender la estructura de la materia de manera más profunda. En la Figura 6 se muestra un esquema simple de lo expresado anteriormente.

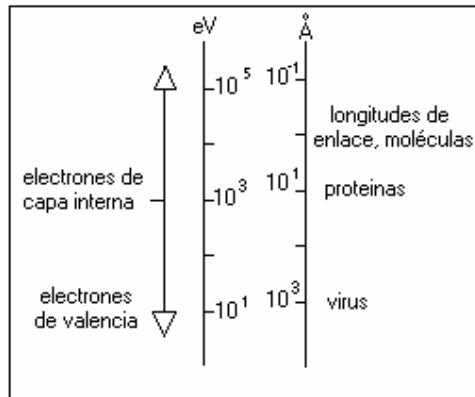


Figura 6. Argumentos cualitativos sobre la importancia científica de los rayos X blandos y duros. Los fotones en este intervalo tienen energías comparables a los electrones de valencia y capa interna de átomos, moléculas y sólidos. Sus longitudes de onda son comparables al tamaño de importantes sistemas en estudio como sistemas biológicos y enlaces en moléculas y sólidos.

Así la radiación sincrotrónica, por sus características (que se discutirán más adelante) y particularmente por tener distribución espectral continua desde la región de las microondas hasta los rayos X duros, se ha convertido en una herramienta indispensable con amplias aplicaciones en ciencia y en tecnología.

La radiación sincrotrónica se produce en nuestro planeta en anillos de almacenamiento. Nuestros experimentos fueron conducidos en el anillo Aladdin del Synchrotron Radiation Center de la Universidad de Wisconsin. Por ello, se presentan de manera general los elementos esenciales que constituyen un anillo de almacenamiento y en particular los parámetros característicos de Aladdin.

2.1 Operación de un anillo de almacenamiento para producción de radiación sincrotrónica.

En la Figura 7 se puede ver un esquema simple de la estructura de un *anillo* (A), con su *sistema de inyección* (SI), su *cavidad de radiofrecuencia* (RF), y las *líneas* (L) por las que se extrae la radiación del anillo. Las cabezas de flecha representan electrones (e) orbitando el anillo, aunque también pueden usarse positrones. El proceso es el siguiente: primero una corriente de electrones en forma de “paquetes de electrones” es generada, acelerada e inyectada en el anillo por lo que se conoce como *sistema de inyección* (SI). Los electrones inyectados en el *anillo* [que es un tubo metálico cuyo interior está a ultra alto vacío (10^{-10} – 10^{-11} Torr)] circulan a lo largo de una trayectoria cerrada emitiendo radiación sincrotrónica en los puntos en los que se aceleran.

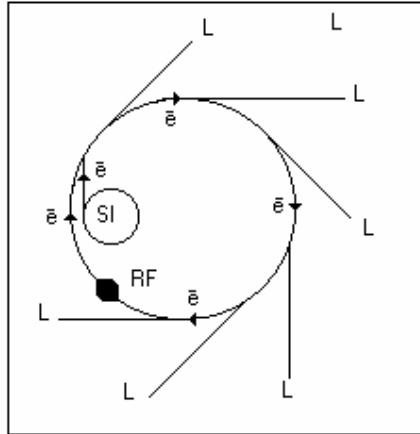


Figura 7. Se muestra un diagrama esquemático de los componentes esenciales que constituyen el anillo de almacenamiento. El sistema de inyección SI genera, preacelera e inyecta los electrones (e) al anillo. En el anillo estos son acelerados a velocidades relativistas y así se mantienen por varias horas. La energía que pierden los electrones por emisión de radiación es restaurada por la cavidad de radiofrecuencia RF. Las líneas L es por donde se puede extraer radiación útil hacia las estaciones de trabajo, lugar donde se conducen los experimentos.

Esta emisión se dá precisamente en los *imanes de doblado* (id) (Fig. 8) que son los encargados de curvar la trayectoria de los electrones. Como resultado de esta emisión de radiación los electrones disminuyen su velocidad. La *cavidad de radiofrecuencia* (RF) es la encargada de restaurar esta energía aplicando un campo eléctrico de frecuencia angular ω_0 igual a la frecuencia angular ω a la que se mueven los electrones alrededor del anillo:

$$\omega = \frac{qc^2 B(t)}{\varepsilon(t)} = \omega_0 \quad (24)$$

condición conocida como resonancia. En (24) q es la carga de la partícula, c la velocidad de la luz, $\mathbf{B}(t)$ y $\varepsilon(t)$ son el campo magnético y la energía total de la partícula respectivamente. Esta relación es mantenida incrementando poco a poco el campo $\mathbf{B}(t)$ de los imanes de doblado a medida que la energía total de la partícula $\varepsilon(t)$ se incrementa.

El vacío es esencial para el funcionamiento óptimo del anillo. Sin un buen vacío la corriente de electrones decaería rápidamente y por tanto la intensidad de la radiación emitida. El *sistema de vacío* en general está formado por bombas turbomoleculares, iónicas, criogénicas, estaciones de bombeo diferencial, sellos, y válvulas tanto electrónicas como manuales. Son también componentes de un anillo de almacenamiento: un *sistema de control* y un *sistema de protección* para fugas de radiación gamma o neutrones hacia fuera del anillo.

En la Figura 8 se muestra con cierto detalle una sección del anillo y una “línea” (L1). Ahí se aprecia una representación de la instrumentación que hace posible la producción y canalización de radiación sincrotrónica. En ella (m) representa *imanes cuadrupolares de enfocamiento*. Estos arreglos de imanes actúan sobre los electrones que se alejan de la orbita de referencia para devolverlos a ella. El conjunto de imanes en el anillo se

conoce como “la red”. Aladdin tiene dos “redes de imanes”, la conocida como “red base” y la conocida como “red de baja emitancia” o LF15.

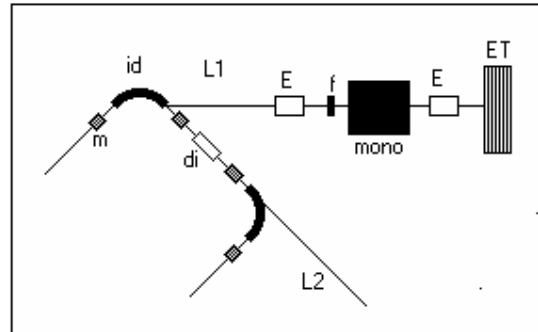


Figura 8. Esquema que representa con cierto detalle una sección de un sincrotrón y una línea. El dibujo no es a escala. La sección del anillo incluye los imanes de enfoque (m), imanes de doblado (id) y un dispositivo de inserción en un tramo recto (di). L1 representa una línea por la que se extrae la radiación producida en el imán de doblado (id), (E) representa espejos de enfoque y reenfoque, (f) un filtro, (mono) el monocromador y (ET) la estación de trabajo. La segunda línea L2 solo se muestra parcialmente, por ella se extrae la radiación proveniente del dispositivo de inserción (di).

La red base puede operar a energías de 0.80 y 1.0 GeV, mientras que la LF15 únicamente a 0.80 GeV. Cada red define las características de los paquetes de electrones que circulan en el anillo. Así la red LF15 ó de baja emitancia (como se verá más adelante) enfoca mejor el haz de electrones haciendo los paquetes mas compactos. Lo anterior se refleja en una producción más densa de fotones. Actualmente es común encontrar en los tramos rectos del anillo (Fig 8) *dispositivos de inserción* (di). Estos pueden ser *onduladores* o *serpenteadores*, ambos son arreglos periódicos de imanes con polaridades alternadas que modifican la trayectoria de los electrones haciéndolos oscilar en el plano del anillo. La emisión de radiación se da en todos los puntos de esta trayectoria oscilante. En particular es en los máximos y mínimos de esta, donde la emisión ocurre en la dirección del eje de propagación de los electrones. Aladdin tiene cuatro onduladores en sus correspondientes secciones rectas. La radiación que emiten los *onduladores* (di) es un poco diferente a aquella producida por los *imanes de doblado* (id). De hecho, como veremos, es bastante más intensa y de apertura angular más estrecha. La estructura periódica de imanes equivale a tener varios imanes de doblado emitiendo cada vez que pasa el paquete de electrones. En la misma Figura 8 (mono) representa el monocromador que nos permite seleccionar la energía de los fotones provenientes del imán de doblado (id). El *sistema de control de la línea* está compuesto por una o dos computadoras que muestran la presión en la línea, operan el monocromador y algunas válvulas de seguridad que protegen al anillo. En general (E) son *espejos de enfoque y reenfoque* que preservan la alta calidad del haz de fotones a lo largo de la línea hacia las estaciones de trabajo. La *estación de trabajo* (ET) es el lugar en el que se conducen los experimentos. Usualmente cada estación de trabajo es diseñada y construida para una línea de investigación determinada, también cada una de ellas en el anillo cuenta con su propio *sistema de adquisición de datos*. Imágenes reales de estos dispositivos se pueden encontrar en las páginas electrónicas: www.src.wisc.edu , www.aps.anl.gov y www.als.lbl.gov entre otras.

Entonces, como se puede intuir, un anillo de almacenamiento para producción de radiación sincrotrónica es un complejo dispositivo en el cual se hacen circular dentro de una trayectoria cerrada paquetes de electrones a energías relativistas durante varias horas y en condiciones de ultra alto vacío. El haz de radiación no se mantiene indefinidamente debido a un continuo descenso en la corriente de electrones por colisiones con las paredes del anillo y con gases residuales. En la mayoría de los anillos, cuando la intensidad del haz deja de ser óptima se inyecta nuevamente la corriente de electrones y se inicia un nuevo *ciclo de operación*. La duración de este ciclo es normalmente de entre 6 y 12 horas dependiendo del anillo. Generalmente en estos anillos se “mata” la corriente residual de electrones circulante y se inyecta la nueva corriente para ser acelerada en el sincrotrón. Aladdin es de este tipo y su ciclo de operación es de 6 horas.

Los parámetros de un anillo determinan las características de su radiación sincrotrónica. Describiremos cualitativamente los parámetros más importantes en la operación básica del anillo dando algunas expresiones útiles, presentando en cada caso los correspondientes para Aladdin.

2.2 Parámetros en el anillo de almacenamiento “Aladdin”.

La corriente en el anillo usualmente es expresada en miliamperes y está relacionada con el número total de electrones circulando en el anillo. Sus valores típicos van desde 10 hasta 500 mA. Esto corresponde aproximadamente a un número de entre 10^{11} - 10^{12} electrones. Usualmente lo que los anillos reportan en sus características de operación en lo concerniente a este renglón es un promedio de la corriente de electrones después de la aceleración. En Aladdin el promedio de corriente después de aceleración es 280 mA para una energía de 0.8 GeV en la “red normal” y la LF15. Para Aladdin a 1 GeV la corriente promedio después de inyección es de 180 mA. Esta última es mas baja ya que está limitada por el calentamiento de la cámara de vacío [48]. En Aladdin el valor de la corriente entre cada inyección es monitoreado de manera continua y expuesto en pantallas a la vista de los usuarios. Las corrientes típicas para una energía de 800 MeV pasan de 280 mA a 90 mA en un periodo de seis horas. Finalmente, para Aladdin con 225 mA de corriente y un perímetro de 88.9 m tenemos circulando del orden de 4.2×10^{11} electrones.

La energía a la que se inyectan los electrones. En algunos casos la energía a la que se inyectan los electrones iguala la energía final (E) a la que circulan en el anillo. En otros sistemas es menor. Generalmente la energía de inyección está en el intervalo de $1/3 - 2/3$ de la energía final (E). Sin embargo, existen algunos pocos anillos en los que la energía de los electrones cuando se inyectan es un décimo de la energía final. En Aladdin la corriente de 280 mA es inyectada por un microtrón a una energía de 108 MeV.

La energía a la que circulan los electrones. Cada electrón circula a una energía (E) dada dentro del anillo. Esta usualmente se expresa en MeV o GeV. E varía desde 100 MeV para anillos optimizados para ultravioleta de vacío hasta varios GeV en anillos optimizados para rayos X duros. Existe una relación entre la energía del anillo E y la

distribución espectral de emisión. La energía E es usualmente definida en función del parámetro γ [48]

$$\gamma = \frac{E}{m_0 c^2} = \frac{E}{.511 \text{ MeV}} = \left[1 - \left(\frac{v}{c} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (25)$$

donde m_0 es la masa del electrón, c es la velocidad de la luz en vacío y v la velocidad del electrón. Para un electrón $\gamma \approx 1957$ E(GeV). En la actualidad es común encontrar factores $1500 \leq \gamma \leq 12000$ que corresponden a $0.8 \leq E \text{ (GeV)} \leq 6$ [22]. Usualmente los anillos de almacenamiento tienen una energía nominal de operación. Aladdin por ejemplo puede operar con energías de 0.8 GeV (con la red base de imanes o con la red de baja emitancia LF15) y de 1 GeV (red base). Para estas energías los valores correspondientes de γ son 1565 (0.8 GeV) y 1957 (1 GeV). Sin embargo, en la práctica se encuentra que algunos electrones tienen ligeramente más energía y otros un poco menos de la nominal. Esta dispersión en energía afecta el tamaño radial del haz; y se debe a que los imanes de doblado curvan de manera diferente la trayectoria de los electrones con diferentes energías. También provoca oscilaciones longitudinales alrededor del centro nominal de paquete que son conocidas como “oscilaciones de sincrotrón”. Usualmente un sobrevoltaje en la cavidad de radiofrecuencia tiende a reducir esta dispersión. Así, existe un parámetro de dispersión en la energía que se expresa como $\Delta E/E$. Para Aladdin tenemos $\Delta E/E$ (red base, 0.80 GeV) = 4.5×10^{-4} , $\Delta E/E$ (LF15, 0.80 GeV) = 4.7×10^{-4} y $\Delta E/E$ (red base, 1.0 GeV) = 5.6×10^{-4} .

El número de paquetes de electrones que circulan en el anillo (N_b) y la longitud de cada paquete ($\sigma_L = c\sigma_\tau$). El número de paquetes de electrones circulando (N_b) está entre 1 y 100. La longitud del paquete puede expresarse como longitud temporal σ_τ , que es el tiempo (en nanosegundos) necesario para que un paquete pase por un punto de la orbita. La longitud del paquete también puede expresarse como una longitud espacial $\sigma_L = c\sigma_\tau$ en metros o centímetros. La mayoría de los anillos pueden ser operados en varias modalidades, particularmente con diferentes N_b . El número de paquetes de electrones (N_b) junto con el perímetro del anillo determinan la frecuencia de los pulsos de radiación sincrotrónica emitida por el anillo. Para Aladdin tenemos un perímetro de 88.9 metros, de donde el periodo de revolución para un paquete de electrones es de 297 ns. Con este dato y sabiendo que el periodo entre cada paquete de electrones en el anillo [49] es de 19.8 ns, podemos deducir que el número de paquetes de electrones circulando en el anillo es 15. Así que cada 19.8 ns tenemos un pulso de radiación sincrotrónica con una estructura temporal que depende también de la longitud del paquete de electrones y la densidad del mismo. Por último, para Aladdin operando a 0.80 GeV con la red base se tiene que $\sigma_L = 77$ mm ($\sigma_\tau = 257$ ps) y con la de baja emitancia (LF15) $\sigma_L = 35$ mm ($\sigma_\tau = 117$ ps). Mientras que para 1.0 GeV (red base) tenemos $\sigma_L = 103$ mm ($\sigma_\tau = 343$ ps).

El tamaño del haz de electrones (σ_x y σ_z). Es usualmente expresado en término de los parámetros σ_x y σ_z . Estos parámetros son los anchos del haz de electrones en las direcciones correspondientes en la Figura 9. En ella “x” está en el plano de la órbita y es perpendicular a la dirección de propagación “s” en cada punto; mientras que “z” es perpendicular a ambas apuntando hacia arriba fuera del plano de la órbita. Una definición más precisa de los parámetros σ es en términos de la desviación estándar del número de electrones a lo largo de cada coordenada. Estos parámetros σ usualmente son

dados en milímetros o micrómetros y sus valores cambian a lo largo del anillo, con la energía de operación del anillo y con el tipo de red de imanes que se use. Valores típicos están entre 0.1 y 1 mm.

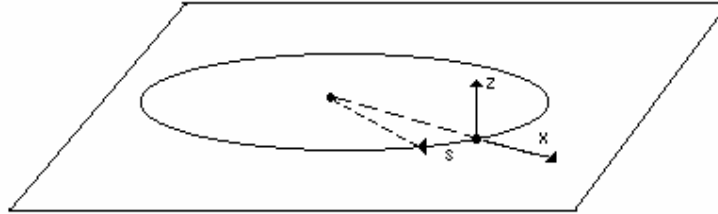


Figura 9. El sistema de coordenadas (x,z,s) usado para describir el movimiento de los electrones en un anillo de almacenamiento.

Para Aladdin tenemos que a 0.80 GeV el paquete de electrones en la “red base” y en la de baja emitancia (LF15) tiene respectivamente las siguientes dimensiones: $\sigma_x = 500 \mu\text{m}$ y $\sigma_z = 85 \mu\text{m}$ (Figura 10), $\sigma_x = 175 \mu\text{m}$ y $\sigma_z = 80 \mu\text{m}$. Mientras que para la red base, cuando el anillo opera a 1 GeV $\sigma_x = 625 \mu\text{m}$ y $\sigma_z = 180 \mu\text{m}$.

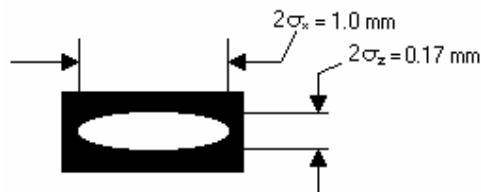


Figura 10. Representación de la sección eficaz de un paquete de electrones que circulan en el anillo Aladdin en la “red base” a una energía de 0.80 GeV.

Claramente el tamaño del haz de electrones es menor en la dirección vertical (σ_z). Esto se debe esencialmente a que los imanes de doblado actúan en la dirección radial y a que la emisión de radiación sincrotrónica también ocurre en la misma dirección, afectando las oscilaciones radiales más que las verticales.

El tamaño del paquete de electrones se controla con imanes cuadrupolares de enfocamiento. Estos imanes enfocan el paquete de electrones solo en una dirección y en un plano (el de la órbita o el perpendicular a ella), de modo que si enfocan en una dirección en un plano desenfocan en la misma dirección en el plano perpendicular. Para resolver este inconveniente se colocan alternadamente imanes que enfocan en la dirección vertical con imanes que enfocan en la dirección horizontal. Este arreglo de imanes se conoce como “gradientes alternantes”. La red de imanes consiste de un número entero de “células” iguales, cada una conteniendo imanes de doblado e imanes de enfocamiento alternados. Aladdin tiene 4 células de imanes.

Las emitancias del haz ϵ_x y ϵ_z . Esencialmente estos parámetros definen el tamaño del haz en un espacio de cuatro dimensiones. Las cuatro coordenadas son: x , z , $x' = dx/ds$ y $z' = dz/ds$, donde x y z son dos coordenadas del espacio real, s es la coordenada angular a lo largo de la órbita (Figura 11) y las coordenadas x' (en el plano del anillo) y z' (en el plano perpendicular al plano del anillo) representan entonces los ángulos entre la

trayectoria de los electrones y la orbita ideal. Los parámetros que describen el tamaño del haz del paquete de electrones en términos de los ángulos x' y z' son $\sigma_{x'}$ y $\sigma_{z'}$ respectivamente.

El movimiento del (los) paquetes de electrones se describe en un espacio de cuatro dimensiones en vez de uno de dos porque al moverse en el anillo, la posición x de cada partícula está correlacionada con su ángulo x' , análogamente z y z' . De manera que la descripción solo en el espacio real nos daría una visión parcial del movimiento de las partículas dentro del anillo. A este espacio de cuatro dimensiones (x, z, x', z') se le conoce como espacio fase [48].

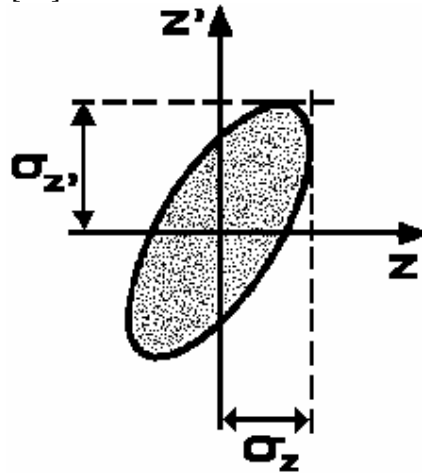


Figura 11. Elipse de las emitancias.

Debido a la correlación $x-x'$ para cada punto s del anillo es posible identificar una región en el plano xx' con su fracción dada de electrones, en otras palabras con su desviación estándar. Puede identificarse la misma región de manera independiente para el plano zz' ; estas regiones de las que hablamos tienen forma elíptica. En la Figura 11 se muestra tal elipse en el plano zz' . Aunque las elipses $x-x'$ y $z-z'$ cambian a lo largo del perímetro del anillo sus áreas no. Precisamente estas áreas son las emitancias ϵ_x y ϵ_z , las que por cierto se dan en metro-radianes (m-rad) estando los valores típicos comprendidos entre $10^{-7} - 10^{-10}$. Como el valor de las emitancias no cambia a lo largo del anillo define mejor el “tamaño” del haz de electrones que σ_x , $\sigma_{x'}$, σ_z y $\sigma_{z'}$ que cambian con s .

El **radio de curvatura** (ρ) de la trayectoria de los electrones es determinado por los imanes dipolares de doblado (no es el radio de la cámara de vacío del anillo). Cuando pasa el electrón por la trayectoria curva de radio ρ la fuerza centrípeta es igual a la fuerza de Lorentz del campo magnético [50]

$$m\vec{a} = \frac{mv^2}{\rho}(-\hat{\rho}) = q\vec{v} \times \vec{B} \quad (26)$$

provocando la curvatura en la trayectoria del electrón. Lo anterior es válido para velocidades no relativistas. Para velocidades relativistas (como en nuestro caso), el radio ρ es usualmente del orden de metros y está relacionado con la energía de los

electrones E , con el campo magnético B de los imanes dipolares de doblado y una constante C según [48]:

$$\rho[m] = \frac{CE[eV]}{B[T]} = \frac{E[eV]}{0.300B[T]} \quad (27)$$

Aladdin tiene 12 imanes de doblado todos ellos con un radio magnético de 2.083 m. Es importante no confundir este radio magnético de los imanes con el radio promedio del anillo, el cual por cierto para Aladdin es de 14.1 m.

El **tiempo de vida del haz** (τ_b) es un parámetro muy importante que describe el decaimiento de la corriente de electrones circulante en el anillo. La definición comúnmente aceptada es que τ_b corresponde al tiempo durante el cual la corriente decae a $1/e$ de su valor original al inicio del ciclo. En la realidad el decaimiento de la corriente no sigue un comportamiento exponencial, mas bien varía con el tiempo. Existen dos efectos que limitan fuertemente la vida del haz: la dispersión de electrones en la cámara del anillo por partículas gaseosas residuales y el efecto Touschek. El efecto Touschek es causado por la dispersión electrón–electrón dentro de cada paquete. Estas dispersiones de electrones provocan oscilaciones de los electrones dentro del paquete. Estas oscilaciones cambian el momento longitudinal de los electrones, que a su vez modifica el tiempo al cual entra el electrón de referencia a la cavidad de radiofrecuencia. Esto sin embargo se puede corregir haciendo que el voltaje que se aplica a los electrones en la cavidad de radiofrecuencia sea mayor del necesario para compensar la energía perdida por emisión de radiación en el electrón de referencia. Se ha encontrado que el efecto Touschek es más significativo para energías por debajo de 1 GeV[48].

Retomando, los valores de τ_b son del orden de horas y la duración de un ciclo de operación es generalmente varias veces τ_b . Aladdin tiene un tiempo de vida de 4 horas cuando opera con cualquiera de las dos redes a 0.80 GeV para una corriente de 250 mA al momento de inyección. Mientras que cuando opera a 1 GeV el tiempo de vida es de 9 horas para 180 mA a la inyección.

La **presión** en la cámara de vacío del anillo. Este parámetro es esencial en el funcionamiento del anillo, principalmente para mantener el haz. Usualmente la presión en el anillo Aladdin está en el intervalo de 10^{-10} - 10^{-11} torr. Anteriormente vimos que las partículas de gases residuales y el efecto Touschek son los principales limitantes de la vida media del haz. El primer mecanismo puede ser abatido mejorando el vacío en el anillo. Esto no es del todo fácil ya que la radiación sincrotrónica emitida por los electrones estimula fuertemente el desprendimiento de átomos y gases adsorbidos en las paredes de la cámara. Empíricamente se ha encontrado que una distribución de bombas de vacío a lo largo del anillo, algunas especialmente colocadas cerca de los imanes de doblado para explotar su acción, un calentamiento externo intensivo para remover compuestos volátiles, grasa y gases adheridos al interior del anillo, el uso de ciertos materiales y geometrías ayuda a mejorar notablemente el vacío. Por otro lado, los iones residuales se eliminan aplicando pequeños voltajes por medio de electrodos distribuidos a lo largo del anillo. Este voltaje tiene un efecto despreciable sobre los electrones que remueven a velocidades relativistas. Desafortunadamente los mecanismos que dan origen al desprendimiento de gases adsorbidos a superficies por influencia de radiación no están completamente entendidos [48].

La **energía total perdida por vuelta** de cada electrón (δE) debida a la emisión de radiación sincrotrónica. Esta varía de anillo a anillo y su valor puede oscilar entre 0.01 – 1000 keV. Esta energía debe ser restaurada por la cavidad de radiofrecuencia. La relación que describe la energía perdida por un electrón que circula en el anillo por vuelta es [48]:

$$\delta E(\text{keV}) \approx 88.5 \frac{E^4(\text{GeV})}{\rho(\text{m})} \quad (28)$$

de modo que en Aladdin tenemos que la energía total perdida por vuelta es $\delta E = 42.48$ keV y $\delta E = 17.40$ keV para energías de operación de 1 GeV y 0.80 GeV respectivamente.

La **frecuencia (ω_{rf})** de la cavidad de radiofrecuencia. Una vez inyectada la corriente de electrones en el anillo comenzarán a acelerarse poco a poco. La condición de resonancia para velocidades relativistas (24) expresa que la frecuencia angular (ω) a la que se mueven las partículas dentro del anillo debe ser igual a la frecuencia angular del campo eléctrico (ω_0). Al principio la relación (24) es mantenida incrementando poco a poco el campo $\mathbf{B}(t)$ de los imanes de doblado a medida que la energía de la partícula $\varepsilon(t)$ se incrementa. Alcanzada la energía de operación, la cavidad de radiofrecuencia debe restaurar a los electrones circulantes en el anillo la energía que perdieron por emisión de radiación. La siguiente expresión [48]:

$$\omega_{\text{rf}} = h_A \left(\frac{2\pi}{T_0} \right) \quad (29)$$

relaciona la frecuencia de la cavidad ω_{rf} , con una constante h_A (característica para cada anillo) conocida como el número armónico del anillo y con T_0 que es el tiempo necesario para que un electrón de una vuelta completa dentro del anillo (tiempo de revolución). Entonces, para que el paquete de electrones al llegar a la cavidad de radiofrecuencia sea acelerado, debe cumplirse que llegue en el momento exacto en el que la dirección y magnitud del campo eléctrico son los apropiados para producir la fuerza de aceleración necesaria para restaurar la energía que perdieron por emisión de radiación. Así, después de una vuelta el paquete de electrones al entrar nuevamente en la cavidad de radiofrecuencia debe encontrar el mismo campo eléctrico. Para electrones viajando a velocidades muy cercanas a la de la luz T_0 es del orden de 10^{-7} - 10^{-6} segundos. Estos periodos corresponden en frecuencia precisamente al orden de las ondas de radio, de ahí el nombre de la cavidad. Puede haber h_A paquetes de electrones (N_B) igualmente espaciados circulando en el anillo, lo cual implica que en los h_A máximos del campo eléctrico se acelera un paquete de electrones. También puede ocurrir que $N_B \leq h_A$ lo cual querría decir que el campo eléctrico se aplicaría a paquetes ficticios. Pero invariablemente el pulso se aplica cada T_0/h_A segundos. Lo anterior describe el estado ideal de operación. En la realidad no todos los electrones del paquete llegan a la cavidad en el momento preciso debido a la dispersión en energía y a oscilaciones transversales de los mismos electrones dentro de cada paquete al rededor de la orbita de referencia (conocidas como oscilaciones betatrón). Sin embargo, esto se corrige aplicando un voltaje más intenso en relación al requerido en las condiciones ideales.

Para Aladdin con $T_0 = 297$ ns y el armónico del anillo $h_A = 15$ la frecuencia angular de la cavidad de radio-frecuencia $\omega_{\text{rf}} = 317816079.208$ Hz. Usualmente es mas cómodo

para los anillos simplemente reportar la frecuencia de la cavidad, así para Aladdin se reporta en las características de la máquina $\nu = 50.582$ MHz. Entonces, recordando que el número de paquetes de electrones $N_B = 15$ en Aladdin y que el armónico del anillo $h_A = 15$, tenemos entonces que los pulsos que se aplican sobre su correspondiente paquete de electrones.

En resumen, el anillo Aladdin tiene las siguientes características:

Energía	800 MeV	1 GeV
Corriente promedio al inicio	260 mA	190 mA
Tiempo de vida	4 h (250 mA)	9.4 h (180 mA)
Parámetros típicos de la fuente:		
Imán de doblado σ_x (σ_z)	456 μm (85 μm)	510 μm (135 μm)
ondulador σ_x (σ_z)	895 μm (67 μm)	923 μm (104 μm)
Emitancia medida: ϵ_x (ϵ_z)	108 nm—rad (1.1 nm—rad)	108 nm—rad (2.6 nm—rad)
Dispersión en energía, σ_E/E	4.8×10^{-4}	6.0×10^{-4}
Longitud del paquete, σ_L	99 mm (330 ps)	105 mm (350 ps)

HAZ DE FOTONES

Energía crítica (longitud de onda)	546 eV (22.7 Å ...)	1069 eV (11.6 Å ...)
Potencia radiada (@ corriente)	4.5 kW (260 mA)	8.1 kW (190 mA)

MAQUINA

RF Frecuencia	50.582 MHz
Circunferencia (Periodo)	88.9 m (297 ns)
Número de paquetes (espaciamiento)	15 (19.8 ns)
Número de imanes de doblado	12
Radio magnético	2.083 m
Onduladores	4 (2 PPM, 2 EM)

Un plano del anillo de almacenamiento Aladdin se muestra a continuación.

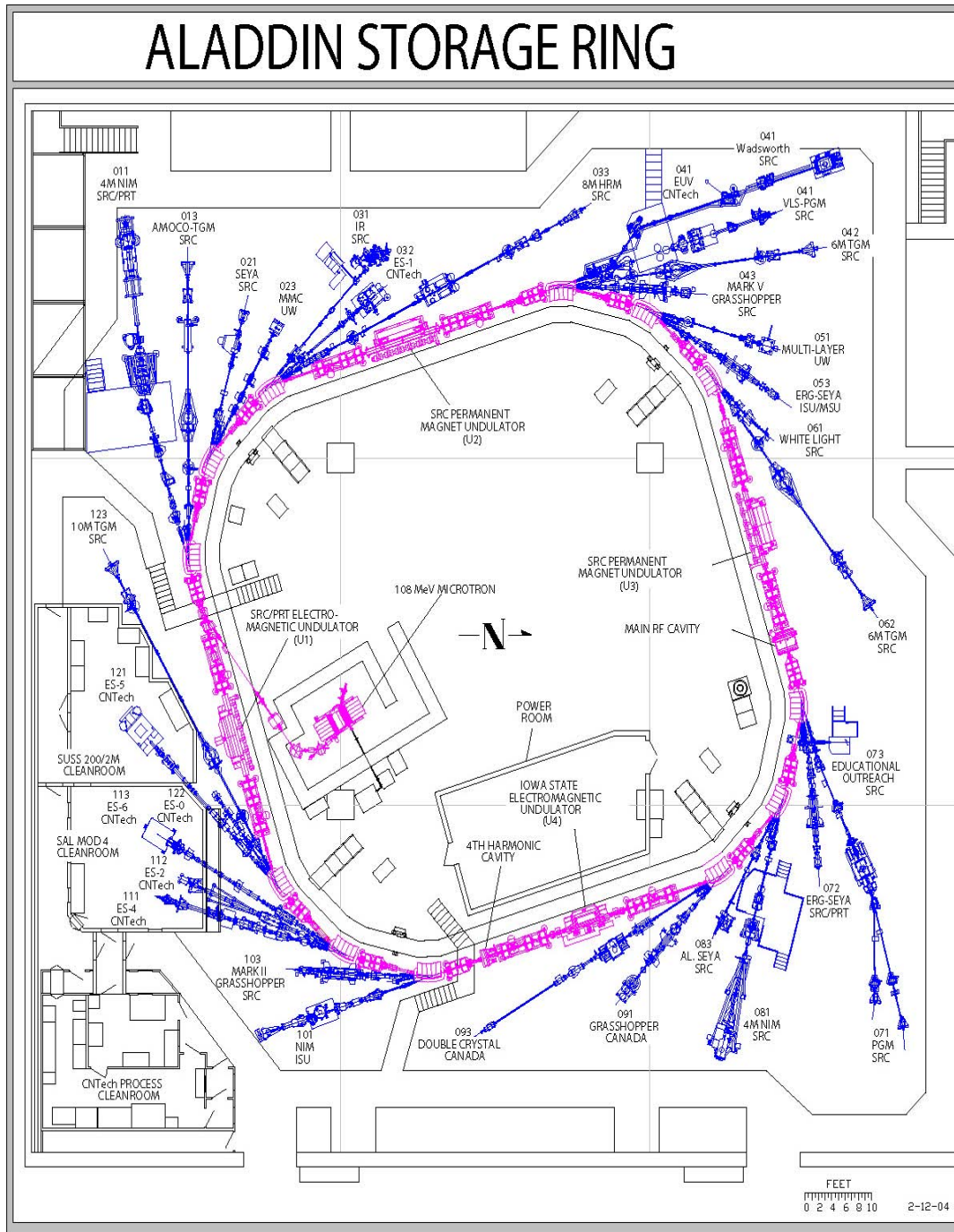


Figura 12. Plano del anillo de almacenamiento Aladdin. Tomado de www.src.wisc.edu

Al inicio de esta sección referente a la fuente de radiación de nuestro experimento se introdujeron algunos argumentos generales sobre la importancia y características de la radiación sincrotrónica. Posteriormente, hemos revisado la manera en que opera un anillo de almacenamiento para producción de radiación sincrotrónica, hemos también descrito los parámetros que caracterizan a los anillos de almacenamiento y hemos particularizado la descripción para el anillo Aladdin. Ahora, pasaremos a revisar las características de la radiación sincrotrónica y las diferencias entre los dos tipos de

mecanismos para su producción en los anillos: radiación de imán de doblado y radiación de dispositivo de inserción.

2.3 Radiación sincrotrónica de imán de doblado.

Las características de la radiación sincrotrónica emitida por los imanes de doblado la hacen ser una fuente muy usada en diferentes experimentos. Las más importantes son: el extenso intervalo del espectro electromagnético que cubre (desde el infrarrojo hasta rayos x blandos y duros), su alta intensidad, su estrecho ancho de línea, el presentar emisión confinada en un estrecho intervalo de ángulos verticales centrados en el plano de la órbita de referencia (colimación), su polarización lineal en el plano de la órbita y elíptica o circular fuera de él, y la estructura temporal de los pulsos emitidos que es del orden de nanosegundos o fracciones de estos.

Se sabe que los electrones que se mueven en trayectoria circular emiten radiación en un patrón dipolar (patrón de Larmor) con un eje de simetría en la dirección de la aceleración centrípeta (Figura 13 panel derecho. Cuando la velocidad de la carga es cercana a la de la luz el patrón de emisión que se observa en el marco de referencia del laboratorio se distorsiona fuertemente) [22, 51]. La teoría de la relatividad nos dice que los ángulos θ_e del objeto emisor están relacionados a los del marco de referencia del receptor θ_r por

$$\tan \theta_r = \frac{\text{sen } \theta_e}{\gamma(\cos \theta_e - \beta)} \quad (30)$$

donde γ es la razón de la energía total de la partícula a su energía en reposo ($\gamma = \text{energía del electrón}/m_e c^2$) y β es la razón de la velocidad del electrón v a la velocidad de la luz c . De modo que, para electrones moviéndose a velocidades cercanas a la de la luz $\beta \approx 1$. A su vez, el máximo de la emisión dipolar que en el marco de referencia de la partícula está centrado en $\theta_e = 90^\circ$ (Fig. 13 panel izquierdo), al pasar al marco de referencia del laboratorio se convierte en $\theta_r \approx \tan \theta_r \approx \gamma^{-1}$ [51]. Así, el cono de emisión que ve un observador en el marco de referencia del laboratorio tiene una apertura angular de γ^{-1} (Figura 13 panel derecho). Es importante hacer notar que este cono disminuye aun más su apertura a medida que nos acercamos a c y se incrementa al aumentar la longitud de onda [51].

A su vez, la frecuencia de la radiación emitida que en el marco de referencia de la carga es igual a la frecuencia del movimiento circular, sufre un marcado corrimiento Doppler hacia altas frecuencias. Se encuentra que este corrimiento en frecuencia es en la dirección de un observador en el laboratorio y está dado por

$$f' = \gamma^3 f \quad (31)$$

donde f es la frecuencia en el marco de referencia de la carga y f' es la frecuencia que se observa en el laboratorio [22]. Lo que corresponde a un corrimiento Doppler desde la región de radiofrecuencias (GHz) hasta el UV de vacío o rayos x.

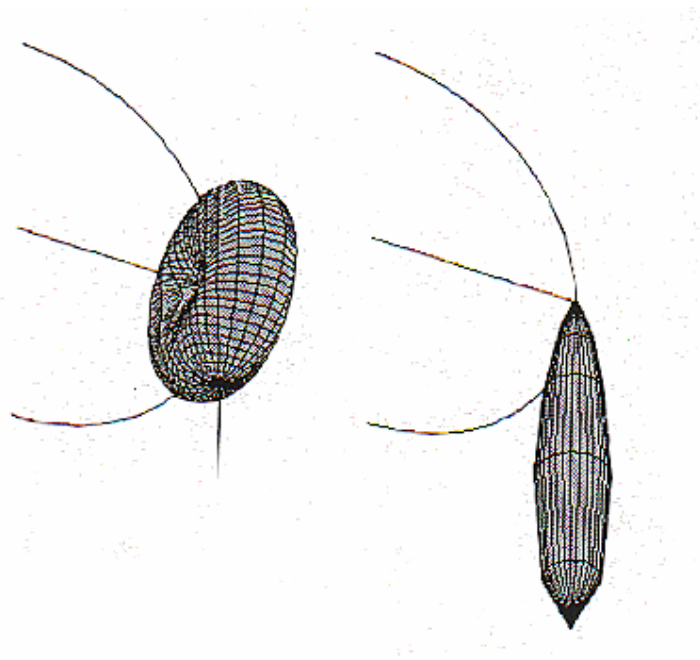


Figura 13. Representación del patrón de emisión de radiación de una partícula cargada moviéndose a velocidades sub-relativistas visto en el marco de referencia que se mueve con la partícula (panel izquierdo) y a velocidades relativistas en el marco de referencia del laboratorio. Tomada de [22]

Antes de continuar avanzando en el entendimiento de la radiación sincrotrónica es conveniente introducir dos conceptos muy útiles para describir las propiedades de esta. El llamado “*ancho de banda fraccional*” y la “*energía crítica de los fotones*”. El primero definido por $\Delta h\nu/h\nu$ expresa el hecho de que el monocromador que selecciona la energía de los fotones tiene una resolución finita. Esto quiere decir que transmite fotones en una ventana de ancho $\Delta h\nu$ alrededor del valor de energía de fotones deseado $h\nu$. En general por convención se hace igual al 0.1%.

La *energía crítica de los fotones* (ε_c) [48] está dada por $h\nu_c$ [keV] = $3hc\gamma^3/4\pi\rho = 665.5 E^2$ [GeV²] · B[T] y la correspondiente longitud de onda crítica λ_c [10^{-10} m] = $c/\nu_c = 4\pi\rho/3\gamma^3 \approx 5.6 \cdot \rho(m)/E^3(\text{GeV}) \approx 18.6 / \text{B(T)} \cdot E^2(\text{GeV})$ son parámetros muy utilizados para definir la emisión de radiación sincrotrónica. También lo son la frecuencia crítica (ν_c) y la frecuencia angular crítica ($\omega_c = 2\pi\nu_c$), todas estas están relacionadas entre sí. La *energía crítica* esta definida como la energía de los fotones ε_c que divide en dos partes iguales la potencia total radiada P_{total} . Análogamente la longitud de onda crítica (λ_c), la frecuencias (ν_c) y (ω_c). Esta energía crítica de los fotones nos da una idea de cuan lejos en el espectro una fuente de radiación sincrotrónica podrá emitir. Así por ejemplo usando las expresiones anteriores, tenemos para Aladdin cuando opera con $E = 1$ GeV con el radio fijo $\rho(m) = 2$, una $\varepsilon_c = 1.1$ keV y $\lambda_c = 11 \times 10^{-10}$ m. Otro anillo que opere con $E = 2.5$ GeV y $\rho(m) = 7$, tendrá $\varepsilon_c = 4.9$ keV y $\lambda_c = 2.5 \times 10^{-10}$ m. Podemos ver que la primera energía crítica corresponde al límite superior de los rayos x blandos y la segunda está en la región de los rayos x duros. De donde, Aladdin es una fuente para

hacer experimentos preferentemente en la región del ultravioleta de vacío - rayos x blandos, y, la segunda fuente es óptima en la región de los rayos x duros.

En la Figura 14 se muestra una representación de las coordenadas angulares para describir la emisión de radiación sincrotrónica por electrones moviéndose en trayectoria circular dentro de un anillo de almacenamiento.

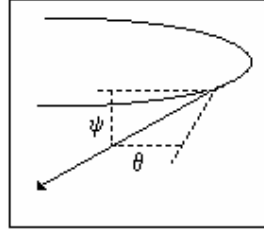


Figura 14. Coordenadas angulares utilizadas para describir la emisión de radiación sincrotrónica por electrones moviéndose en trayectoria circular. θ está en el plano de la órbita y ψ en el perpendicular a ésta.

La **brillantez espectral** (b) conceptualmente está definida según

$$b = \frac{dn_{0.1\%}(x, z, \theta, \psi, hv)}{i dx dz d\Omega dt} \quad (32)$$

y es un parámetro importante para planear experimentos (aunque generalmente el flujo es el más comúnmente empleado con este fin). En (32) $dn_{0.1\%}$ es el número de fotones emitidos por el área $dx dz$ de la fuente, localizada en el punto (x, z) , con un *ancho de banda espectral* $\Delta hv = 0.1\% hv$ centrado en la energía hv , con el ángulo sólido $d\Omega$ en la dirección definida por los ángulos θ y ψ (Figura 14). Entonces b es función de la energía de los fotones hv , del lugar en que se localice el punto emisor (x, z) y de la dirección de emisión que se considere (θ, ψ) . Puede interpretarse como un flujo de fotones emitido por unidad de área (de emisión) con un ancho de banda del 1% de hv , normalizado por el tiempo, ángulo sólido y la corriente del anillo. Las unidades comúnmente empleadas son *fotones $seg^{-1} mm^{-2} mrad^{-2} mA^{-1}$* . Claramente la brillantez espectral si es sensible a las divergencias del haz de fotones así como también al tamaño de la fuente. Las magnitudes oscilan entre 10^{10} y 10^{13} para la mayoría de los imanes de doblado [48]. Se puede pasar de brillantez a flujo cuando se integra la primera en toda el área de la fuente y en todos los ángulos verticales, un análisis de las unidades comúnmente utilizadas nos permite corroborarlo.

Si a lo largo de una línea por la que se canaliza la radiación despreciamos pérdidas (por ejemplo las debidas a la limitada reflectividad de los componentes ópticos) la brillantez espectral se conserva a lo largo de ella (sólo si el sistema óptico es lineal). Si suponemos que una “línea” dada ve el anillo de almacenamiento como un emisor de radiación sincrotrónica uniforme de área A_o y suponiendo también que los demás parámetros permanecen constantes tenemos que al disminuir A_o aumenta b . Es decir una fuente con área de emisión y divergencia pequeñas tiene una alta brillantez. Lo anterior suena lógico, pues se sabe que al disminuir el tamaño de la fuente los componentes ópticos pueden concentrar mejor los fotones en el área de la muestra que se esté investigando. De donde, es razonable el hecho de que la brillantez sea un parámetro

muy utilizado para describir la calidad de una fuente y hacer comparaciones entre ellas para encontrar la mejor para un experimento dado.

Sin embargo, para comparaciones rápidas y directas entre anillos usualmente se utiliza la **brillantez central** (b_c) [48]. Esta es la brillantez de una fuente puntual localizada en el plano de la órbita de referencia ($x = z = 0$) a lo largo de esta y tangencial a ella. Esta dirección es en la que se concentra la emisión de la radiación proveniente del imán de doblado. De esta manera la brillantez se vuelve solo función de $h\nu$ y para dos anillos puede ser comparada directamente para la energía de fotones de interés. Un anillo con alta brillantez tiene un pequeño “tamaño de la fuente” (*source size*). Por otro lado, b_c está normalizada a la corriente del anillo. Así, la radiación que se dirige hacia los experimentos se incrementa con la corriente. Los experimentos requieren un tiempo de vida media del haz largo, pero si se incrementa la corriente disminuye el tiempo de vida de la misma y hay un aumento en las emitancias [48]. Para que un anillo sea una buena fuente de radiación sincrotrónica, entre otras cosas, debe encontrar para su operación el mejor balance entre estos parámetros, además de ser compatible con la rutina de operación y tener tiempos cortos de inyección.

Hemos venido mencionando que la radiación que se emite en un imán de doblado es linealmente polarizada siendo más intensa la componente con el vector eléctrico paralelo al plano del laboratorio y estando concentrada en ángulos verticales ψ pequeños; también hemos mencionado que por encima y por debajo de este plano se puede observar radiación elíptica y circularmente polarizadas seleccionando adecuadamente los ángulos de observación. A continuación revisaremos la polarización de la luz emitida por imanes de doblado.

Dadas las intensidades de emisión con polarización paralela (I_{\parallel}) o perpendicular (I_{\perp}) al plano de la órbita, el grado de polarización lineal (P_L) está dado por

$$P_L = (I_{\parallel} - I_{\perp}) / (I_{\parallel} + I_{\perp}) \quad (33)$$

El grado de polarización circular P_C para emisión fuera del plano de la órbita está dado en término de las intensidades de los componentes con giro a la derecha (I_{Der}) y los de giro a la izquierda (I_{Izq}) de la radiación elípticamente polarizada según,

$$P_C = (I_{Der} - I_{Izq}) / (I_{Der} + I_{Izq}) \quad (34)$$

La teoría de emisión de radiación sincrotrónica por un solo electrón en una órbita circular predice que los componentes del vector eléctrico paralelo y perpendicular de la luz emitida son proporcionales a las siguientes expresiones [48]

$$\text{el componente paralelo} \quad K_{2/3}^2(\xi) \quad (35)$$

$$\text{el componente perpendicular} \quad \frac{(\gamma\psi)^2}{1 + (\gamma\psi)^2} K_{1/3}^2(\xi) \quad (36)$$

donde $K_{1/3}$ y $K_{2/3}$ son las funciones de Bessel del 2º tipo [48], $\xi = y(1 + X^2)^{3/2} / 2$, $X = \gamma\psi$, y ψ es el ángulo de observación perpendicular al plano de la órbita del electrón (ver Figura 14).

Ambas funciones (35) y (36) están graficadas como una función del producto $\gamma\psi$ para diferentes valores de ϵ/ϵ_c en la Figura 15. En ella se puede ver que para ángulos pequeños y altas energías relativas a la energía crítica (ϵ/ϵ_c), el componente paralelo (línea sólida) es mucho más grande que el vertical (línea punteada). También nótese que el componente paralelo se concentra en pequeños ángulos. En la misma figura, para $\psi = 0$ la radiación es completamente polarizada en el plano de la órbita. A medida que ψ se incrementa aparecen lóbulos (por arriba y por debajo del plano del laboratorio) que corresponden a la componente perpendicular. De aquí que se pueda observar radiación elíptica y circularmente polarizada por arriba y por debajo del plano

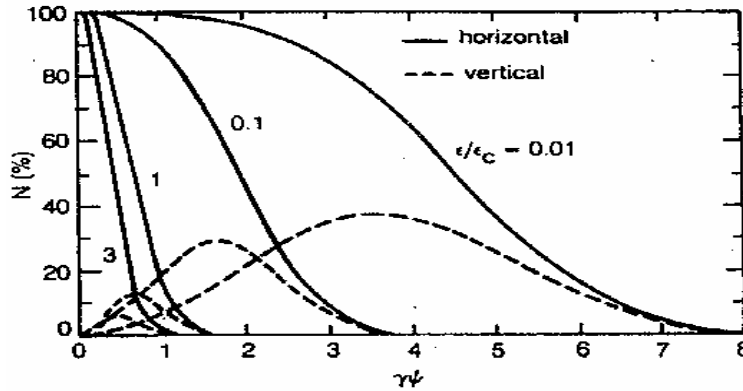


Figura 15. Intensidades normalizadas de los componentes vertical y horizontal de la polarización, como funciones del ángulo de observación vertical (ψ) para diferentes energías de fotones. Tomada de [53]

2.4 Radiación de dispositivos de inserción.

Se conoce como dispositivos de inserción a los *onduladores* o *serpenteadores* que se colocan en los tramos rectos del anillo. Estos son estructuras magnéticas periódicas (Figura 16) en las cuales el campo magnético vertical varía de manera cosenoidal a lo largo del eje del dispositivo.

$$B(z) = B_0 \cos(2\pi z / \lambda_u), \quad 0 \leq z \leq N\lambda_u \quad (37)$$

donde B_0 es la amplitud máxima del campo magnético, aquí z es la distancia a lo largo del eje del dispositivo, λ_u el periodo magnético y N el número de periodos. Al pasar los electrones a través de ellos su movimiento es también cosenoidal en el plano horizontal. Si los electrones son relativistas, en los máximos y mínimos de esta trayectoria oscilante emiten radiación sincrotrónica. El *parámetro de deflexión* K es muy importante, es adimensional y caracteriza los dispositivos de inserción dándonos una medida de la intensidad del campo magnético en ellos [48]

$$K = \frac{eB_0\lambda_u}{2\pi mc} = 0.934\lambda_u[cm]B_0[T] \quad (38)$$

a su vez, se define la pendiente máxima de la trayectoria del electrón como[52]:

$$\delta = \frac{K}{\gamma} \quad (39)$$

El ángulo formado entre el eje de la trayectoria en la órbita del anillo con la prolongación de la pendiente máxima de la trayectoria sinusoidal se conoce como el ángulo de deflexión máximo. Cualquiera de los dos parámetros K o δ se puede utilizar para distinguir entre onduladores y serpenteadores. Para $K \leq 1$ ($\delta \leq \gamma^{-1}$), la radiación proveniente de los diferentes periodos puede exhibir un fuerte fenómeno de interferencia constructiva. Esto es debido a que el movimiento oscilatorio de los electrones está confinado en el cono de apertura γ^{-1} , lo cual implica que la emisión producida por estos dispositivos tenga una apertura angular aún menor a γ^{-1} ; de hecho una buena aproximación es $\theta_{cen} \approx 1/\gamma N^{1/2}$ aunque de manera mas precisa puede considerarse para la emisión de un electrón [52]

$$\theta_{cen} = \frac{\sqrt{1+K^2/2}}{\gamma\sqrt{N}} \quad (40)$$

donde K es el parámetro de deflexión, γ es el cociente de la energía del electrón a su energía en reposo y N es el numero de periodos magnéticos tal que la longitud del dispositivo de inserción es $L = N\lambda_u$. Retomando, para $K \leq 1$ ($\delta \leq \gamma^{-1}$) el arreglo de manes se conoce como ondulator. Por otro lado, cuando $K \gg 1$ se tiene un serpenteador. En la práctica la estructura magnética periódica se consigue usando imanes permanentes, electroimanes o híbridos (imán permanente-ferro). En la mayoría de los dispositivos de inserción el campo puede variarse electromagnéticamente o mecánicamente, y en algunos casos el dispositivo puede variar su operación de ondulator a serpenteador [48].

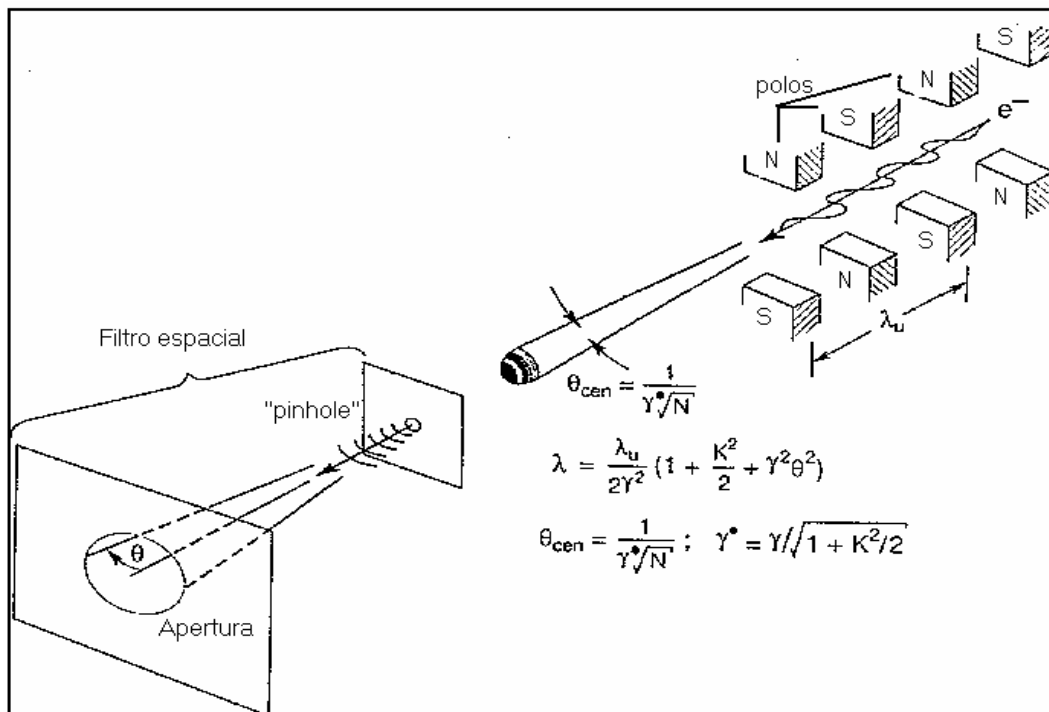


Figura 16. Estructura magnética periódica emitiendo radiación sincrotrónica. Tomada de [52].

Esencialmente las diferencias entre ambos son las siguientes: mientras en el ondulator se aprecia el fenómeno de interferencia y emite radiación en el modo fundamental para

el que fue diseñado y sus armónicos impares, en el serpenteador este fenómeno no ocurre y la emisión ocurre en todos los armónicos produciendo un espectro continuo muy parecido al de los imanes de doblado. Además la radiación del ondulator es parcialmente coherente mientras que la del serpenteador no lo es. En la Figura 18 se muestra la transición de un ondulator a serpenteador. Vemos que a medida que aumenta K la emisión ocurre en mas armónicos. Dado que en nuestros experimentos no utilizamos serpenteadores no hablaremos más de las características de su radiación. Más información sobre ellos puede encontrarse en el trabajo de Kim, Attwood y Hulbert y Williams [51-53].

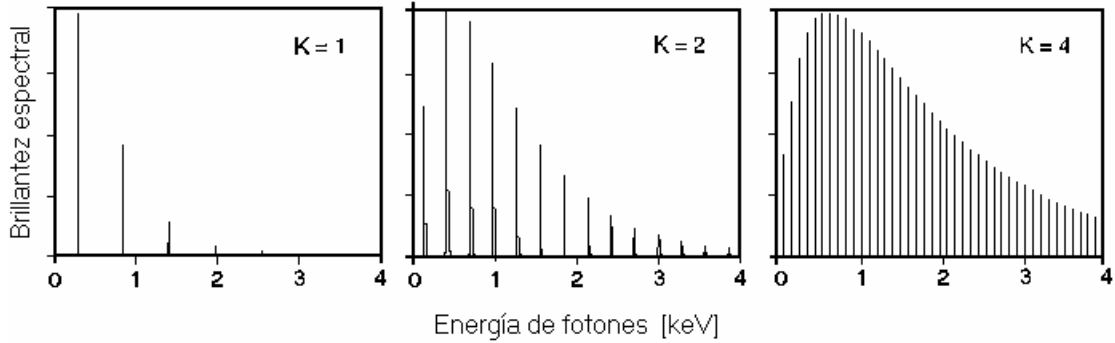


Figura 17. Transición de un ondulator ($K \leq 1$) a serpenteador ($K > 1$). Tomada de [22]

En un ondulator con $K \leq 1$ ($\delta \leq \gamma^{-1}$) la radiación de los diferentes periodos interfiere coherentemente produciendo picos estrechos en el modo fundamental ($n=1$) y sus armónicos impares ($n=3, 5, 7, \dots$) [51-53]. De hecho una característica de la emisión en un ondulator es que la intensidad de emisión de los armónicos pares es nula en el eje de la trayectoria [51-53]. Los armónicos impares son de gran interés dado que las longitudes de onda pequeñas son difíciles de generar. Afortunadamente se producen de manera natural en los ondulatores y su longitud de onda va como λ_i/n [52] o en frecuencias como $n\omega_i$. Así, los armónicos son usados para extender el intervalo de emisión para un ondulator dado.

Para un electrón relativista en un ondulator, la longitud de onda de la radiación emitida experimenta una contracción Doppler. Esta contracción Doppler es dependiente de la velocidad del electrón y del ángulo de observación, de hecho la longitud de onda más corta se observa en el eje [52] de la trayectoria. La expresión que nos describe esta contracción en la longitud de onda es [51-52],

$$\lambda_n = \frac{\lambda_u}{2n\gamma^2} \left(1 + \frac{K^2}{2} + \gamma^2 \theta^2 \right) \quad (41)$$

donde todos los parámetros son conocidos, con la salvedad de que θ aquí es el ángulo de observación respecto al eje de la trayectoria. Esta ecuación se conoce como la ecuación del ondulator [52]. Nótese que se pueden sintonizar las energías de los fotones variando K ó γ , es preferible variar K ya que variaciones en γ afectan la operación de todo el anillo. A su vez, si los imanes del ondulator son permanentes, variar K solo puede hacerse cambiando el “gap” o distancia que existe entre los arreglos de imanes

colocados tanto por encima del plano de la órbita como el arreglo colocado por debajo. En la práctica, si nos interesa incrementar la longitud de onda de la radiación emitida se disminuye el “gap”, por el contrario si queremos disminuir la longitud de onda de la radiación aumentamos la distancia entre ellos. En unidades prácticas la longitud de onda λ_n y su correspondiente energía $E = hc/\lambda_n$ vienen dadas por [48]

$$\lambda_n[nm] = \frac{1.306\lambda_u[cm] \left(1 + \frac{K^2}{2} + \gamma^2\theta^2\right)}{E_e^2[GeV]} \quad (42)$$

Y

$$E[keV] = \frac{0.9496E_e^2[GeV]}{\lambda_u[cm] \left(1 + \frac{K^2}{2} + \gamma^2\theta^2\right)} \quad (43)$$

donde el periodo magnético λ_u debe darse en cm y la energía de los electrones E en GeV .

La **polarización** de la luz emitida por los serpenteadores es similar a la de los imanes de doblado, observándose radiación elípticamente polarizada por encima y por debajo del plano de la órbita [51]. La radiación emitida por onduladores es siempre lineal cuando se observa en el mismo plano y gira de manera muy complicada en otras direcciones de observación [51]. Radiación circularmente polarizada se puede obtener por onduladores helicoidales o cruzados. En este caso los imanes son colocados de manera que producen un campo magnético transversal de periodicidad helicoidal y de magnitud constante [48]. Esto es, los juegos de imanes dipolares se colocan rotados con respecto al juego anterior a un ángulo establecido.

Adicionalmente, la radiación de un haz de electrones de baja emitancia [$\epsilon_x\epsilon_y \leq (\lambda/4\pi)^2$] por un ondulator es transversalmente coherente y es longitudinalmente coherente dentro de una distancia descrita por

$$l_c = \lambda Nn \quad (44)$$

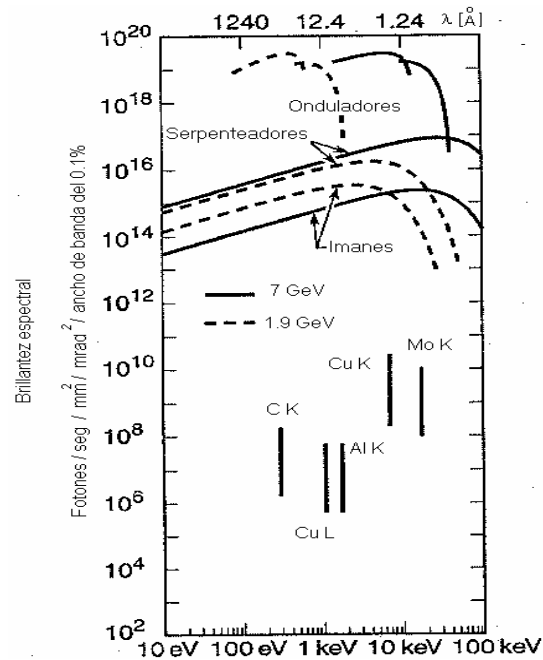


Figura 18. Brillantez espectral para diferentes fuentes de radiación sincrotrónica y otras fuentes convencionales de rayos x. Los intervalos en dos órdenes de magnitud para estas reflejan el hecho de que su emisión depende de factores de operación como el voltaje de la descarga y el ángulo al que se mida la emisión. Tomada de [53]

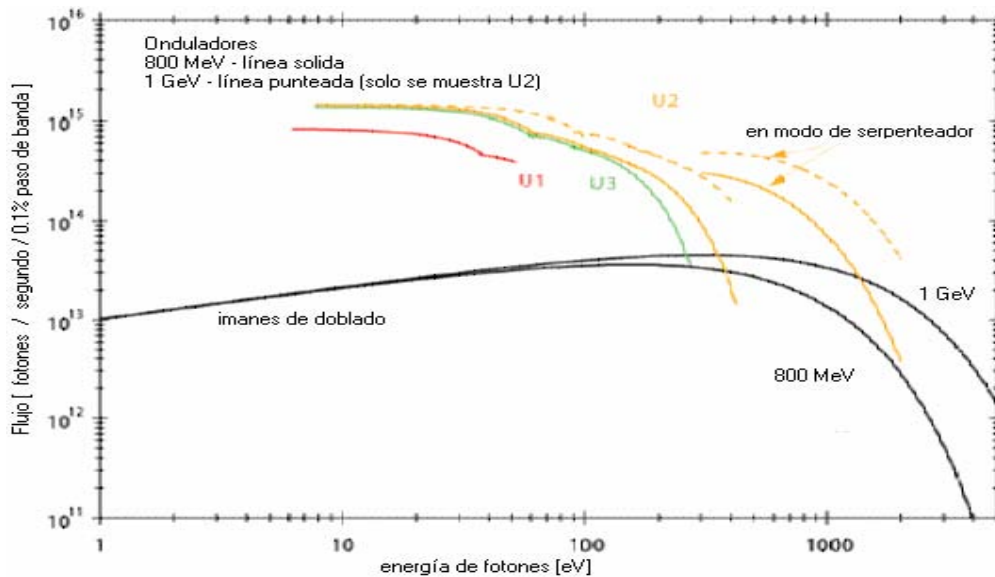


Figura 19. Se muestran los flujos de fotones por segundo y para un ancho de banda del 0.1% de los onduladores del anillo Aladdin y los imanes de doblado a una corriente de 200 mA. Las curvas de emisión de los onduladores están cortadas aproximadamente en el límite al que emite la línea. Los flujos de los imanes de doblado son para 10 mrad en el plano horizontal. Tomada de www.src.wisc.edu/users/comparison.htm

En esta sección se han mencionado las características de la radiación sincrotrónica emitida por imanes de doblado y onduladores. En la Figura 18 se muestra el brillo espectral para diferentes fuentes. Podemos ver que los onduladores son las fuentes más brillantes, seguidas por los serpenteadores y los imanes de doblado. También podemos ver que el intervalo de energía que cubren los últimos dos es más amplio. A su vez, se muestran las líneas de emisión de otras fuentes convencionales. Claramente desde los 10 eV hasta 100 keV por mucho la mejor fuente de fotones es un anillo para producción de radiación sincrotrónica. En la Figura 19 se muestra una comparación del Flujo de fotones para los imanes de doblado y los onduladores de Aladdin.

También hemos visto que la radiación sincrotrónica producida por imanes de doblado y onduladores es linealmente polarizada en el plano de la órbita (en mayor grado la radiación del ondulador). Sin embargo, también es posible tener radiación elíptica y circularmente polarizada seleccionando adecuadamente el ángulo de observación por encima y/o por debajo de la órbita del anillo.

Entonces con un anillo de almacenamiento para producción de radiación sincrotrónica se cuenta con una fuente muy brillante de radiación, con un espectro de emisión continuo, finamente sintonizable y con polarización bien definida desde el UV de vacío hasta los rayos X, con un estrecho ancho de línea, ausencia de líneas satélites y estructura temporal del orden de nanosegundos. Estas características la hacen ser una excelente herramienta para estudiar la estructura de la materia (átomos, moléculas, sólidos, sistemas biológicos, etc...) así como para el desarrollo tecnológico.

3. Óptica

La óptica es una herramienta fundamental para la espectroscopía que ha venido a consolidarse con el tiempo como una disciplina generadora de conocimiento sobre la luz, su comportamiento y su interacción con los materiales. Óptica y espectroscopía han avanzado de la mano enriqueciéndose una de la otra. En espectroscopía la óptica nos permite llevar a cabo nuestros experimentos, por ejemplo seleccionando la energía de los fotones, su intensidad, su dirección, etcétera. Al tener modelos que describen la luz hemos podido profundizar en el entendimiento de la naturaleza de ambas. Los experimentos que actualmente se conducen en la región de VUV-Rayos X blandos son posibles en gran medida gracias al desarrollo de la óptica. En esta sección revisaremos el funcionamiento de una rejilla de difracción; posteriormente hablaremos sobre las rejillas cóncavas, el círculo de Rowland y el monocromador Seya-Namioka para terminar con comentarios sobre los monocromadores que utilizan rejillas planas.

Por 1976 cualquier arreglo que era equivalente en su acción a un número de rendijas paralelas equidistantes del mismo ancho se conocía como rejilla de difracción. Actualmente lo anterior no es del todo cierto. Las rejillas se clasifican tanto por su patrón de rayado como por la forma de su sustrato. Debido al patrón de rayado las rejillas se clasifican como clásicas (espacio constante entre los surcos) o del tipo VLS (variable line spacing). En la actualidad el grabado de los surcos se hace por medios mecánicos u holográficos (rejillas holográficas). Por la curvatura de su sustrato se clasifican como cóncavas (esféricas, toroidales, elipsoides y paraboloides) o planas, donde las últimas son aquellas cuyo rayado existe sobre una superficie plana y pueden pensarse como un caso especial de las rejillas cóncavas ($R = \infty$).

En esta sección se han mencionado las características de la radiación sincrotrónica emitida por imanes de doblado y onduladores. En la Figura 18 se muestra el brillo espectral para diferentes fuentes. Podemos ver que los onduladores son las fuentes más brillantes, seguidas por los serpenteadores y los imanes de doblado. También podemos ver que el intervalo de energía que cubren los últimos dos es más amplio. A su vez, se muestran las líneas de emisión de otras fuentes convencionales. Claramente desde los 10 eV hasta 100 keV por mucho la mejor fuente de fotones es un anillo para producción de radiación sincrotrónica. En la Figura 19 se muestra una comparación del Flujo de fotones para los imanes de doblado y los onduladores de Aladdin.

También hemos visto que la radiación sincrotrónica producida por imanes de doblado y onduladores es linealmente polarizada en el plano de la órbita (en mayor grado la radiación del ondulador). Sin embargo, también es posible tener radiación elíptica y circularmente polarizada seleccionando adecuadamente el ángulo de observación por encima y/o por debajo de la órbita del anillo.

Entonces con un anillo de almacenamiento para producción de radiación sincrotrónica se cuenta con una fuente muy brillante de radiación, con un espectro de emisión continuo, finamente sintonizable y con polarización bien definida desde el UV de vacío hasta los rayos X, con un estrecho ancho de línea, ausencia de líneas satélites y estructura temporal del orden de nanosegundos. Estas características la hacen ser una excelente herramienta para estudiar la estructura de la materia (átomos, moléculas, sólidos, sistemas biológicos, etc...) así como para el desarrollo tecnológico.

3. Óptica

La óptica es una herramienta fundamental para la espectroscopía que ha venido a consolidarse con el tiempo como una disciplina generadora de conocimiento sobre la luz, su comportamiento y su interacción con los materiales. Óptica y espectroscopía han avanzado de la mano enriqueciéndose una de la otra. En espectroscopía la óptica nos permite llevar a cabo nuestros experimentos, por ejemplo seleccionando la energía de los fotones, su intensidad, su dirección, etcétera. Al tener modelos que describen la luz hemos podido profundizar en el entendimiento de la naturaleza de ambas. Los experimentos que actualmente se conducen en la región de VUV-Rayos X blandos son posibles en gran medida gracias al desarrollo de la óptica. En esta sección revisaremos el funcionamiento de una rejilla de difracción; posteriormente hablaremos sobre las rejillas cóncavas, el círculo de Rowland y el monocromador Seya-Namioka para terminar con comentarios sobre los monocromadores que utilizan rejillas planas.

Por 1976 cualquier arreglo que era equivalente en su acción a un número de rendijas paralelas equidistantes del mismo ancho se conocía como rejilla de difracción. Actualmente lo anterior no es del todo cierto. Las rejillas se clasifican tanto por su patrón de rayado como por la forma de su sustrato. Debido al patrón de rayado las rejillas se clasifican como clásicas (espacio constante entre los surcos) o del tipo VLS (variable line spacing). En la actualidad el grabado de los surcos se hace por medios mecánicos u holográficos (rejillas holográficas). Por la curvatura de su sustrato se clasifican como cóncavas (esféricas, toroidales, elipsoides y paraboloides) o planas, donde las últimas son aquellas cuyo rayado existe sobre una superficie plana y pueden pensarse como un caso especial de las rejillas cóncavas ($R = \infty$).

La ecuación de la rejilla de difracción es [54]

$$\sigma(\text{sen}\alpha + \text{sen}\beta_0) = m\lambda \quad (45)$$

donde α y β son los ángulos de incidencia y reflexión que se miden con respecto a la normal a la superficie de la rejilla, λ es la longitud de onda del rayo difractado, σ es el espacio constante entre cada surco y m ($= 0, 1, 2, \dots$) es el orden de la difracción. En esta ecuación podemos ver que el orden cero ($m = 0$) de la radiación aparece en la misma dirección que la reflexión en un espejo ($\alpha = -\beta$). Para incidencia normal

$$m\lambda = \sigma \text{sen}\beta \quad (46)$$

que al ser derivada y reorganizar nos permite obtener

$$\frac{d\beta}{d\lambda} = \frac{m}{\sigma \cos\beta} \quad (47)$$

siendo esta última la ecuación que representa la dispersión angular de la rejilla. De ella podemos ver que la dispersión es grande cuando tenemos un orden m grande, una constante de rejilla (σ) pequeña y/o un ángulo de difracción grande β .

Por otro lado de acuerdo al criterio de Rayleigh, dos líneas, una con longitud de onda λ y otra $\lambda + \Delta\lambda$ están resueltas cuando el máximo de una de ellas está exactamente en el primer mínimo de la otra. Siguiendo esta definición a partir de la teoría de difracción se puede demostrar que el poder de resolución para una rejilla viene dado por [54]:

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = mN \quad (48)$$

donde m es el orden de la radiación y N es el número total de surcos iluminados. Esta expresión es completamente válida para una rejilla plana y es una excelente aproximación para una rejilla cóncava. Retomando, cuando se requiere alta dispersión y alta resolución debemos buscar el orden más alto posible y valores de β cercanos a 90° . No es difícil asimilar que cuando el rayado de la rejilla en vez de hacerse sobre una superficie plana se hace sobre un espejo cóncavo se obtiene una rejilla cóncava. Por las propiedades que le confiere su concavidad esta difractará y enfocará la luz al mismo tiempo. Esto fue vislumbrado por Henry Rowland quien las inventó en 1881. Desde entonces las rejillas cóncavas han jugado un papel fundamental en espectroscopía. Su acción provee la gran ventaja de que puede evitarse el uso de lentes de enfocamiento particularmente en la región de UV, donde la reflectividad de los recubrimientos para espejos es baja y el vidrio absorbe fuertemente. Si se decide utilizar una rejilla plana en esta región en vez de una rejilla cóncava se debe usar incidencia rasante [55].

En la Figura 20 se muestra un esquema del espectrómetro de Rowland donde utilizaba sus rejillas cóncavas. Él mismo se dio cuenta de que, si ponía la fuente sobre un círculo de diámetro igual al radio de curvatura (R) tangencial (horizontal) de la rejilla cóncava y que, si este pasaba a través del centro de la rejilla se formaría el espectro de la luz incidente sobre el círculo. Adicionalmente el espectro formado estaba enfocado y libre de coma en todas las longitudes de onda; aunque por otro lado tenía aberración esférica

pequeña y astigmatismo usualmente severo. Este círculo fue descubierto por Rowland en 1883 y en su honor lleva su nombre. Originalmente los espectrómetros que usaban el círculo de Rowland empleaban una placa fotográfica curvada colocada sobre todo el perímetro del mismo para registrar el espectro completo. Al estar fijo a la rejilla, este círculo se mueve con ella ya sea que se rote o traslade.

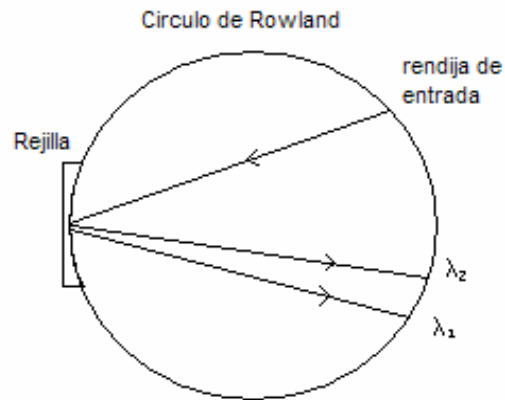


Figura 20. Espectrómetro con círculo de Rowland incluido. Ambas, rendija de entrada y espectro difractado están sobre el círculo de Rowland, cuyo diámetro es igual a la mitad del radio de curvatura (R) tangencial (horizontal) de la rejilla y pasa por el centro de la rejilla. Luz de dos diferentes longitudes de onda se muestra difractada en diferentes puntos sobre el círculo de Rowland.

Los monocromadores son instrumentos diseñados y construidos para poder seleccionar y dirigir la energía de los fotones de la fuente de radiación hacia las estaciones de trabajo. Los hay de diversos tipos, pero se dividen en dos grandes grupos: los de incidencia normal y los de incidencia rasante, siendo estos últimos utilizados preferentemente en la región del ultravioleta de vacío y hacia altas energías. Dentro de estos dos grandes grupos las posibilidades se expanden al considerar la forma de la rejilla (plana o cóncavas), el tipo de montura (en el plano o no) y si el ángulo incluido o el espacio entre los surcos de la rejilla son fijos o variables.

Dado que uno de los experimentos que realizamos fue conducido en un monocromador Seya-Namioka a continuación describiremos su principio de operación.

El monocromador Seya-Namioka es del tipo de incidencia normal, con ángulo incluido fijo y permite seleccionar la energía de los fotones en el ultravioleta de vacío utilizando una rejilla cóncava sin recurrir al círculo de Rowland. Fue ideado en un principio por Seya [56] y construido por Namioka [57]. En este tipo de monocromador las rendijas de entrada y salida están fijas (ángulo incluido fijo) y la selección de la radiación incidente se consigue rotando la rejilla sobre el eje tangente al “surco cero” en el centro de la misma. El único ángulo incluido ($\sim 70^\circ$) hace posible enfocar la radiación en un amplio intervalo de energía de fotones. Por ejemplo para una rejilla de 600surcos/mm desde 0 a 700 nm [58].

En la Figura 21 se muestra un corte transversal de un monocromador Seya-Namioka. En ella se puede ver que

$$r, r' = \text{cte.}, 2K = \alpha - \beta_o, \alpha = K + \theta, \beta_o = \theta - K \quad (49)$$

donde r y r' son respectivamente las distancias del centro de las rendijas de entrada y salida al centro o "polo" de la rejilla, $2K$ es el ángulo incluido entre el rayo incidente y el de salida, θ es el ángulo en que se rota la rejilla para seleccionar la radiación y toma el signo del orden espectral m , y α y β_o son los ángulos de incidencia y difracción respectivamente.

En la misma Figura 21, con líneas punteadas se muestran dos círculos de Rowland que corresponden a la selección de diferentes longitudes de onda debidas a la rotación de la rejilla. El círculo sólido corresponde al orden cero de la radiación. También se puede ver que las rendijas de entrada y salida están fijas, y que para diferentes longitudes de onda las curvas focales horizontales siempre van hacia la rendija de salida. Por último, mencionar que también se puede apreciar que sólo para el orden cero el círculo de Rowland coincide con la curva focal horizontal.

Para el monocromador Seya-Namioka la relación entre la longitud de onda λ y θ está dada por [58]:

$$\lambda = \left(\frac{2\sigma}{m} \right) \cos K \operatorname{sen} \theta \quad (50)$$

donde σ es la distancia entre los surcos de la rejilla y se conoce como la constante de la misma.

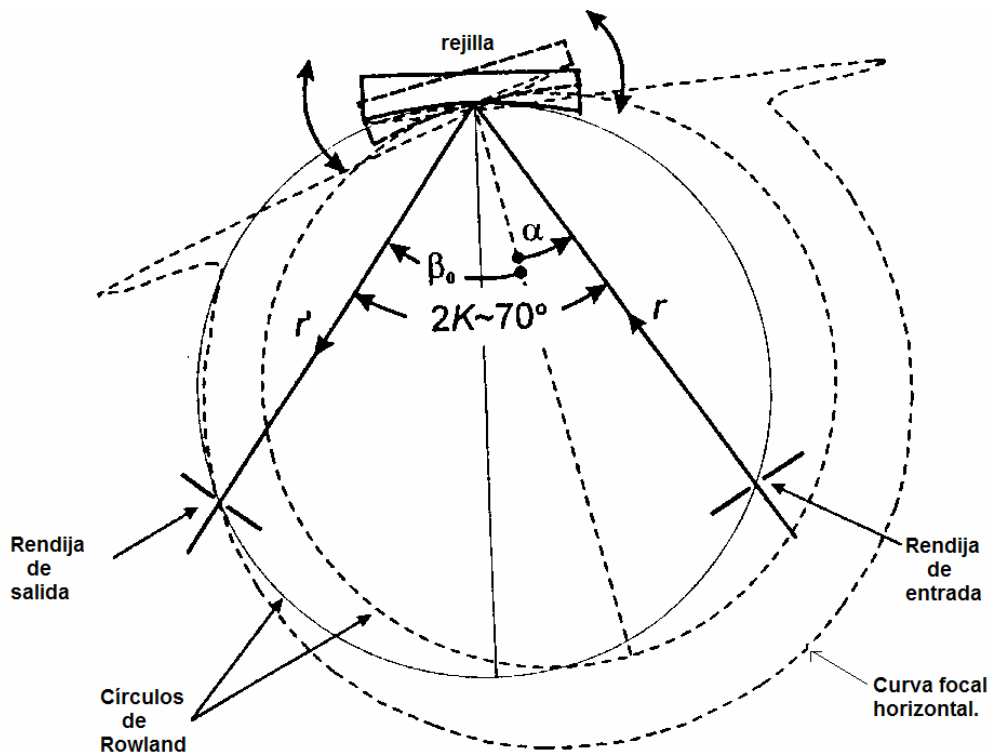


Figura 21. Corte trasversal de un monocromador Seya -Namioka.

Además del monocromador Seya-Namioka (con rejilla cóncava) en uno de nuestros experimentos empleamos un monocromador con rejilla plana (PGM por sus siglas en inglés). Aunque los monocromadores de rejilla plana se han utilizado muy poco en la región VUV [58], uno puede usarlos en esta región empleando incidencia rasante. Esto ha venido a revitalizar el uso de estos monocromadores en la región VUV-Rayos X blandos [55]. En la siguiente sección se mostrará un esquema de la óptica del monocromador de rejilla plana empleado en nuestros experimentos.

3.1 Línea Stainless Steel (SS) Seya-Namioka.

La línea SS-Seya-Namioka del anillo de almacenamiento Aladdin (puerto 021 en Figura 12) fue diseñada y construida en el Synchrotron Radiation Center para proveer al anillo de un instrumento versátil donde se pudieran conducir experimentos que emplearan radiación sincrotrónica [49]. Está hecha de acero inoxidable 304, lo cual permite tener estabilidad mecánica y alcanzar presiones de operación menores que 2×10^{-9} torr. Su función es seleccionar y guiar los fotones provenientes de un imán de doblado hacia la estación de trabajo que se conecte a ella.

En la Figura 22 se muestra una vista lateral del monocromador SS-Seya-Namioka y algunos de sus componentes. El proceso por el cual los fotones provenientes del anillo son conducidos, seleccionados y dirigidos a la cámara experimental se describe a continuación:

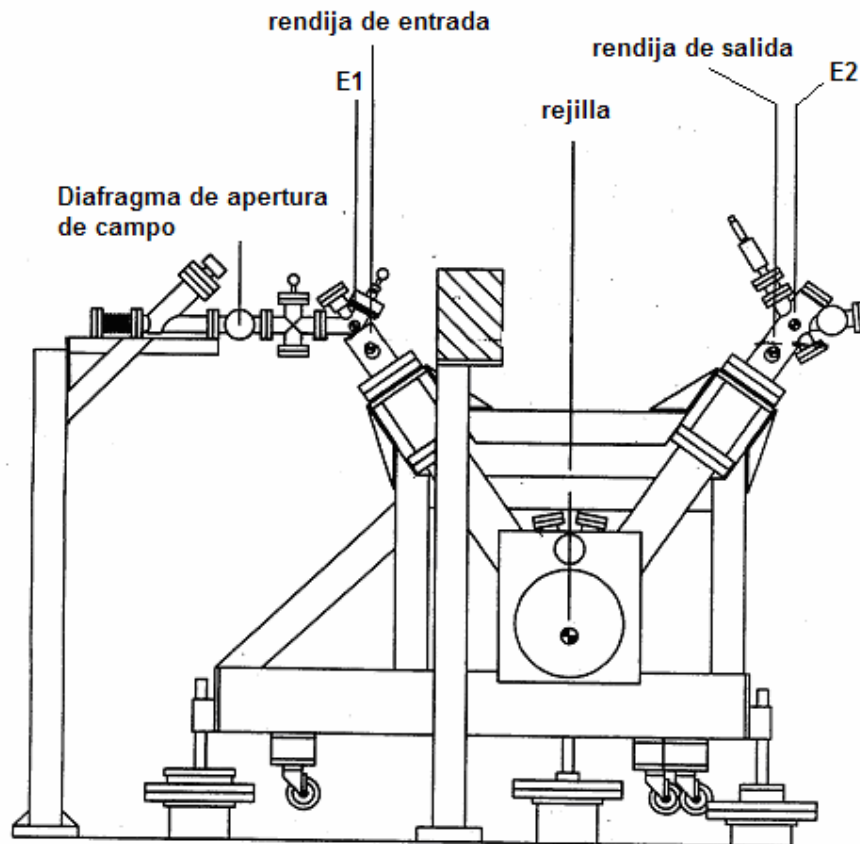


Figura 22. Vista lateral del monocromador SS Seya-Namioka del SRC UW-Madison.

Primero los fotones emitidos por el imán de doblado en la dirección de la línea SS Seya-Namioka son conducidos al vacío hasta alcanzar el diafragma de apertura de campo (ver Figura 22) que regula el tamaño y la intensidad de la fuente. Las aperturas de este diafragma son variables, pudiendo ser de 6, 3 (apertura estándar), 2 y 1 mm de diámetro. El haz emergente alcanza el espejo E1 y es reflejado en la dirección de la rejilla de difracción pasando previamente por una rendija de entrada. La apertura de esta rendija de entrada puede controlarse con un tornillo micrométrico y la apertura mínima de la rendija es de 5 μm . Una rejilla cóncava recubierta de oro con radio de curvatura de 998.9 mm y con una densidad de 1200 líneas/mm selecciona la energía de los fotones cuando se hace rotar sobre su eje. Esta rejilla presenta una dispersión lineal de 8.33 $\text{\AA}/\text{mm}$ y es útil en la región del espectro comprendida entre 250 y 2066 \AA (6-50 eV). Al salir de la rejilla los fotones seleccionados se dirigen hacia un espejo E2 que los reorienta hacia la cámara experimental. Previa al espejo E2 está colocada la rendija de salida, la cual se ajusta de manera similar a la rendija de entrada y la apertura mínima a la cual puede trabajar es de 40 μm . El haz emergente de la rendija de salida está nominalmente enfocado a 1317 mm sobre el piso y 876 mm de la brida de salida. El tamaño del haz en la distancia focal nominalmente es de 2mm (horizontal) X 1 mm (vertical) y presenta una divergencia de 20 mrad (horizontal) X 3 mrad (vertical) cuando las rendijas están abiertas a 100 μm . Por otro lado, con las rendijas abiertas a 40 μm y para el orden cero de la radiación la línea presenta una resolución de 0.356 \AA . Por último, una malla de Ni con 90% de transmisión localizada después del último espejo produce por fotoefecto una corriente de electrones que nos permiten monitorear la salida de fotones. Este dato es importante para normalizar los espectros.

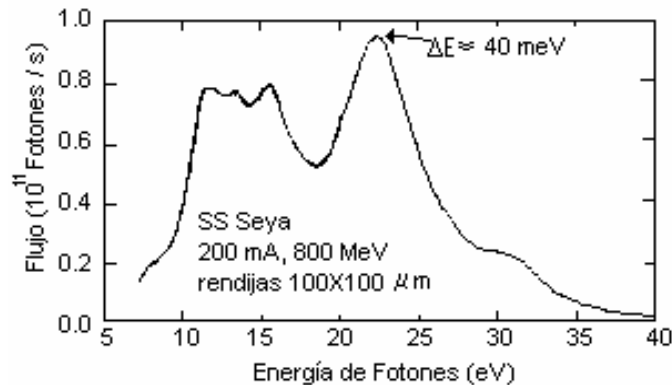


Figura 23. Perfil del flujo de fotones que puede enviar la línea SS-Seya-Namioka en el intervalo energético de 6 a 40 eV. La figura fue tomada de la página del anillo www.src.wisc.edu

En la Figura 23, se muestra un gráfico del flujo de fotones que envía la línea SS-Seya-Namioka para cada valor de la energía de fotones entre 6 y 40 eV cuando la corriente en el anillo es de 200 mA, a una energía de 800 MeV y con las rendijas a 100 X 100 μm . Podemos ver que el flujo máximo (cerca de 10^{11} fotones/s) ocurre aproximadamente en 22.5 eV, y que en ese punto la resolución de la línea es de 40 meV.

3.2 Línea PGMA

En uno de los tramos rectos del anillo Aladdin se encuentra insertado un ondulator (U3 en Figura 13) de 3.5 m de largo con un periodo de 7 cm que cubre energías de fotones desde 8 hasta 240 eV en el primer y tercer armónico. Está constituido por 100 imanes (permanentes, electroimanes e imanes híbridos). Con el anillo operando a 0.8 GeV o 1.0 GeV y con una corriente de 200 mA, el ondulator envía entre 1.4×10^{15} y 1.4×10^{14} fotones linealmente polarizados por segundo.

Esta línea nos permite seleccionar la energía de los fotones variando la separación entre los bloques de imanes (localizados por encima y por debajo de la órbita) y con un monocromador de rejilla plana. Por este hecho la línea se conoce como la línea PGM (por sus siglas en inglés) y se puede apreciar su ubicación en el anillo en el puerto 071 de la Figura 12. Esta línea, sintonizada a un máximo poder de resolución de 10^{-4} puede enviar más de 10^{12} fotones por segundo a la región de interacción en el intervalo de energía de 20 a 170 eV [55].

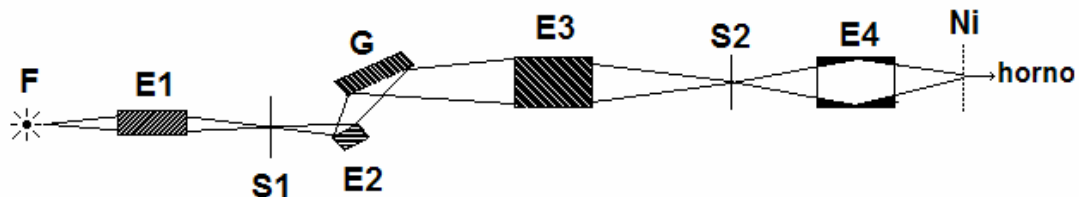


Figura 24. Óptica de la línea PGM. F representa la fuente de luz, E1 un espejo cilíndrico, E2 un espejo plano, G la rejilla plana, E3 y E4 espejos elipsoidales, S1 y S2 las rendijas de entrada y salida respectivamente, la línea punteada la malla de Ni y por último el horno dentro de la cámara experimental.

En la Figura 24 se muestra un esquema de la óptica de la línea PGM. El espejo cilíndrico E1 orientado verticalmente enfoca el haz de fotones hacia la rendija de entrada S1. El espejo plano E2 refleja el haz hacia la rejilla G. Los fotones seleccionados por la rejilla G son dirigidos al espejo elipsoidal E3, el cual a su vez los redirige y enfoca hacia la rendija de salida S2. Finalmente el espejo elipsoidal E4 recibe los fotones y los reenfoca en la región de interacción de la cámara experimental. La densidad de la rejilla es de 1200 líneas/mm. Información más detallada sobre los componentes ópticos de la línea puede encontrarse en el trabajo de Reininger y colaboradores [55]. Entre el espejo E4 y la cámara experimental está colocada una malla de Ni que tiene una transmisión del 97%. La radiación proveniente de E4 interactúa con esta malla produciendo una pequeña corriente de electrones. Éstos nuevamente nos permiten después normalizar nuestros espectros a la corriente de electrones producida en la malla de níquel.

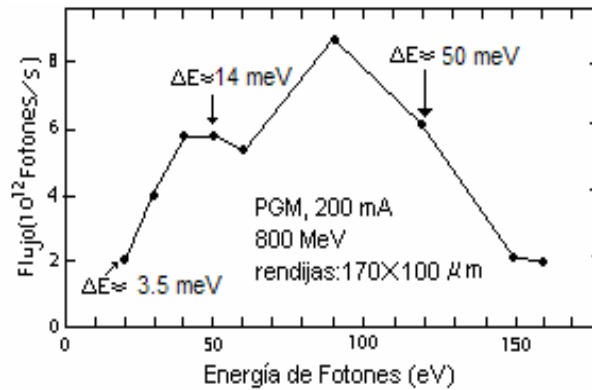


Figura 25. Perfil del flujo de fotones que puede enviar la línea PGM en el intervalo energético comprendido entre 20 y 160 eV. (Figura tomada de www.src.wisc.edu)

En la Figura 25 se muestra el perfil del flujo de fotones para la línea PGM. La figura fue tomada de la página del anillo de almacenamiento. Podemos ver que el flujo fue medido para algunos valores de energía de fotones y el perfil construido uniendo los puntos. Las condiciones a las que se midieron los flujos fueron 200 mA de corriente en el anillo, a una energía de 800 MeV, y con las rendijas de entrada por salida a 170 X 100 μm . También podemos ver que la resolución de la línea disminuye al aumentar la energía de los fotones y que el flujo máximo (cerca de 8.5×10^{12} fotones) es alrededor de los 100 eV.

En la Tabla 1 se muestra un resumen comparativo entre la línea SS-Seya-Namioka y la línea PGM.

Parámetro técnico/línea	SS- Seya-Namioka	PGM
Energía de fotones	6-50 eV	8-245 eV
Flujo de Fotones (fotones/s)	^a (0.0-1.0) X 10 ¹¹	^c (0-8.5) X 10 ¹²
Apertura de rendijas	40-100 (μm)	100-255 (μm)
Paso de banda	^b $\Delta\lambda(\Delta) \approx 9 \times$ apertura de rendijas (mm)	$\Delta E(\text{meV}) \approx 0.4 \times E^{1.5} \times$ rendija de salida (mm).
Rejilla	Cóncava (R=998.9mm) Recubierta de oro. 1200 líneas/mm.	Plana 1200 líneas/mm
Distancia Focal nominal (sobre el piso / a partir de la brida de salida)	1317 mm. 876 mm	781 mm 1203 mm
Tamaño del haz (hor.Xvert.)	2mm X 1mm	0.7 mm X 0.5 X apertura de la rendija de salida
Divergencia del haz de fotones (hor. X vert.) (mrad)	^a 20 X 3	^c 4.06 X 6 (8eV), 3.6 X 2.77 (40 eV) y 3.06 X 1.41 (200eV).
Polarización típica de los fotones	0.90	0.99

^a rendijas a 100 X100 μm , corriente de 200 mA, 800 MeV.

^b para rendijas con apertura mayor a 0.04 mm.

^c rendijas a 170 X100 μm , corriente de 200 mA, 800 MeV.

Tabla 1. Comparación entre la línea SS-Seya- Namioka y la línea PGM.

Todos los datos presentados en esta tabla comparativa fueron extraídos de la página sobre información técnica de las líneas, disponible para usuarios del anillo en la dirección electrónica www.src.wisc.edu.

Ya revisados algunos conceptos de óptica relevantes para nuestro fin y convencidos de su importancia y trascendencia en espectroscopía pasemos a revisar un requerimiento indispensable para el desarrollo de nuestros experimentos, “el vacío”.

4. Espectrómetro

4.1 Sistema de vacío.

En esta sección brevemente se hablará de “el vacío” y sus diferentes tipos desde el punto de vista experimental. Al hacer espectroscopía se busca medir niveles de energía de la materia (rotacionales, vibracionales o electrónicos). En particular en la región desde el ultravioleta y hacia altas energías los niveles energéticos involucrados son electrónicos. Al hacer estas mediciones se busca tener la certeza de que los espectros que se obtienen son únicamente de la materia en estudio. La manera de garantizar esto es colocando sólo las sustancias de nuestro interés en la región de interacción, y esto es posible gracias a la tecnología de vacío. La tecnología de vacío ha provisto un medio “transparente” que nos ha permitido ver mejor a la materia. Por supuesto que el vacío también se puede medir. Esto se hace por medio de manómetros o medidores de presión que pueden ser de diversas características y sensibilidades. Las unidades en que se mide el vacío son las bien conocidas unidades de presión. Según los niveles de presión el vacío se divide en crudo ($\text{atm}-10^{-3}$ torr), alto ($10^{-3}-10^{-8}$ torr) o ultra alto ($10^{-8}-10^{-12}$ torr). Dependiendo del interés y la región del espectro en que se trabaje el nivel de vacío puede ser importante o no. En general, los experimentos que se conducen en las estaciones de trabajo de un anillo de almacenamiento requieren de un vacío ultra alto (UHV), y como vimos en capítulos previos, dentro de la cámara del anillo. En la Figura 26 se muestran los componentes de vacío esenciales para una estación de trabajo en general.

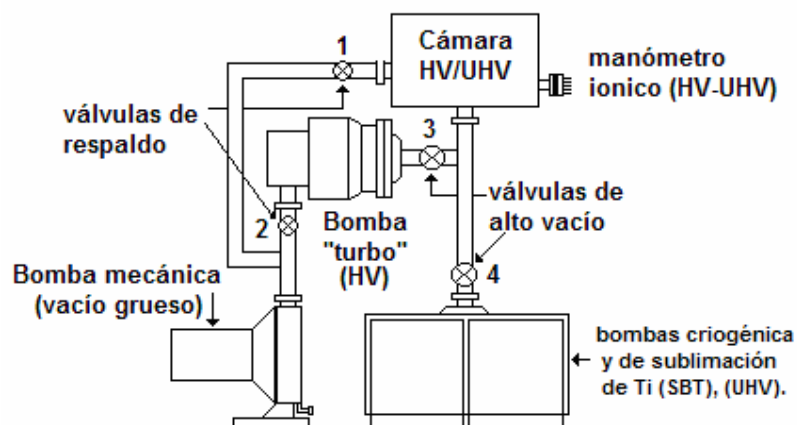


Figura 26. Componentes esenciales de un sistema de alto vacío/ultra alto vacío (HV)/(UHV).

Todos los datos presentados en esta tabla comparativa fueron extraídos de la página sobre información técnica de las líneas, disponible para usuarios del anillo en la dirección electrónica www.src.wisc.edu.

Ya revisados algunos conceptos de óptica relevantes para nuestro fin y convencidos de su importancia y trascendencia en espectroscopía pasemos a revisar un requerimiento indispensable para el desarrollo de nuestros experimentos, “el vacío”.

4. Espectrómetro

4.1 Sistema de vacío.

En esta sección brevemente se hablará de “el vacío” y sus diferentes tipos desde el punto de vista experimental. Al hacer espectroscopía se busca medir niveles de energía de la materia (rotacionales, vibracionales o electrónicos). En particular en la región desde el ultravioleta y hacia altas energías los niveles energéticos involucrados son electrónicos. Al hacer estas mediciones se busca tener la certeza de que los espectros que se obtienen son únicamente de la materia en estudio. La manera de garantizar esto es colocando sólo las sustancias de nuestro interés en la región de interacción, y esto es posible gracias a la tecnología de vacío. La tecnología de vacío ha provisto un medio “transparente” que nos ha permitido ver mejor a la materia. Por supuesto que el vacío también se puede medir. Esto se hace por medio de manómetros o medidores de presión que pueden ser de diversas características y sensibilidades. Las unidades en que se mide el vacío son las bien conocidas unidades de presión. Según los niveles de presión el vacío se divide en crudo ($\text{atm} \cdot 10^{-3}$ torr), alto ($10^{-3} \cdot 10^{-8}$ torr) o ultra alto ($10^{-8} \cdot 10^{-12}$ torr). Dependiendo del interés y la región del espectro en que se trabaje el nivel de vacío puede ser importante o no. En general, los experimentos que se conducen en las estaciones de trabajo de un anillo de almacenamiento requieren de un vacío ultra alto (UHV), y como vimos en capítulos previos, dentro de la cámara del anillo. En la Figura 26 se muestran los componentes de vacío esenciales para una estación de trabajo en general.

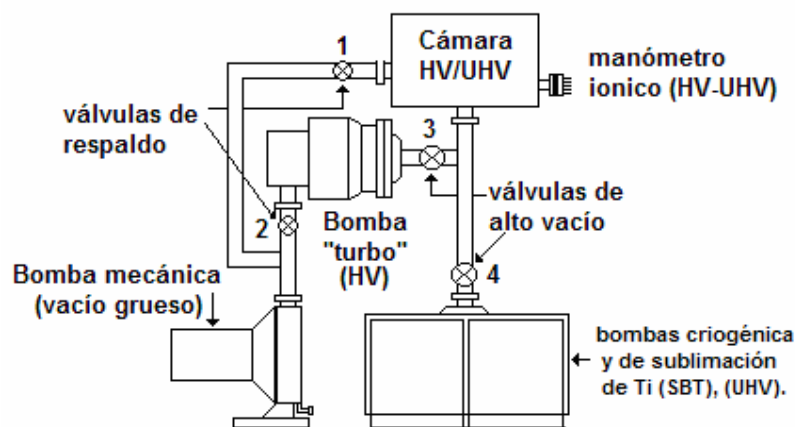


Figura 26. Componentes esenciales de un sistema de alto vacío/ultra alto vacío (HV)/(UHV).

Al ver la Figura 26, podríamos decir que el sistema en general se compone de bombas, conductos, conexiones, sellos y medidores de presión. La selección de cada uno de los elementos tienen que ver con el tipo de experimentos que se pretenden realizar y cada caso (no ha de sorprendernos) es particular. Esto implica hacer una selección adecuada de los materiales para construirlo, el tipo de tuberías, su diámetro y constitución, las uniones entre estas, las válvulas y los medidores de presión. No deben pasarse por alto sus propiedades físicas en general, el proceso de fabricación al que han sido sujetas (por su posible influencia en el vacío), la compatibilidad química y por supuesto los costos. En todo esto nunca debe perderse de vista el nivel de vacío que se pretende alcanzar. El esquema de la Figura 26 es un sistema típico para experimentos que requieren un ultra-alto vacío (UHV por sus siglas en inglés). La tubería permite la conexión entre cada una de las partes y las más comunes en dispositivos de alto vacío son las de cobre y acero inoxidable. Estos se escogen por sus amplias posibilidades de manipulación (permiten por ejemplo soldar); el cobre además por ejemplo presenta una baja permeación para todos los gases y el acero inoxidable es resistente a la corrosión.

Por cuestiones de seguridad, así como también dependiendo de las necesidades y el momento del experimento, cada sección puede estar aislada o no. Este aislamiento se logra por medio de válvulas que pueden ser manuales o electrónicas. Las bombas por su parte existen en diferentes tipos, cada uno apropiado para un intervalo de vacío. Para operar en óptimas condiciones, tener larga vida y en general gozar de “buena salud”, una bomba debe operarse dentro de los intervalos de presión recomendados por el fabricante. Así, las bombas mecánicas son las que se utilizan para iniciar el “bombeo”. Estas se encargan de evacuar el grueso de los gases contenidos al interior del arreglo. Con las bombas mecánicas (de tipo “scroll”, de aspas o pistón rotatorias o diafragma) se puede pasar de una presión atmosférica a presiones de hasta 10^{-3} torr en unos minutos. Para alcanzar niveles superiores de vacío se utilizan bombas de alto vacío. Las bombas que nos lo permiten pueden ser de difusión, turbomoleculares, de sublimación de titanio o criogénicas. La máxima presión desde donde pueden iniciar su operación es del orden de 10^{-3} torr. Operando óptimamente nos permiten alcanzar presiones de 10^{-10} y hasta 10^{-12} torr. Cada bomba, según la forma en que logra la evacuación de gases es deseable para una determinada región del espectro de presiones e, interesantemente evacua mejor que otra algún gas en particular [59]. Los mecanismos de operar de cada bomba se encuentran en la literatura de vacío [59-60]. Como se mencionó con anterioridad, las presiones se miden con aparatos conocidos como manómetros. Los hay de varios tipos y con diferentes sensibilidades. Por ejemplo los termopares y los de convección pertenecen a los de transferencia de calor y se utilizan para medir presiones de 5 torr a 1×10^{-3} torr y desde 1 atm hasta 1×10^{-3} torr respectivamente. Los de capacitancia operan entre 1 atm hasta 1×10^{-5} . Por otro lado los de filamento o detector iónico operan en el intervalo de presiones comprendido entre 1×10^{-2} y 1×10^{-11} torr (alto vacío y ultra alto vacío predominantemente). En particular la cantidad de Helio y en general la de cualquier gas noble (que tienen un potencial de ionización elevado) es difícil de reportar con confianza. Es importante mencionar que (aunque no se muestran en la figura) es conveniente tener medidores de presión en las entradas a las bombas.

Retomemos la Figura 26 y continuemos revisando la lógica del sistema y la manera adecuada de operarlo para que nos permita alcanzar los niveles de ultra alto vacío. Al ver la Figura 26 saltan a la vista la presencia de una bomba mecánica, una turbomolecular, una criogénica y una de sublimación de titanio. Supongamos que dentro de la cámara experimental hemos colocado nuestra(s) muestra(s). Esto generalmente se

hace a través de una o varias bridas de acero inoxidable con un filo al interior. Entre la cámara y la(s) brida(s) se colocan aros de cobre (gaskets) en algunos casos libre de oxígeno (OFHC por sus siglas en inglés). Estos aros de cobre fueron inventados por la firma VARIAN y logran un sello con el filo de la brida al atornillar la misma. Supongamos también que la brida ha sido atornillada y con esto el sello formado. Antes de encender cualquier bomba uno debe cerciorarse que la cámara y todas las válvulas (1, 2, 3 y 4 en Figura 26) están cerradas. Previo a correr el experimento, toda la tubería debe haberse calentado al menos durante ocho horas por encima de 110 °C. Este proceso se conoce como “baking” y tiene como fin eliminar agua y algunos gases adheridos a las superficies de los tubos y conexiones. El calentamiento se hace con cintas térmicas enrolladas a lo largo de la tubería y envolviendo todo en papel aluminio. Hecho lo anterior, se inicia la evacuación de gases adsorbidos (outgassing) en el interior del sistema al encender la bomba mecánica. Puede o no abrirse inmediatamente la válvula 1. Si se abre se comenzará a evacuar la cámara y se reflejará en la lectura del manómetro, caso contrario se evacuará toda la tubería hasta la válvula 1. Con la presión en el orden de 10^{-3} Torr se abren las válvulas 2 y 3. Con la presión estabilizada se enciende la bomba turbomolecular. Al encenderla uno debe estar atento a que en un tiempo razonable en la pantalla o “display” de la bomba turbo aparezca la lectura “condiciones normales de operación”. Con el encendido de esta bomba la presión continuará bajando. Una vez que el medidor de presión reporta presiones del orden de 10^{-6} torr podemos abrir la válvula 4 y encender las otras dos bombas (criogénica y de sublimación de titanio). Con ambas bombas podremos alcanzar los niveles de ultra-alto vacío. Finalizada la corrida del experimento se apagan las bombas y se cierran las válvulas. El apagado de las bombas y el cerrado de las válvulas deben hacerse en el orden inverso al de apertura. Si se va a abrir la cámara para recargar la muestra, se apaga la bomba mecánica, usualmente no se apagan ni la bomba iónica ni la de sublimación y sólo se cierra la válvula de acceso a ellas; después se abre una válvula que permite entrar un gas inerte (usualmente nitrógeno seco de alta pureza) poco a poco al interior de la cámara. Este proceso se conoce como venteo. Es conveniente que la recarga se haga rápidamente y que durante el tiempo en el que la cámara este abierta el N_2 continúe circulando al interior. Siempre que se trabaje con piezas que estarán al vacío estas deben ser sometidas a limpieza con agua, jabón y baños ultrasónicos en alcohol o acetona. Lo anterior con el fin de eliminar contaminantes como grasas adheridas a sus superficies.

Como vimos, al igual que en el anillo de almacenamiento y el monocromador el vacío es fundamental para el espectrómetro y los experimentos. Un vacío óptimo en cada uno de los componentes del sistema (anillo, óptica, estación de trabajo) constituye un requerimiento indispensable para la conducción de un experimento que utilice radiación sincrotrónica y se traduce respectivamente en: una vida media larga del haz de electrones, en una buena salida de fotones del monocromador, en una densidad adecuada de objetivos en la celda de interacción y en general buenas condiciones para obtener espectros. El vacío en el anillo de almacenamiento es del orden de 10^{-11} torr. Esto ajusta perfecto con la necesidad de un vacío similar e incluso más alto (para energías de Rayos X blandos en adelante) en la región del monocromador; sin embargo puede conflictuar con los requerimientos de vacío en la cámara experimental. Este no es el caso para experimentos en fase condensada (superficies) donde se requiere siempre ultra alto vacío (10^{-10} - 10^{-13} torr), pero si lo es para experimentos en fase vapor. Últimos para los que dentro de la celda de interacción las presiones son relativamente altas (del orden de 10^{-5} torr o más). Las interfaces entre las diferentes secciones son determinadas

por los diferentes requerimientos de vacío a cada lado de la interfase. Estas interfaces pueden ser válvulas manuales (V2 en Figura 27) o neumáticas (V1 y V3 en Figura 27), elementos ópticos o estaciones de bombeo diferencial. Las estaciones de bombeo diferencial mantienen gradientes de presión constantes entre dos regiones conectadas entre sí por algún conducto. Se define el factor de separación de presión F como el cociente de las presiones entre las dos regiones ($F = P_1/P_2$; por ejemplo $P_1 > P_2$) y puede ser en una buena aproximación igual a el cociente $C [l s^{-1}] / S [l s^{-1}]$; donde C es la conductancia y S la velocidad de bombeo. Una estación de bombeo diferencial trabajará óptimamente con la menor relación conductancia/velocidad de bombeo posible ($C [l s^{-1}] / S [l s^{-1}]$), este acuerdo se logra buscando mantener la conductancia C lo más pequeña posible [61]. La conductancia $C [l s^{-1}]$ es una medida de la facilidad con la que fluye un gas a través de un conducto. Es inversamente proporcional a la longitud del conducto por el que el gas fluye y directamente proporcional al diámetro del mismo. Por esta razón usualmente se usan tubos capilares para conectar las dos regiones. La velocidad de bombeo $S [l s^{-1}]$ es una medida de la velocidad de remoción del gas del sistema. Una descripción detallada sobre las consideraciones y procesos involucrados en el funcionamiento de una estación de bombeo diferencial puede encontrarse en el trabajo de Becker y referencias en él [61]. Después de esta breve discusión debe haber quedado claro que el diseño del sistema de vacío debe hacerse tomando en cuenta las condiciones ideales para conducir el experimento, necesidades y limitantes físicas así como presupuestales.

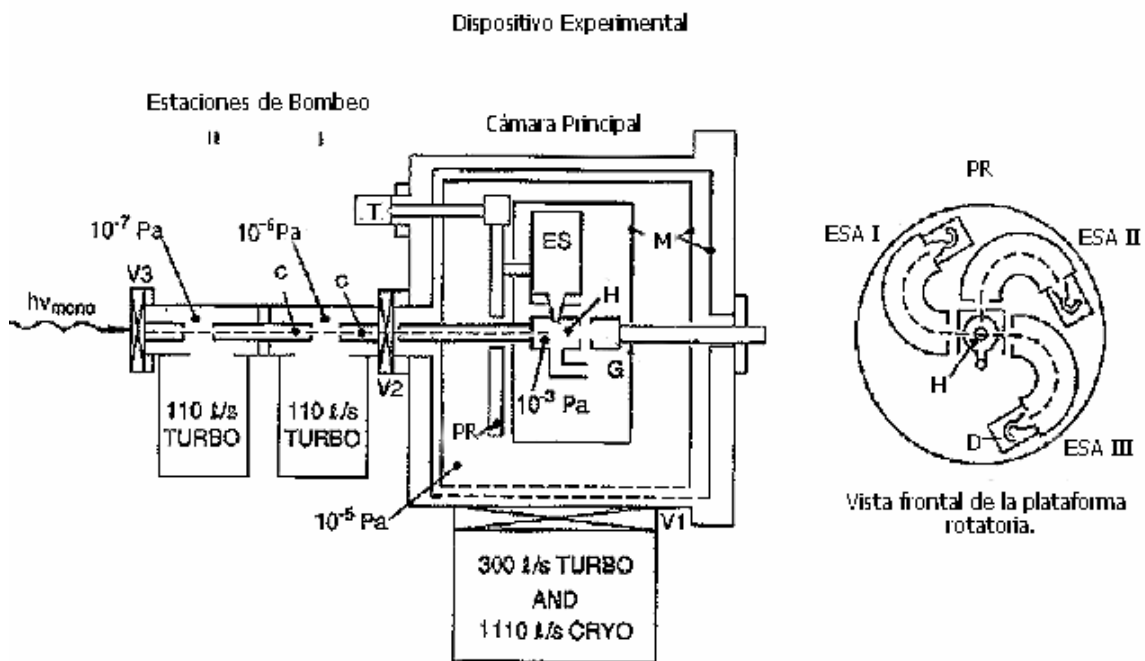


Figura 27. Dispositivo experimental.

En nuestro arreglo experimental (Figura 27), en condiciones normales de operación tenemos un vacío de 10^{-9} torr del lado del monocromador y de 10^{-5} torr dentro de la celda de interacción. Ambas regiones están conectadas entre sí por un capilar de vidrio.

El factor de separación de presión (F) para este caso es de 10^4 . El sistema de bombeo diferencial está formado por dos bombas turbomoleculares de 110 ls^{-1} cada una, colocadas antes del capilar del lado hacia el anillo. El vacío del lado de la cámara experimental se obtiene con dos bombas, una turbomolecular de 300 ls^{-1} y otra criogénica de 1100 ls^{-1} . Ambas bombas están separadas de la cámara por válvulas neumáticas de compuerta (V1) y están conectadas al sistema interbloqueador de seguridad de vacío. En caso de fallar el suministro de energía eléctrica ambas se cierran y permanecen así hasta que el operador las vuelve a abrir. El anillo de almacenamiento es protegido de cambios abruptos de presión en la celda de reacción por medio de válvulas tanto manuales como neumáticas. Las presiones son evaluadas con medidores iónicos, termopares y de aguja. En la Figura 27 se pueden ver la ubicación de las bombas, del capilar y las presiones típicas en cada región. Entre el anillo y la cámara experimental existen varias válvulas neumáticas conectadas (como ya se mencionó) a sistemas interbloqueadores. Durante los experimentos siempre se busca proteger el vacío del anillo. En este sentido, para evitar daños en el vacío del anillo siempre se abren las válvulas empezando por la de la cámara experimental y terminando con la que da entrada a la radiación del anillo. El cerrado de las válvulas es entonces en el orden inverso. Como hemos visto el vacío es indispensable durante la conducción de nuestros experimentos.

Hemos visto ya la fuente de radiación, la óptica (que nos permite extraer y seleccionar la radiación) y el sistema de vacío de nuestro dispositivo experimental. Hablemos ahora de la región de interacción

4.2 Fuente de átomos

En esta sección se describe el horno, o mejor dicho los hornos. El horno fue diseñado para estudiar elementos metálicos como átomos libres. De manera muy general, si el elemento en estudio es un metal, la generación de la nube de átomos se hace colocando cierta cantidad de él dentro de un contenedor o crisol metálico que soporta altas temperaturas permitiendo que la muestra en su interior se evapore y emerja hacia una región donde interacciona con la radiación electromagnética.

La presión de vapor es la presión de un vapor (de átomos o moléculas) en equilibrio con su fase no gaseosa (líquida o sólida) y depende de la temperatura. Si esta fase no gaseosa se tiene a una temperatura dada dentro de un recipiente cerrado, cierto número de moléculas o átomos con suficiente energía cinética dejarán la superficie hasta alcanzar un equilibrio, en él, el mismo número partículas que deja la superficie regresa a la fase condensada. En este punto se dice que el vapor está saturado y la presión de ese vapor se conoce como la presión de vapor de saturación. Si el líquido está en un recipiente abierto entonces la presión es parcial al igual que la de los otros constituyentes del aire presente. Entonces, a una temperatura dada, las sustancias con alta presión de vapor se evaporan fácilmente (volátiles) y las que tienen baja presión de vapor se evaporan lentamente.

Por las altas temperaturas a las que esto ocurre los crisoles comúnmente empleados son de Tantalio (Ta) [mp: $3017 \text{ }^\circ\text{C}$, bp: $5458 \text{ }^\circ\text{C}$, vp($2531 \text{ }^\circ\text{C}$): 1.08×10^{-4} torr] o Tungsteno (W) [mp: $3422 \text{ }^\circ\text{C}$, bp: $5555 \text{ }^\circ\text{C}$, vp($2835 \text{ }^\circ\text{C}$): 2.45×10^{-4} torr]. El calentamiento se logra haciendo pasar una corriente eléctrica a través de unos alambres también de Ta o W que

están enrollados en torno del crisol. Al ir aumentando la temperatura del crisol la presión de vapor y la densidad de átomos en fase vapor aumenta. Si existe un lugar por

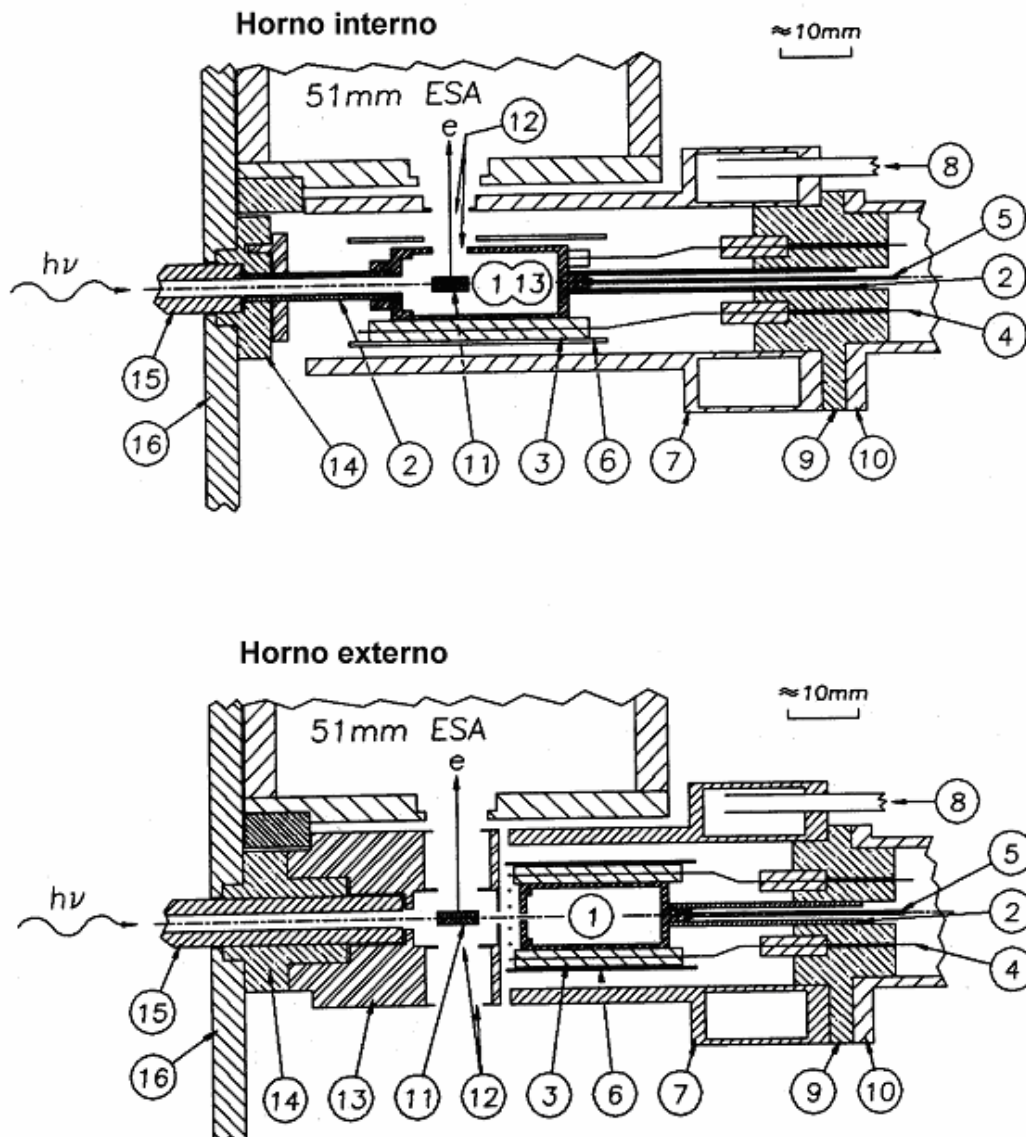


Figura 28. Hornos interno y externo. Los componentes son el crisol (1) de Ta o W, el tubo de soporte que es de Mo (2), tubo aislante de Al_2O_3 (3), salida de los alambres del embobinado de W o Ta (4), termopar (5), la hoja de Ta que recubre el crisol embobinado (6), la camisa de Cu para enfriamiento (7), los tubos de entrada (8) y salida del agua, el soporte aislante de macor (9), la varilla de Al (10), la fuente de fotoelectrones (11), las rendijas rectangulares de Mo (12), la celda (13) de Cu libre de oxígeno en el caso del horno externo o el mismo crisol en el horno interno de Ta o W, el soporte de macor para alineamiento (14), el capilar de vidrio (15) y la plataforma rotatoria (16). ESA representa la posición de un analizador electrostático.

el que ellos puedan salir del crisol lo harán. Una vez que se alcanza la densidad de átomos suficiente ($P = 10^{-4}$ torr) dentro de la región de interacción como para producir

una señal de fotoelectrones medible el calentamiento cesa. Existen dos tipos de horno, el interno y el externo. El diseño en ambos permite que se puedan estudiar gases con el horno colocado y funcionando. El primero es generalmente utilizado para estudiar elementos metálicos que alcanzan la presión de vapor óptima por encima de los 1100 °C mientras que el segundo es utilizado preferentemente para estudiar elementos metálicos con presión de vapor elevada a temperaturas alrededor de varios cientos de grados centígrados. Las diferencias existentes entre ambos diseños se harán evidentes a medida que avancemos en la descripción. La más notable es que en el horno interno el crisol funciona como fuente de átomos y celda de interacción al mismo tiempo, mientras en el horno externo solo como fuente de átomos. Aunque fue diseñado para estudiar elementos sólidos y metálicos, el horno también puede utilizarse para estudiar sólidos que pasen a fase vapor como moléculas, dímeros o cúmulos.

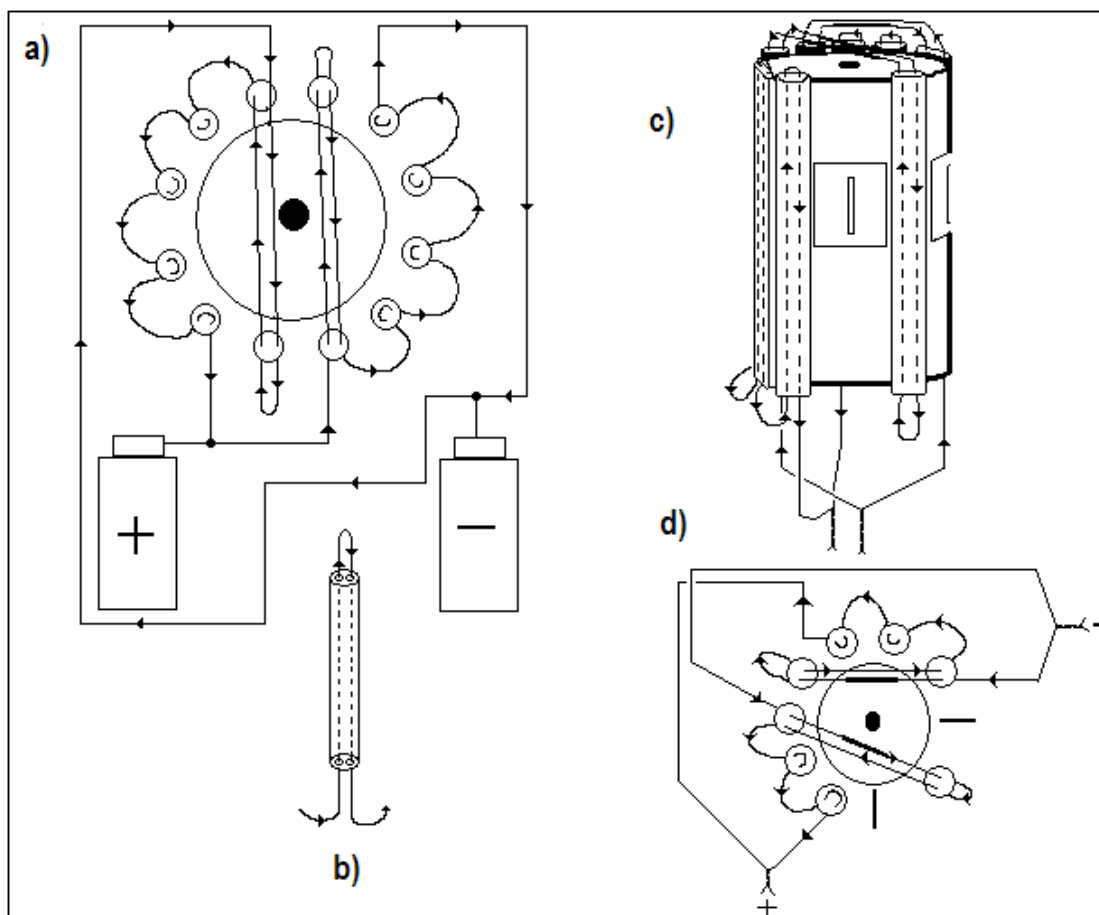


Figura 29. Embobinado de los hornos externo e interno. Panel a) vista superior del crisol del horno externo, los círculos pequeños alrededor representan los cerámicos (b) por los que circula el alambre de tungsteno o tantalio, las flechas indican el sentido en el que se embobina. En el panel c) se muestra el crisol del horno interno (con sus rendijas) embobinado con sus espaciadores cerámicos (b), el sentido en el que se introducen los alambres esta indicado por flechas. En el panel d) se muestra una vista superior del esquema c).

Experimentalmente hablando, por “el horno” se entiende el conjunto de dispositivos que permiten producir el vapor de átomos del elemento metálico a estudiar. En esta parte del

escrito, los números entre paréntesis indicarán la parte del horno con el mismo número en la Figura 28. Los componentes de los hornos externo e interno se muestran en la misma figura y se enuncian a continuación. Estos son: un crisol de Ta o W (1) con sus rendijas (12) (horno interno), el alambre que se enreda a él para calentarlo resistivamente (4), la hoja de Ta que lo envuelve (6), el soporte de molibdeno (2) que sostiene el crisol, la celda (13) (en el caso del horno externo) con sus rendijas (12) de Mo, el material cerámico (macor) que aísla las partes (14) y las conexiones (9) eléctricas, el sistema de enfriamiento formado por la camisa de cobre (7) con su entrada (8) y salida de agua.

El ensamble de ambos hornos y su puesta en operación es el siguiente: primero se embobina el crisol. Para ello se utilizan alambres de tungsteno (0.010 pulgadas) o de tantalio (0.015 pulgadas). La longitud de cada alambre debe ser de aproximadamente (no menos) 40 cm y deben dejarse aproximadamente 3 cm en los extremos para las conexiones. Este enredado es hecho pasando el alambre a través de espaciadores cerámicos (paneles b y d de la Figura 29). El sentido en el que circula la corriente (directa) impide que esta afecte la distribución angular de los fotoelectrones. Revisemos el cómo y el porqué ocurre así: por un lado el embobinado está hecho con el mismo alambre, que va en una dirección y regresa en la dirección opuesta dentro del cerámico, y como la distancia entre un sentido de circulación y otro es muy pequeña podemos decir que el campo magnético neto es cero. Se hace cero porque las líneas de campo magnético que genera la corriente circulando en una dirección se cancelan con las que se generan cuando la corriente circula en la dirección contraria. Si existiera un campo magnético presente (generado por el paso de la corriente), cuándo emergiera el fotoelectrón de la región de interacción con cierta energía cinética, sentiría la acción de una fuerza que lo desviaría de su trayectoria original. En ambos casos el embobinado se hace con pinzas o en su defecto manualmente usando guantes de látex. Hecho lo anterior se mide la resistencia debiendo tener un valor de 0.2Ω para W (0.010 pulgadas) y de 0.5Ω para Ta (0.015 pulgadas). El valor de la resistencia es el esperado cuando ningún alambre toca el crisol. Después se cubre el crisol embobinado con una hoja de Ta (6) sujeta al crisol con dos alambres de W o Ta. Esto se hace para evitar pérdidas de calor por emisión de radiación. El crisol (1) en ambos hornos es soportado por un pequeño tubo de molibdeno (2), un alambre de cobre amarrado a este hace contacto con la hoja de tantalio y es referido a tierra. Este tubo de molibdeno (2) se fija sobre un cerámico (9) que descansa sobre una varilla hueca de aluminio (10) a través de la cual pasan los cables de tierra, el del voltaje para la celda (horno interno) y los encargados de calentar resistivamente el crisol (4). Ningún cable para calentamiento debe tocar el cable a tierra o la varilla de aluminio. Esta varilla de aluminio (10) se encuentra fija a una brida de acero inoxidable de 6 pulgadas de diámetro. El siguiente paso es colocar la camisa de cobre (7) y ajustar las conexiones de agua (8). Al colocar las conexiones de agua es muy importante revisar que estas tengan su arosello o empaque de vitón. Montado el horno y sellada la brida se revisan las conexiones desde afuera: los cables provenientes de la fuente de poder para el calentamiento no deben tocarse entre sí, uno de ellos se refiere a tierra junto con una de las conexiones de agua. Hecho lo anterior se procede a remover todos los gases y compuestos adsorbidos (disolventes orgánicos, agua, grasas, etcétera...) a las paredes del horno, para ello se calienta el horno incrementando la corriente en pasos de medio Ampere cada 20 minutos hasta que la potencia alcanzada corresponda a $1200 \text{ }^\circ\text{C}$; ya ahí, se deja a esa temperatura alrededor de 2 horas para luego enfriarlo gradualmente, bajando la potencia en intervalos de 20 minutos a la vez que se monitorea la presión. Una vez removidos los compuestos

volátiles adsorbidos es posible cargar el horno, para ello se toma el elemento metálico o sólido a estudiar, se coloca dentro de una bolsa con nitrógeno o argón fluyendo suavemente al interior y de ser posible se lija su superficie. El lijado se hace para remover de la superficie el óxido formado. Si la muestra es en forma de alambre se corta en pequeños pedazos de longitud menor a 1 cm y se introducen cuidadosamente por la apertura circular en la tapa del crisol. Una vez cargado el crisol (1) nuevamente se le coloca la camisa de cobre (7) y se ajustan las conexiones de agua (8). Se revisan nuevamente las conexiones, se coloca un nuevo sello de cobre en el filo de la brida. Posteriormente con ayuda de dos varillas se monta desde la parte frontal de la cámara del espectrómetro. Montado el horno y sellada la cámara se inicia el calentamiento haciendo pasar una corriente generada por una fuente de poder a través del embobinado. El calentamiento se detendrá hasta alcanzar la temperatura necesaria para producir el vapor de átomos del metal en la densidad apropiada. La temperatura máxima alcanzable es alrededor de los 1300 °C. Las cargas en el horno duran de 30 a 60 horas y de 100 a 400 horas para el horno externo y el interno respectivamente. Una caída en la señal de fotoelectrones puede ser indicativa de que el horno debe cargarse nuevamente. Cuando esto sucede o al terminar el tiempo para ocupar la radiación del anillo el horno debe ser enfriado. El proceso de enfriamiento se hace bajando la corriente que la fuente de poder suministra gradualmente y en intervalos de tiempo regulares de entre 15 y 20 minutos. Antes de ventilar el sistema uno debe asegurarse que el horno esté a temperatura ambiente y que los “chaneltrones” estén en voltaje cero, esto porque la oxidación los vuelve a ambos muy vulnerables. La deposición de vapores principalmente sobre la celda y el capilar hace que estos requieran limpieza cada 20 o 30 horas de operación. El proceso de limpieza y reensamble toma al menos dos horas.

4.2.1 Horno externo

En la Figura 29 panel a) se muestra una vista superior de la manera en que se enreda el alambre en el horno externo. Se pueden ver los espaciadores cerámicos (panel b).

Ya que se ha montado el horno externo embobinado y cubierto con la hoja de tantalio en la varilla de aluminio (10) se le coloca su camisa de cobre (7) con los tubos por los que circulará agua (8) con fines de enfriamiento. Únicamente la tapa con el orificio por el que emergerá la nube de átomos hacia la celda de interacción (13) permanece descubierta. La celda (13) es de cobre libre de oxígeno y está montada sobre una plataforma rotatoria (16). Esta celda (13) se encuentra alineada tanto con la apertura en la tapa del crisol (1) como con un capilar de vidrio (15) por el que se viaja la radiación proveniente del anillo de almacenamiento. Perpendiculares a la dirección de propagación de la radiación y sobre los lados de la celda se encuentran las aperturas rectangulares (12) por las que emergen los fotoelectrones (11) producidos en su interior. Cada una de las aperturas rectangulares (12) sobre la celda de cobre (13) tiene alineadas y atornilladas rendijas de molibdeno. La celda y sus rendijas de molibdeno se cubren de grafito ya que por su color elimina reflexiones de radiación que puedan generar fotoelectrones que interfieran con el experimento, y si esto ocurre, por ser conductor los absorbe refiriéndolos a la tierra del equipo. Alineadas con estas rendijas se encuentran las entradas a los analizadores electrostáticos (ESA en la Figura 28). Estos se encuentran montados en la misma plataforma rotatoria (16) que la celda (13) y espaciados entre sí en intervalos de 90°. Este diseño permite que la celda y los analizadores electrostáticos puedan rotarse libremente e independientemente del horno externo. El horno externo permite trabajar hasta con tres analizadores electrostáticos simultáneamente. Mas adelante hablaremos nuevamente sobre ellos al abordar la

descripción del sistema de detección. Como se mencionó, el horno externo es deseable para experimentos en elementos metálicos o sólidos moleculares que no requieren altas temperaturas para alcanzar densidades suficientes para hacer la espectrometría de fotoelectrones. Por ejemplo en Li con el horno a 530 °C la presión en la celda de interacción fue del orden de 1×10^{-2} Pa y fue suficiente para obtener espectros [62].

4.2.2 Horno Interno

En la Figura 30 paneles c y d se muestra la manera en que se embobina el horno interno. El llamado horno interno es el más deseable para trabajar con elementos metálicos que requieren una temperatura considerablemente mayor (1100 °C). En este caso el mismo crisol (1) se convierte en la fuente de fotoelectrones (13) al ser su interior la región de interacción con los fotones. Como veremos, una de las formas de tomar espectros requiere que se aplique un voltaje sobre la celda. Nosotros utilizamos esta opción. En el diseño del horno externo el cable que proporciona este voltaje no está expuesto, pero en el diseño del horno interno el cable se conecta desde la brida y aplica su voltaje precisamente sobre la camisa de cobre con rendijas que envuelve el crisol. Aquí, el haz de fotones también pasa a través del capilar de vidrio (15) alineado a la apertura de 2mm de diámetro en la tapa del crisol. Los fotones interactúan con la nube de átomos y se producen los fotoelectrones. Una o dos rendijas rectangulares (11) hechas sobre la superficie del crisol (1, 13) coinciden con rendijas rectangulares sobre una camisa de cobre (7) para enfriado (también con sus rendijas de molibdeno) que a su vez están alineadas con las rendijas de entrada de los analizadores electrostáticos (ESA). A diferencia del horno externo, el horno interno una vez introducido en la cámara del espectrómetro se mantiene fijo a un ángulo determinado. Si se utiliza el horno interno que tiene una sola rendija solamente se podrá determinar la sección eficaz parcial de fotoionización, por lo que usualmente se coloca al llamado ángulo mágico. Recordemos que para este ángulo la cantidad de fotoelectrones que llegan al detector es independiente del parámetro de distribución angular del fotoelectrón que se esté midiendo [23,34]. En el caso de usar el que tiene dos (espaciadas entre sí 90°), el crisol y los analizadores son rotados de modo que las rendijas coincidan en 0° y 90°. Lo anterior permite tomar espectros de fotoelectrones de manera independiente para los dos ángulos dejando abierta la posibilidad de medir parámetros de distribución angular de fotoelectrones. Con la opción de que a partir de ellos es posible extraer la sección eficaz parcial de fotoionización. Como vemos este diseño presenta varias ventajas, la primera y probablemente la más importante es que permite una reducción en la presión de vapor necesaria para producir una señal medible. Esto ya que la presión de vapor dentro del horno es cerca de un orden de magnitud mayor a la presión de vapor inmediatamente después de la apertura. Lo anterior hace posible medir vapores metálicos que en el horno externo serían muy complicados e incluso imposibles de medir. Otra ventaja es que permite trabajar con temperaturas menores a las que serían necesarias con el horno externo favoreciendo que los átomos en estudio estén predominantemente en su estado base.

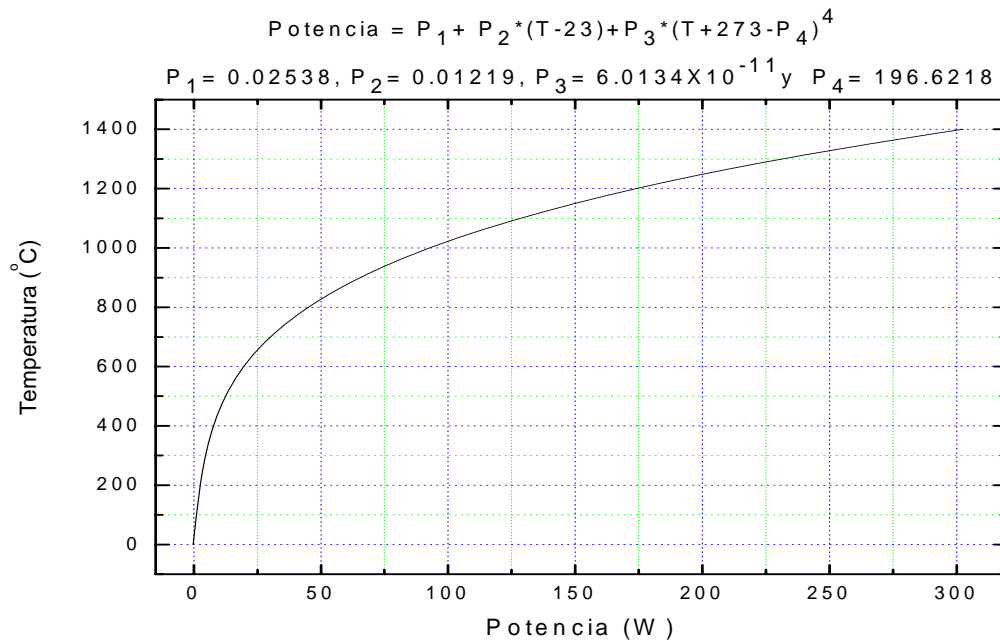


Figura 30. Gráfico utilizado para estimar la temperatura del horno interno o externo conociendo el valor de la potencia.

Como vimos, ambos diseños operan bajo el mismo principio pues son calentados resistivamente. Se mencionó que con la fuente de poder se suministra un voltaje al circuito formado por el embobinado. A cada voltaje le corresponde una corriente que se determina con buena precisión usando un amperímetro. El producto del voltaje suministrado (V) por la corriente correspondiente (A) nos da potencia (W). En experimentos anteriores para cada valor de potencia suministrada se midió con un termopar la temperatura alcanzada en el horno. Tras graficar la temperatura como función de la potencia se obtuvo una curva como la que se muestra en la Figura 30. Para esta curva se encontró el polinomio que ajusta la curva [63], mismo que se muestra en la Figura 30. De modo que con este gráfico, o con el polinomio, es posible estimar la temperatura de operación del horno a partir de los datos de potencia.

Con los fotones de energía adecuada incidiendo sobre la nube de átomos produciremos fotoelectrones, mismos cuya energía cinética deseamos medir. Entonces en este momento resulta natural pasar a hablar sobre el sistema de detección de nuestro espectrómetro. Así pues iniciaremos con la descripción del funcionamiento y las conexiones de los analizadores electrostáticos (ESAs) que nos permiten conocer la energía cinética de los fotoelectrones para proseguir con el principio de operación y conexiones los “chaneltrones” que nos permiten contarlos.

4.3 Detección.

El sistema de detección está constituido por los analizadores electrostáticos (ESAs por sus siglas en inglés) y los detectores o chaneltrones (CEMs). Como vimos en la sección del horno, estos analizadores están montados sobre una plataforma rotatoria colocada de manera perpendicular al eje de propagación de la radiación. Vimos que el crisol o la celda tienen rendijas que definen la trayectoria de los fotoelectrones y que estas están alineadas a las rendijas que tienen los analizadores. De esta manera los fotoelectrones

emergentes de la región de interacción entran a los analizadores electrostáticos y, como veremos solo llegarán a los detectores los que cumplen una condición especial: que la energía cinética con la que entran al analizador sea la misma para la que estos estén programados a dejar pasar. El proceso irá quedando claro al avanzar en esta sección. Un fotoelectrón que llega al “chaneltrón” hace que este genere un pulso eléctrico. El pulso pasa por un preamplificador, un contador, un discriminador y un escalador multicanal para finalmente una PC programada construye el espectro.

4.3.1 Analizadores Electrostáticos (ESAs)

El sistema de detección está basado en los analizadores electrostáticos (ESAs). Supongamos que tenemos dos esferas conductoras concéntricas y que sus superficies están puestas cada una a un potencial $\pm V$ (ver Figura 31). A una distancia r del centro el potencial en unidades MKS viene dado por

$$V = \frac{q_1}{4\pi\epsilon_0 r} + c \quad (51)$$

donde q_1 la carga total, c es una constante que permite ajustar el valor del cero de referencia y ϵ_0 es la constante de permitividad en el vacío. Podemos escribir expresiones similares a la ecuación (51) para el potencial en cada esfera. Haciendo para la esfera interna $V_1 = V_+$ y para la externa $V_2 = V_-$, podemos encontrar expresiones para q_1 y c en función de los radios (r_1 y r_2) de cada esfera. Tras resolver para el potencial para un radio r entre las dos esferas podemos obtener

$$V(r) = \frac{2Vr_1r_2}{r_2 - r_1} \frac{1}{r} - V \left(\frac{r_1 + r_2}{r_2 - r_1} \right) \quad (52)$$

En donde podemos ver que el potencial entre las dos esferas está determinado por el radio r de la orbita, por el voltaje (V) que se ponga entre las esferas y sus radios (r_1 y r_2). Después, el hacer $r = (r_1 + r_2)/2$ nos permite conocer el valor del potencial para un radio en medio de las dos esferas.

Es sabido que al haber una diferencia de potencial se genera un campo eléctrico. Con lo anterior en mente imaginemos que ponemos un electrón en el espacio entre las dos superficies esféricas. La fuerza eléctrica que siente un electrón al pasar justo en medio de las dos esferas viene dada por

$$\vec{F}_e = -\frac{eq_1}{\pi\epsilon_0(r_1 + r_2)^2} \hat{r} = -\frac{8eVr_1r_2}{(r_1 + r_2)^2(r_2 - r_1)} \hat{r} \quad (53)$$

donde $-e$ representa al electrón y su carga. Para que el electrón circule a velocidad constante en la trayectoria descrita por el radio promedio entre las dos esferas debe ocurrir que la fuerza centrípeta iguale a la fuerza eléctrica. Así

$$-\frac{2mv^2}{r_1 + r_2} \hat{r} = -\frac{8eVr_1r_2}{(r_1 + r_2)^2(r_2 - r_1)} \hat{r} \quad (54)$$

y reorganizando (54) se convierte en

$$Ec = \frac{1}{2}mv^2 = 2eV \frac{r_1 r_2}{r_1^2 - r_2^2} = f|V|(eV) \quad (55)$$

de modo que para un voltaje dado en las hemiesferas un electrón orbitará el radio promedio a una velocidad constante y con energía cinética Ec (55).

Si nosotros cortamos una rebanada del arreglo de ambas esferas de manera que este corte sea de apertura angular Φ (ver panel izquierdo Figura 31) tendremos una sección como la que se muestra en el panel derecho de la misma figura. Esta es la forma que tienen los analizadores electrostáticos. La eficiencia de los analizadores depende de la energía cinética de los fotoelectrones entrantes. La dependencia es lineal en la energía y en el voltaje. Experimentalmente, un haz divergente de fotoelectrones proveniente de una rejilla de la celda de interacción con energía cinética Ec , se enfocará en la rendija de salida del analizador si el campo eléctrico generado por la diferencia de potencial es tal que los electrones siguen la trayectoria circular hasta la salida. Lo anterior ocurre si se cumple la ecuación (55). En nuestros analizadores f tiene un valor de 5.37. Para energías por encima de 1 keV se deben considerar correcciones relativistas al tratamiento anterior [23].

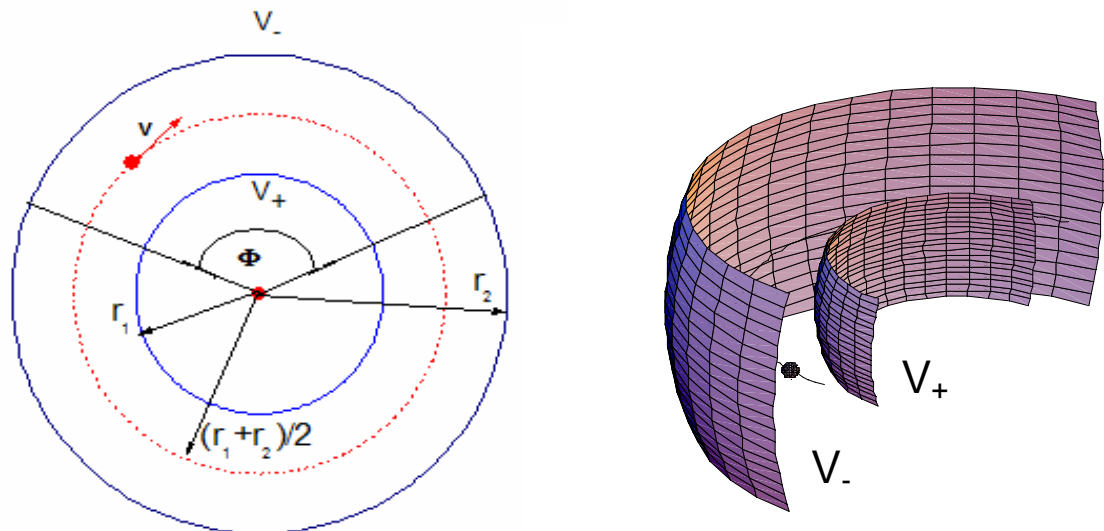


Figura 31. Se muestra en el panel izquierdo una representación de superficies hemisféricas equipotenciales. La esfera interna de radio r_1 es puesta a un voltaje positivo V_+ , la esfera externa de radio r_2 a un voltaje igual en magnitud al de la esfera interna pero con signo contrario V_- . El círculo punteado representa la órbita que seguiría un electrón moviéndose a velocidad constante en medio de las dos esferas. Φ es el ángulo al que se cortan las superficies esféricas para hacer un analizador electrostático. Este ángulo puede variar dependiendo del diseño, en nuestro caso mide 127.28° . En el panel derecho se muestra una representación del mismo analizador. El punto oscuro representa un electrón moviéndose en medio de una rebanada del arreglo que está en el panel derecho. Las Figuras fueron proporcionadas generosamente por el Dr. José Jiménez.

La resolución de un analizador de sector esférico esta dada como un porcentaje, esto es $\Delta E/E$, donde ΔE es el ancho completo a media altura del pico (FWHM) y E es la

energía de paso. Para este tipo de analizadores la resolución en energía es aproximadamente [64]:

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{\omega}{R(1 - \cos \Phi) + l \sin \Phi} \quad (56)$$

donde Φ es el ángulo que se muestra en la Figura 27, l es la distancia medida desde la salida del analizador hasta la rendija de salida (del orden de 1 cm), ω es el tamaño de las aperturas de entrada y salida (0.05 mm – 0.1 mm) y R es el radio medio (usualmente varios cm) entre las dos hemisferas. En nuestro caso la resolución nominal de nuestros analizadores electrostáticos es del 1% [18]. De analizar la ecuación (56) podemos ver que la resolución aumenta con el incremento en el valor de l o R y con la disminución de ω . Usualmente se busca hacer un compromiso entre la resolución (variando la apertura ω y la energía de paso) y la intensidad de la señal transmitida.

Descrito el funcionamiento de los analizadores electrostáticos veamos en la Figura 32 un esquema en el que se muestra la manera en que se conectan típicamente un analizador electrostático y su electrónica. En ella el cuadrado con el número 1 en su interior representa la fuente de voltaje que aplica la diferencia de potencial en las placas del analizador, 2 representa la fuente de voltaje para ajustar el “cero” de la rampa, 3 es la fuente que suministra la rampa de voltaje y 4 es el programador de voltaje para la rampa [64].

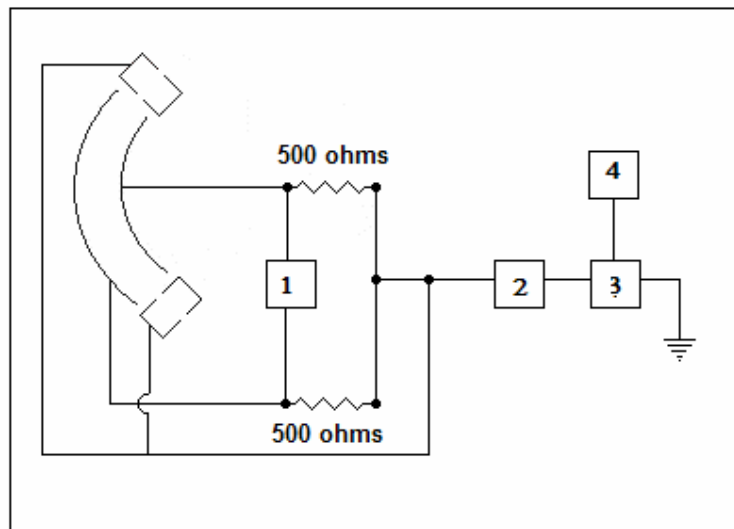


Figura 32. Conexiones típicas de un analizador electrostático de sector esférico para operar en el modo de transmisión constante.

4.3.2 “Chaneltrones” (CEMs)

Si se usa el analizador electrostático como herramienta de diagnóstico el uso de un detector se vuelve necesario para observar las partículas transmitidas. Para contar partículas con energías de transmisión moderadas (varios cientos de eV), la elección de un “channelplate” o un “channeltron” es apropiada.

Los “chaneltrones” Channel Electron Multipliers (CEMs) se emplean para detectar partículas cargadas y fotones [65]. El “chaneltrón” consiste en un pequeño cono de material conductor (ver Figuras 33 y 34) conectado a un tubo de vidrio cuya pared interior está recubierta de silicatos (SiO_2) semiconductores que presentan el fenómeno de emisión secundaria de electrones. El diámetro interno es de aproximadamente 1mm y el externo puede ser de entre 2 y 6 mm. En la Figura 33 se muestra un esquema del segmento de uno de ellos sin el cono. En la misma figura se aprecia que cuando un electrón saliente del analizador electrostático llega al cono y alcanza el tubo de vidrio se producen de dos a tres electrones secundarios. Este efecto generalizado da lugar a una “cascada” de electrones. Por la diferencia de potencial los entre 10^7 y 10^8 electrones generados llegan al final del tubo. Así por cada electrón que alcanza el cono se produce un pulso eléctrico que llega al colector (Electrical Isolated Colector), este pasa a un preamplificador discriminador (PAD) que separa la señal del ruido permitiendo que la primera alcance el contador y después el escalador multicanal.

En la Figura 33 se señalan los componentes y la operación básica del “chaneltrón”, podemos ver que un potencial positivo V_1^+ se aplica en la entrada y es mucho menor que V_2^+ a la salida, otra alternativa podría ser referir la entrada del detector a la tierra y al final aplicar un voltaje positivo muy grande (kV). Lo anterior se muestra en la Figura 34 en donde también se pueden ver las conexiones típicas de un “chaneltrón” para detectar electrones o partículas negativas. Para detectar iones positivos en la salida se aplicaría un voltaje negativo.

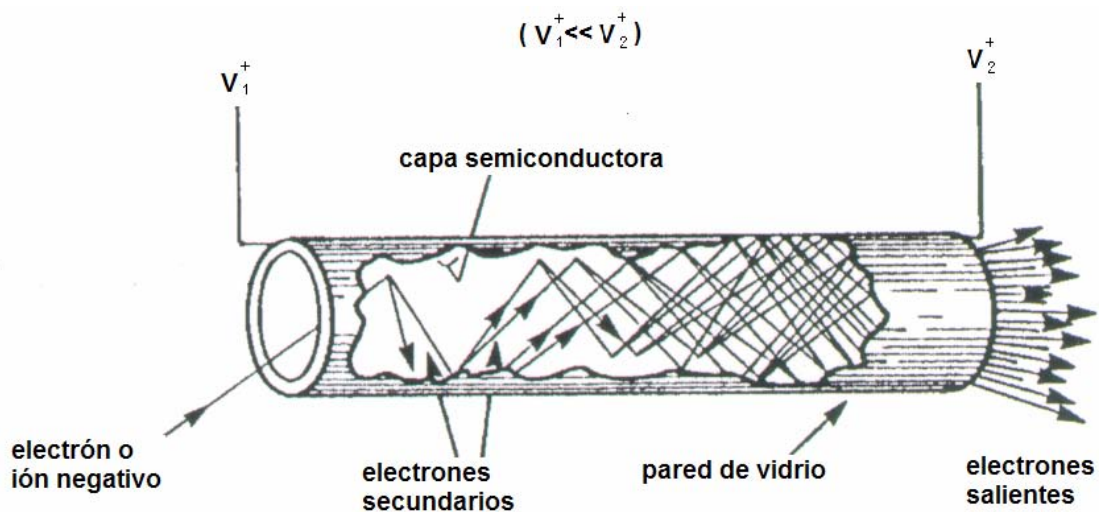


Figura 33. Operación básica del CEM.

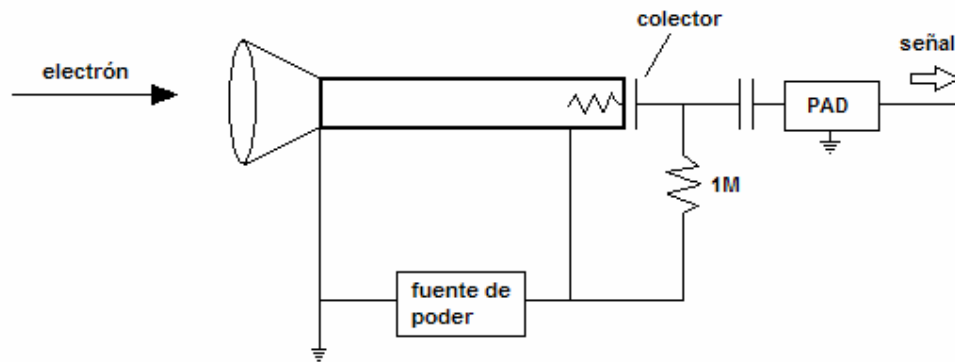


Figura 34. Conexiones típicas para la detección de electrones o iones negativos.

Hemos dicho anteriormente que con el fin de poder detectar electrones se aplica una diferencia de potencial a los chaneltrones. Los chaneltrones usados por nosotros dan respuesta entre los 2 y 4 kV. La meseta o plateau es una región en el intervalo de voltaje barrido en el que los CEMs dan esencialmente la misma respuesta. Para encontrar esta meseta se varía el voltaje que se les aplica a los CEMs en 0.1 kV registrándose después los electrones emergentes como pulsos eléctricos o comúnmente “cuentas”. En la Figura 35 se muestra un gráfico de respuesta típica para un “chaneltrón” al variar el voltaje que se le aplica. Se puede ver que su meseta de operación está entre 2.7 y 3.2 kV.

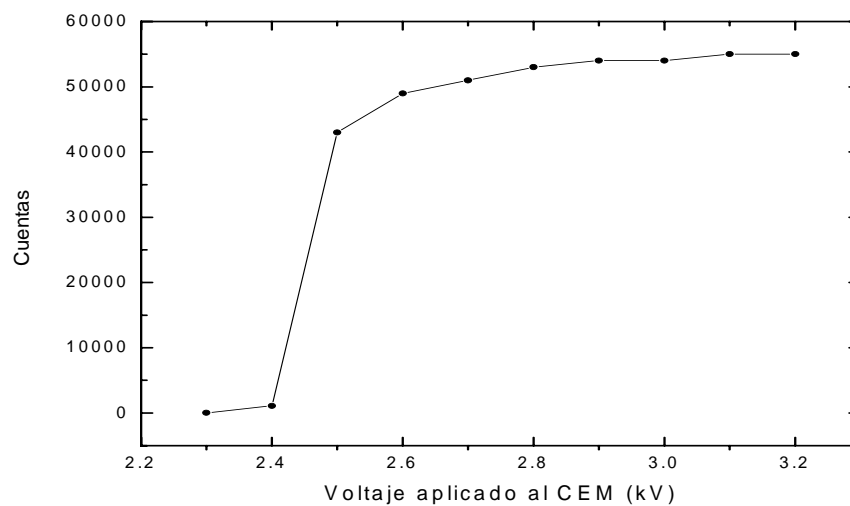


Figura 35. Respuesta de un “chaneltrón” al variar su voltaje de operación.

5. Modos de operar el espectrómetro.

En espectrometría de fotoelectrones de átomos y moléculas libres hay dos modos de tomar los espectros, cada uno proporciona información diferente y complementaria. Estos son el modo de espectrometría de fotoelectrones (Photo-Electron Spectrometry) y espectrometría de estado iónico constante (Constant Ionic State). En seguida se describen ambos y la información que nos proporcionan

5.1 Espectrometría de fotoelectrones (PES)

Un espectro de fotoelectrones se obtiene a una energía de fotones fija, los fotopicos que aparecen en él corresponden a fotoelectrones emitidos de acuerdo a los balances de energía (ecuación del fotoefecto de Einstein), de momento angular y de paridad. En un espectro de fotoelectrones la posición de cada pico (energía cinética) está relacionada directamente con la energía de amarre (E_B) del electrón de acuerdo con la ecuación de Einstein para el efecto fotoeléctrico. De esta manera un espectro de fotoelectrones nos da información sobre los niveles electrónicos del sistema en estudio (átomo, sólido o molécula) y dependiendo de la energía de los fotones puede ser la densidad de estados en la capa de valencia o en las capas internas.

En este tipo de espectros, un cambio en la energía de fotones se refleja en un desplazamiento del pico. La magnitud de este desplazamiento es igual al cambio en la energía de los fotones. La dirección del desplazamiento en la escala de energía cinética es hacia altas energías si se incrementó la energía de los fotones o hacia bajas energías si disminuyó. Este desplazamiento permite diferenciar fotopicos de picos de electrones Auger. Lo anterior resulta más o menos claro si recordamos que los fotopicos siguen la relación de Einstein para el efecto fotoeléctrico y que los electrones Auger resultan de transiciones entre dos niveles cuya diferencia en energía es constante.

Para obtener un espectro de fotoelectrones el analizador puede ser operado en dos diferentes modos. Estos son el modo de transmisión constante (barrido en la celda) y el de barrido de campo en el sector (barrido en las placas del analizador). Usualmente el modo de transmisión constante es el preferido. En este modo el voltaje V de las placas se fija en un valor constante. Este valor determina la energía a la cual los fotoelectrones son transmitidos a través del analizador. Por esta razón la energía cinética de la ecuación (55) se interpreta como una energía de paso. En este modo de operación todos los potenciales en el analizador son referidos a una rampa de voltaje que barre un intervalo de energía. En nuestro caso cuando se usa el horno externo la rampa de voltaje se aplica sobre la celda de reacción o en la camisa de cobre para enfriamiento al emplear el horno interno. Precisando, por ejemplo para nuestros analizadores, si el voltaje en las placas $|V|$ es puesto a 3.7244 volts de modo que solo fotoelectrones con energía cinética de 20 eV sean transmitidos ($f = 5.37$) y se desea tomar un espectro de 0 eV a 50 eV de energía cinética, el voltaje de la rampa tendrá que variar de -30 a +20 volts. De esta manera los electrones con energía de 0 eV serán acelerados a +20 eV antes de entrar al analizador y en el otro extremo del barrido los electrones de 50 eV serán retardados por -30 Volts para dejarlos con una energía cinética de 20 eV al entrar al analizador. Así todo el espectro habrá sido obtenido a resolución y transmisión constantes.

La otra forma de operar es la de barrido de campo en el sector (barrido en las placas). Aquí, rampas de voltaje de igual magnitud y de signo contrario se aplican sobre las superficies esféricas de los analizadores. De esta manera los cambios en el potencial

generan el espectro que será analizado, los cambios en el potencial afectan la eficiencia de la transmisión y la resolución.

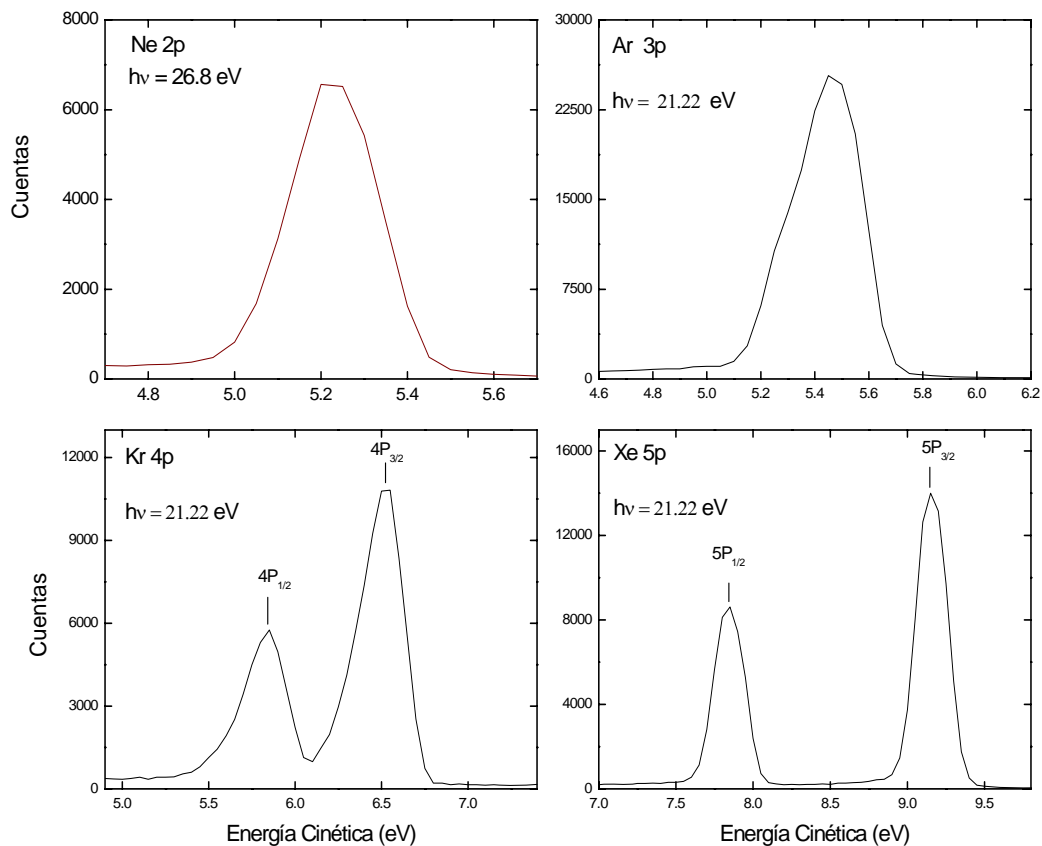


Figura 36. Espectros de fotoelectrones (PES) de Ne a energía de fotones $h\nu = 26.8$ eV y de Ar, Kr y Xe para energía de fotones $h\nu = 21.22$ eV.

En ambos casos los espectros PES se toman con ayuda de PCs programadas. Cuando se registra un espectro PES se generan tres columnas de datos. En la primera se registra la escala de energía cinética en pasos del orden de los meV. La división del intervalo barrido entre la magnitud los pasos nos da el número de canales. En la segunda y tercera columna se registran el número de fotoelectrones que se cuentan en cada canal. El tiempo de conteo (ct) de fotoelectrones en cada canal es típicamente de 0.2 segundos. El barrido de toda la escala de energía cinética (sweeps) se repite un número determinado de veces, usualmente 20.

En la Figura 36 se muestran espectros de fotoelectrones (PES) de Ne para energía de fotones $h\nu = 26.8$ eV y de Ar, Kr y Xe para energía de fotones $h\nu = 21.22$ eV. En todos los casos un electrón de la capa p de valencia es promovido al continuo. En los espectros de Xe y Kr se aprecian dos picos que corresponden a las dos posibles valores de J en acoplamiento LS ($l = 1$, $S = 1/2$, $J = 1/2, 3/2$), la separación de estos niveles comienza a notarse en Ar con el pequeño hombro del lado izquierdo y aumenta al descender en la familia. Como podemos ver en la Figura 36, los espectros de

fotoelectrones nos dan información sobre los niveles de energía electrónicos en las capas de valencia.

5.2 Espectrometría de estado iónico constante (CIS).

La espectrometría de estado iónico constante consiste en seguir el comportamiento de un fotopico particular del espectro de fotoelectrones (PES) al variar la energía de los fotones. Este seguimiento lo realiza el voltaje de la celda o el voltaje sobre los analizadores. Una PC programada controla el tiempo de adquisición de datos, la rampa de voltaje y se comunica con el monocromador para que este seleccione la energía de los fotones. Por ejemplo, supongamos que queremos seguir el comportamiento del pico $4P_{3/2}$ de Kr (Figura 36) para energía de fotones entre 15 y 30 eV. Lo primero es determinar la energía de amarre del pico de interés. En el espectro PES (Figura 36) vemos que su energía cinética es (en el máximo) de 6.5 eV, esto implica que su energía de amarre nominal es 14.72 eV. Por energía nominal nos referimos a la energía que se obtiene del experimento sin hacer las correcciones por las calibraciones. Por ello esta energía de amarre de 14.72 difiere de la reportada en la tabla 1 para el mismo fotopico.

Supongamos que estamos trabajando en el modo de transmisión constante y que la energía de paso de los analizadores es de 20 eV. Si queremos hacer un barrido de 15 eV en la energía de fotones de manera que nos revele detalles del comportamiento del pico los pasos entre punto y punto deben ser del orden de meV, es común hacerlos de 15 a 50 meV. Si tomamos los pasos de 50 meV tendremos 300 puntos. Por otro lado, en cada punto se desea contar los electrones que llegan, el tiempo de conteo en cada punto es del orden de segundos. Revisemos la forma en que se construiría el espectro. Se le dice al programa que la energía de amarre del pico a seguir es de 14.72 eV, que la energía de fotones se barrerá de 15 a 30 eV con pasos de 50 meV contando durante 10 segundos en cada punto y que la energía de paso será de 20 eV (la cual fijamos con los voltajes en las placas). Con estos datos una vez que dejamos pasar la radiación le indicamos que puede iniciar la adquisición de datos. Así la PC manda una señal al monocromador y este se mueve para dejar pasar los fotones de 30 eV, tras la interacción entre los átomos de Ar con los fotones incidentes los electrones $4P_{3/2}$ serán eyectados con una energía cinética de 15.28 eV. Como la energía de paso se fijó en 20 eV, para que los fotoelectrones sean transmitidos por el analizador en la celda de reacción se aplica un voltaje de 4.72 V. El valor de la energía de fotones y el voltaje en la celda permanecerán fijos durante los 10 segundos que se contarán los fotoelectrones emitidos. Cuando se cumple el tiempo la PC manda un pulso al monocromador para que este mueva su rejilla y seleccione fotones de 29.950 eV. La misma PC con la energía de amarre que le dimos calcula el voltaje que debe aplicar en la celda para que se sigan transmitiendo los fotoelectrones de nuestro fotopico. En este nuevo punto del espectro su energía cinética es de 15.23 eV, el voltaje sobre la celda es de 4.77 V y se cuentan los fotoelectrones otra vez durante 10 segundos. Este proceso se repite hasta que se termina de barrer el intervalo de energía de fotones.

Cuando se adquiere un espectro CIS se generan 4 columnas de datos. La primera columna corresponde al intervalo de energía de fotones barrido. La segunda y tercera a los fotoelectrones contados para cada valor de energía de fotones por cada detector en cada canal. La cuarta columna registra los valores de la corriente en la malla de Ni. Usualmente la lectura de la corriente que se registra en la cuarta columna es un factor de 10 (para línea PGM) o 100 (para línea Seya) menor en relación al que el usuario ve en la pantalla del electrómetro. Esta última columna es útil para poder después restar el fondo al espectro.

El tener hasta tres analizadores electrostáticos en nuestro dispositivo nos permite en principio obtener espectros de hasta tres fotopicos diferentes al mismo tiempo.

El poder de la espectrometría de estado iónico constante (CIS) se muestra en la Figura 37 para un fotopico de Cl^+ . Podemos ver en ella que al barrer la energía de los fotones se observan para ese pico una serie de picos con un perfil tipo Beutler-Fano y que a medida que aumenta la energía de los fotones la separación entre las líneas disminuye, esto quiere decir que está convergiendo hacia un umbral. En la misma figura podemos ver que en el espectro PES se producen varios fotopicos, al seguir uno de ellos en particular tenemos información sobre los estados que lo producen (líneas en el espectro CIS). En otras palabras cada línea del espectro CIS es una resonancia que decae por el canal en particular que corresponde al pico del espectro PES.

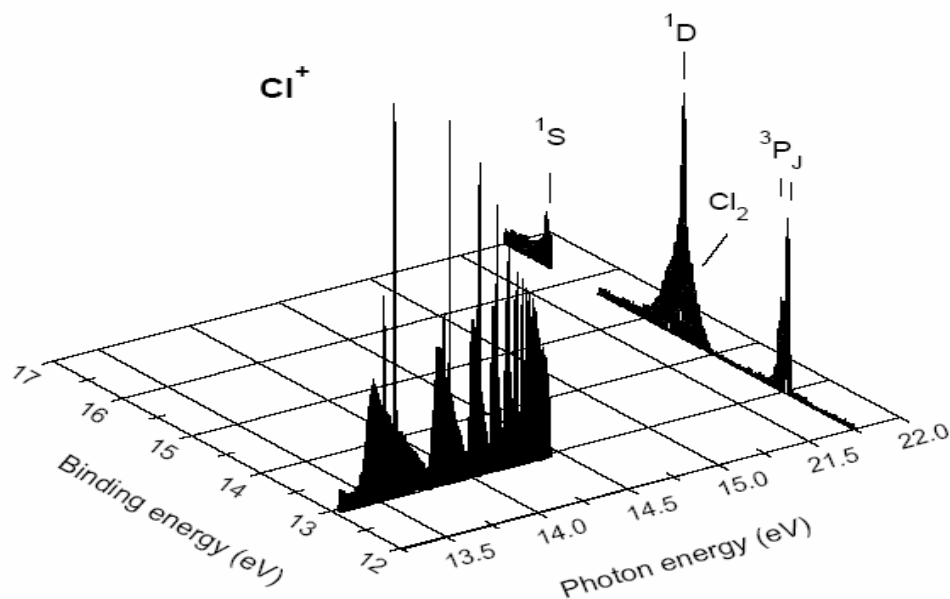


Figura 37. Se muestran un espectro PES de Cl^+ para energía fotones de 21.75 eV y un espectro CIS para el fotopico con energía de amarre de 13 eV. El espectro CIS se tomó barriendo la energía de los fotones desde 13 a 14.5 eV. La figura fue tomada de [66].

6. Calibraciones

Para que los resultados que se reporten como producto de nuestras mediciones sean confiables debemos asegurarnos que los instrumentos con los que medimos estén calibrados. Por ejemplo debemos poder asegurar la magnitud de la energía de los fotones incidentes (calibración de la energía de los fotones) así como su grado de polarización, también debemos tener caracterizada la sección eficaz (volumen de la fuente) del haz de fotones, debemos encontrar la energía de paso adecuada para los analizadores electrostáticos y también la meseta de voltaje donde trabajaran nuestros detectores (CEMs). En seguida se describe la manera y secuencia apropiada para hacer estas calibraciones.

El tener hasta tres analizadores electrostáticos en nuestro dispositivo nos permite en principio obtener espectros de hasta tres fotopicos diferentes al mismo tiempo.

El poder de la espectrometría de estado iónico constante (CIS) se muestra en la Figura 37 para un fotopico de Cl^+ . Podemos ver en ella que al barrer la energía de los fotones se observan para ese pico una serie de picos con un perfil tipo Beutler-Fano y que a medida que aumenta la energía de los fotones la separación entre las líneas disminuye, esto quiere decir que está convergiendo hacia un umbral. En la misma figura podemos ver que en el espectro PES se producen varios fotopicos, al seguir uno de ellos en particular tenemos información sobre los estados que lo producen (líneas en el espectro CIS). En otras palabras cada línea del espectro CIS es una resonancia que decae por el canal en particular que corresponde al pico del espectro PES.

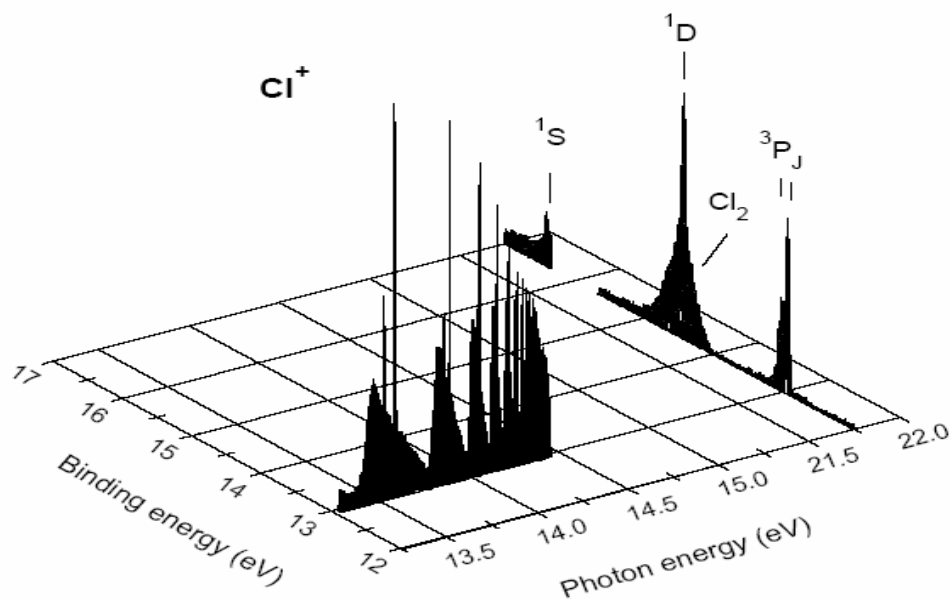


Figura 37. Se muestran un espectro PES de Cl^+ para energía fotones de 21.75 eV y un espectro CIS para el fotopico con energía de amarre de 13 eV. El espectro CIS se tomó barriendo la energía de los fotones desde 13 a 14.5 eV. La figura fue tomada de [66].

6. Calibraciones

Para que los resultados que se reporten como producto de nuestras mediciones sean confiables debemos asegurarnos que los instrumentos con los que medimos estén calibrados. Por ejemplo debemos poder asegurar la magnitud de la energía de los fotones incidentes (calibración de la energía de los fotones) así como su grado de polarización, también debemos tener caracterizada la sección eficaz (volumen de la fuente) del haz de fotones, debemos encontrar la energía de paso adecuada para los analizadores electrostáticos y también la meseta de voltaje donde trabajaran nuestros detectores (CEMs). En seguida se describe la manera y secuencia apropiada para hacer estas calibraciones.

6.1 Alineamiento

El primer paso para iniciar una corrida es conectar el fuelle de la línea a nuestra estación de trabajo y alinear. Para alinear, cuando se trabaja en una línea con ondulator (PGMA) cuya radiación no es visible se utiliza un láser de He/Ne ($\lambda = 730$ nm; rojo). Este láser está colocado de modo perpendicular a la dirección de propagación de la radiación proveniente del ondulator, y, por medio de un espejo que se sube manualmente dirige el haz hacia la estación de trabajo por el tubo capilar guía en el espectrómetro. El alineamiento se logra moviendo tornillos niveladores manuales colocados en la base de le espectrómetro. Se busca que el haz del láser pase a través del capilar directamente. Todo lo anterior se hace sin que esté pasando radiación del ondulator a la estación de trabajo. Una vez hecho el alineamiento con el láser este se apaga y se baja el espejo. Posteriormente se deja pasar la radiación del ondulator. Esta, (si está bien alineado el espectrómetro) en principio pasará directamente por el tubo capilar sin tocar sus paredes internas hasta la región de interacción. Para observar si esto ocurre las paredes del tubo capilar fueron cubiertas de un material fosforescente. De manera que si hay reflexiones internas uno lo puede notar y corregir.

El alineamiento cuando se trabaja en una línea con imán de doblado (SS-Seya-Namioka), cuya emisión de radiación en el orden cero tiene una componente visible es ligeramente distinto al de la línea con ondulator. Aquí el alineamiento se hace también con un láser de He/Ne al mismo tiempo que se utiliza el orden cero de la radiación proveniente del imán. El procedimiento consiste en alinear la radiación proveniente del ondulator con el haz del láser He/Ne en contrapropagación colocado a la distancia y altura focal dado por la óptica de la línea. Aquí, para hacer los experimentos se utiliza el primer orden.

Ya sea en la línea de ondulator o de imán de doblado, una vez conectada y alineada la estación de trabajo con la línea se comienza el “bombeo” del sistema. Esto puede tomar hasta dos días, para acelerar la remoción de los gases adheridos en las paredes internas del dispositivo experimental se efectúa el llamado “baking” que consiste en calentar con cintas térmicas envueltas con aluminio por arriba de los 100°C en las uniones y fuelles principalmente. El bombeo se hace con las bombas mecánicas de respaldo y las turbo, se registran las presiones y se continua haciendo a intervalos de tiempo regulares (20 minutos por ejemplo). Cuando la presión en la cámara está cerca de 1×10^{-7} Torr se pone en funcionamiento la bomba criogénica. Inmediatamente se percibe una disminución en la presión que reportan todos los manómetros. Se termina el calentamiento o “baking” cuando la presión en la cámara experimental está en el orden de 1.5×10^{-8} Torr.

En este momento se pueden iniciar las calibraciones. En el caso de la línea de imán de doblado se cambia la radiación al primer orden, se selecciona la radiación de los fotones a 21.22 eV y se deja pasar un gas noble para tomar un espectro de referencia. Usualmente se escoge Ar 3p pero puede emplearse alguna otra línea. En la Tabla 2 se muestran algunas energías de amarre para líneas bien conocidas usualmente utilizadas para hacer calibraciones.

Tabla 2. Algunas energías de amarre deseables para calibración.*

Nivel	Energía (eV)	Nivel	Energía (eV)
He 1s	24.5876(1)	Ne 1s	870.33(3)
Ne 2p _{3/2}	21.5647	Ar 2p _{3/2}	248.616(15)
2p _{1/2}	21.6615	2p _{1/2}	250.763(15)
Ar 3p _{3/2}	15.7597	Ar Δ2p	2.147(5)
3p _{1/2}	15.9372		
Kr 4p _{3/2}	13.9997	Kr 3d _{5/2}	93.795(18)
4p _{1/2}	14.6656	3d _{3/2}	95.038(20)
Xe 5p _{3/2}	12.1300	Xe 4d _{5/2}	67.541(9)
5p _{1/2}	13.4364	4d _{3/2}	69.525(10)
Ne 2s	48.47		

*Tomada de M. O. Kause [23]

Entonces con el Ar al interior de la cámara experimental tomamos el primer espectro de referencia. El espectro PES de Ar en la Figura 36 es un espectro típico de referencia, podemos ver que se busca que el pico esté centrado. Con el gas noble circulando dentro y la radiación incidiendo se encuentra la meseta de respuesta de los “chaneltrones” y se selecciona la energía de paso óptima. Posteriormente se procede a concluir la alineación del espectrómetro. Esto se logra desplazando algunos milímetros y a veces centímetros hacia los costados, arriba o abajo todo el espectrómetro mediante tornillos que mueven los apoyos del aparato sobre la superficie de metal en la que descansa. Con los analizadores colocados a cero y noventa grados respecto al plano del laboratorio se comienza moviendo $\frac{1}{4}$ de giro hacia arriba o abajo, si el movimiento produjo un incremento en la señal se busca mejorarlo, si no, se mueve en la dirección opuesta. Una vez optimizado el alineamiento verticalmente se optimiza en el plano horizontal.

6.2 Calibración del volumen de la fuente de fotoelectrones

Hecho el alineamiento se determina el perfil del volumen de la fuente de fotoelectrones. Para ellos se utilizan fotolíneas con $\beta = 0$ porque su distribución angular debería ser esférica. Las líneas Ar 3p a energía de fotones de 16.5 eV, Ne 2p a 26.8 eV ó Ag 4d a 19.2 eV todas tienen $\beta = 0$ a la energía de fotones especificada y son ampliamente usadas para este fin. El procedimiento que se sigue se ejemplificara con la línea 2p de Ne. Con la energía de fotones en 26.8 eV, el gas Ne en el interior y con una presión dentro de la cámara en el orden de 2×10^{-7} Torr se registran espectros PES con los analizadores I (0°) y II (90°). Se continúan tomando espectros rotando los analizadores en pasos de 15 y/o 7.5 grados. Esto es ESA I^o/II^o: 0/90, -30/60, -15/75, 0/90, 7.5/97.5, 15...120/210. El perfil completo de la cámara se puede lograr si cambiamos ESA II por ESA III. El siguiente paso es integrar el pico de Ne 2p en todos los espectros de manera consistente y normalizarlos a la corriente de la malla de níquel y la presión del gas dentro del espectrómetro. Como resultado del análisis en una gráfica polar se observa un perfil ovalado como el que se muestra en la Figura 38.

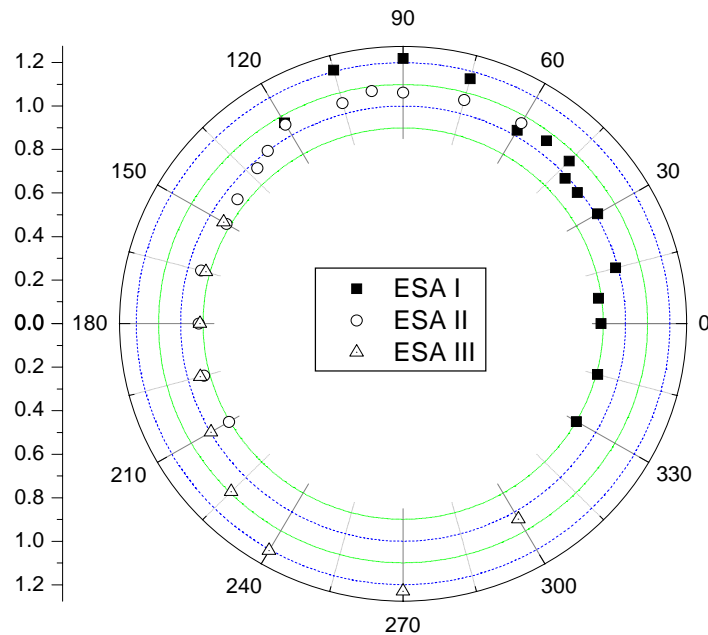


Figura 38. Volumen de la fuente de electrones obtenido a partir de espectros de Ne 2p a energía de fotones de 26.8 eV. El gráfico se obtuvo con datos de los analizadores I, II y III.

6.3 Calibración de la polarización de los fotones.

El siguiente paso es conocer la polarización de los fotones, para ello se toman espectros de Xe 5p a los mismos ángulos de los espectros de Ne 2p y espectros de Ar 3p y de Kr 4p a $0^\circ/180^\circ$, $90^\circ/270^\circ$, $0^\circ/180^\circ$ (ESA I/ESA III).

Se escogen las fotolíneas de Xe $5P_{1/2}$ a 21.22 eV ($E_A = 13.4364$ eV) y $5P_{3/2}$ ($E_A = 12.13$ eV) con $\beta = 1.65$ y 1.78 respectivamente porque su valor de β es alta, también pueden utilizarse otras fotolíneas preferentemente con $\beta = 2$ o cercana a 2. El análisis de los datos para obtener la polarización a partir de estos espectros se describe a continuación: el primer paso consiste en obtener las intensidades de ambas líneas de Xe en los espectros. Esto se hace con el programa Analyze, o con el programa Peakfit. Las áreas (intensidades) así obtenidas para cada ángulo y cada pico son normalizadas (como se hizo en el pico de Ne 2p) con respecto a la corriente en la malla de níquel y la presión del gas dentro del espectrómetro. Las áreas normalizadas se renormalizan con respecto a las intensidades normalizadas del Ne 2p para el mismo ángulo y el mismo analizador. De esta manera en los datos se incluye el efecto de la forma del haz de fotones y la respuesta de los analizadores en la dirección dada por el ángulo. Si uno expresa los datos así procesados en una gráfica polar del ángulo del analizador contra la intensidad normalizada se obtiene un corte transversal de la distribución angular de los fotoelectrones. Como la β de nuestras líneas es alta (ver Figura 39 y Tabla 3) y la radiación incidente tiene presumiblemente una polarización alta no nos sorprende obtener un gráfico bastante parecido al que se muestra en la Figura 2 para $\beta = 2$.

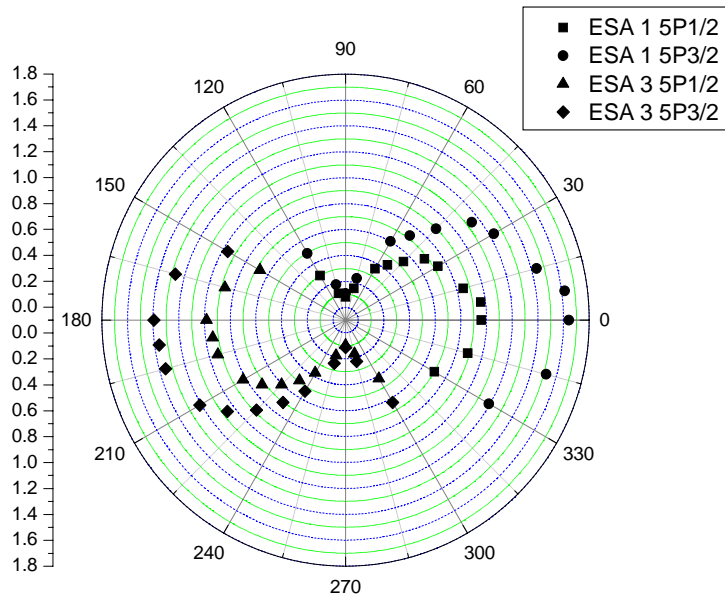


Figura 39. Perfil de la distribución angular de los fotoelectrones Xe $5P_{1/2}$ y $5P_{3/2}$ tomada por los analizadores I y III durante una secuencia típica de calibraciones.

Los mismos datos de la Figura 39 presentados en un gráfico $\cos 2\theta$ vs *intensidad Xe 5p/ intensidad Ne 2p* (ver Figura 40) muestran un perfil tipo $\cos^2\theta$. Donde θ es el ángulo al que está girada la plataforma rotatoria que contiene los analizadores, de modo que es también el ángulo entre el fotoelectrón emitido y el vector eléctrico de la radiación incidente. En el gráfico podemos ver que la intensidad que registran los analizadores I y III tras ser normalizadas es mayor para la línea $5P_{3/2}$. Este comportamiento es consistente con las intensidades que se pueden ver para ambas líneas en la Figura 36.

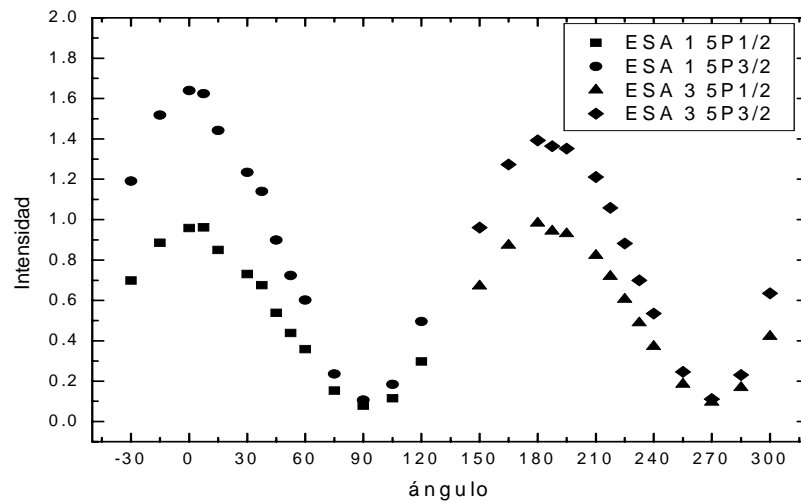


Figura 40. Gráfico de $\cos 2\theta$ vs *intensidad Xe 5p/ intensidad Ne 2p*. Se aprecia un perfil tipo $\cos^2\theta$ para las dos líneas de Xe vistas por los analizadores I y III.

Los gráficos anteriores nos son útiles para medir el grado de polarización de los fotones. El valor de la polarización requiere un poco más de trabajo. Si reorganizamos la expresión de la sección eficaz diferencial (ecuación 13) podemos tenerla con la forma de la ecuación de la recta ($y = mx + b$):

$$y = k(1 + \beta/4) + (3pk\beta/4) \cos 2\theta \quad (57)$$

donde $y = d\sigma/d\Omega = I_{Xe\ 5p}/I_{Ne\ 2p}$, $m = (3pk\beta/4)$, $b = k(1+\beta/4)$ con $k = \sigma/4\pi$ y $x = \cos 2\theta$. Ahora, si graficamos para cada línea *intensidad Xe 5p/ intensidad Ne 2p* vs $\cos 2\theta$, obtendremos cuatro líneas rectas (una para cada línea de Xe por cada analizador). Un parámetro de ajuste que se suma a el ángulo θ (el parámetro está entre 3 y -3) se varía hasta que se encuentra la correlación más alta en las cuatro líneas. De la ecuación de la recta para cada línea tomamos el valor de la pendiente y el de la ordenada al origen, hacemos el cociente entre ambas y obtenemos una expresión que está solo en función de β y p . Como conocemos el valor de β para cada línea podemos despejar p y conocer su valor. Al final de este análisis tendremos cuatro valores para la polarización. Un promedio de ellos nos da el valor de la polarización según el análisis a partir de las líneas de Xe.

Con los espectros PES de Ar 3p y de Kr 4p a 21.22 eV se extraen valores adicionales para la polarización que se promedian con los obtenidos para las líneas de Xe 5p. El valor de la polarización que se obtiene de ellos, es por un método que consiste en incluir un factor de corrección γ para cada analizador, y a partir de β conocida para cada línea a una energía de fotones dada obtener el valor de p .

Recordemos que R es el cociente de intensidades de lo que ve un analizador a 0° entre lo que ve el mismo (u otro) analizador a 90° y que está relacionado con el parámetro de distribución angular β y la polarización p de los fotones según la ecuación 21. Entonces conociendo el cociente de intensidades R experimentalmente y el valor de β para una línea determinada a una energía de fotones específica podemos conocer el valor de p . Sin embargo por la forma y el tamaño del haz de fotones (ondulador: 0.5 mm horizontal X 0.05 mm vertical, imán de doblado: 2mm horizontal X 1mm vertical) encontramos una fuerte dependencia en la respuesta de los analizadores con el alineamiento, sobre todo a 0° . Esto se refleja en el hecho de que los analizadores no ven lo mismo a 0° y 90° . Entonces se debe incluir un factor de corrección γ que absorba numéricamente la influencia del alineamiento. Esto es

$$R = \gamma R' \quad (58)$$

donde R es el valor del cociente de intensidades que esperaríamos al hacer el experimento pero que obtenemos a partir de β y p conocidas para una línea dada, y R' es el valor del cociente de intensidades [$I(0^\circ) / I(90^\circ)$] que encontramos al hacer el experimento. Con lo anterior en mente retomemos el análisis de los espectros de Ar 3p y Kr 4p a 21.22 eV para encontrar el valor de la polarización p . Primero encontramos el valor del factor de corrección γ para cada analizador a partir de la intensidad registrada por los mismos a cero y noventa grados de los espectros de Ne 2p. Como el parámetro de distribución angular β para Ne a 26.8 eV es cero, el inverso del cociente de intensidades nos da directamente el valor de γ para cada analizador. Los espectros PES de Ar 3p y de Kr 4p fueron tomados a los ángulos $0^\circ/180^\circ$, $90^\circ/270^\circ$, $0^\circ/180^\circ$ (ESAI/ESAIII). Con el promedio de las intensidades a 0° para ESA I, a 180° para ESA III y las intensidades a 90° para ESAI y 270° para ESAIII se obtienen los cocientes de

intensidades R'_I y R'_{III} . Con las R' y los factores γ para cada analizador obtenemos las R que esperamos teóricamente; como por otro lado también conocemos los valores de β para cada línea de cada gas podemos sustituir ambas en la expresión

$$p = \frac{4(R-1) + \beta(R-1)}{3\beta(R+1)} \quad (59)$$

(que se obtiene a partir de la ecuación 17) y encontrar los valores de p . Los valores para la polarización así obtenidos se promedian a su vez con los obtenidos a partir de los espectros de Xe.

Hasta el momento hemos revisado la calibración del volumen de la fuente de electrones y la polarización. En la tabla 3 se muestran, para las líneas de gases nobles el valor de β y la energía de fotones a las que se obtienen los espectros PES para hacer las calibraciones del volumen de la fuente de electrones y de polarización.

Tabla 3. Líneas usadas para hacer la calibración de la polarización y el volumen de la fuente de electrones [67].

Línea	β	$h\nu$ (eV)
Ne 2p	0.00 (5)	26.8
Ar 3P _{1/2}	}0.91(2)	21.22
3P _{5/2}		
Kr 4P _{1/2}	1.25(4)	}21.22
4P _{3/2}	1.30(4)	
Xe 5P _{1/2}	1.65(3)	}21.22
5P _{3/2}	1.78(2)	

6.4 Calibración de la energía de los fotones

Para calibrar la energía de los fotones se utilizan resonancias autoionizantes de gases nobles con energía en la región donde se realizaran los experimentos. El proceso consiste en tomar un espectro CIS de algún fotopico de gas noble mientras se barre la energía. El espectro que de aquí se obtiene, muestra una o varias series de Rydberg convergiendo hacia algún umbral de ionización. Esto implica que a medida que la energía de los fotones se acerca al valor de un potencial de fotoionización la separación energética entre las líneas (o resonancias) se vuelve más difícil de resolver. Ya que se ha tomado el espectro y normalizado a la corriente en la malla de níquel se ubica la posición en energía de fotones de las resonancias mas estrechas. La posición en energía de esta serie de resonancias se compara con la posición para las mismas reportadas en la literatura. Generalmente el corrimiento está en el orden de los meV. Sabiendo la magnitud y dirección en la que este ocurre podemos restar o sumar esta cantidad de energía a todos nuestros espectros.

Como las resonancias son en algunos casos muy estrechas, midiendo su ancho en el espectro se obtiene el paso de banda del monocromador. Este es una estimación de la resolución máxima alcanzable por nuestra rejilla. En el caso de radiación proveniente del ondulator el paso de banda no se ve afectado por la apertura de las rendijas de entrada o salida notablemente, ya que el haz de fotones es bastante pequeño y colimado.

Sin embargo en el caso de radiación proveniente de imán de doblado el paso de banda del monocromador está determinado por la apertura de las rendijas de entrada y salida. En este sentido siempre se busca encontrar el mejor acuerdo entre la resolución (que aumenta al disminuir la apertura de las rendijas) y la intensidad de la señal (que disminuye al reducir el tamaño de la apertura) que se registra en el espectro. En la Figura 41 se pueden ver las series de resonancias autoionizantes ns y nd de $Kr\ 4P_{1/2}$. Podemos observar que tienen un perfil tipo Beutler - Fano y que hay dos espectros superpuestos. El mejor resuelto y con mayor intensidad se obtuvo (línea sólida) en la línea PGM-A con un ondulator como fuente de radiación mientras que el que tiene menor resolución e intensidad (línea punteada) fue obtenido en la línea SS- Seya-Namioka. Ambas líneas están localizadas en el anillo de almacenamiento Aladdin del SRC de la Universidad de Wisconsin.

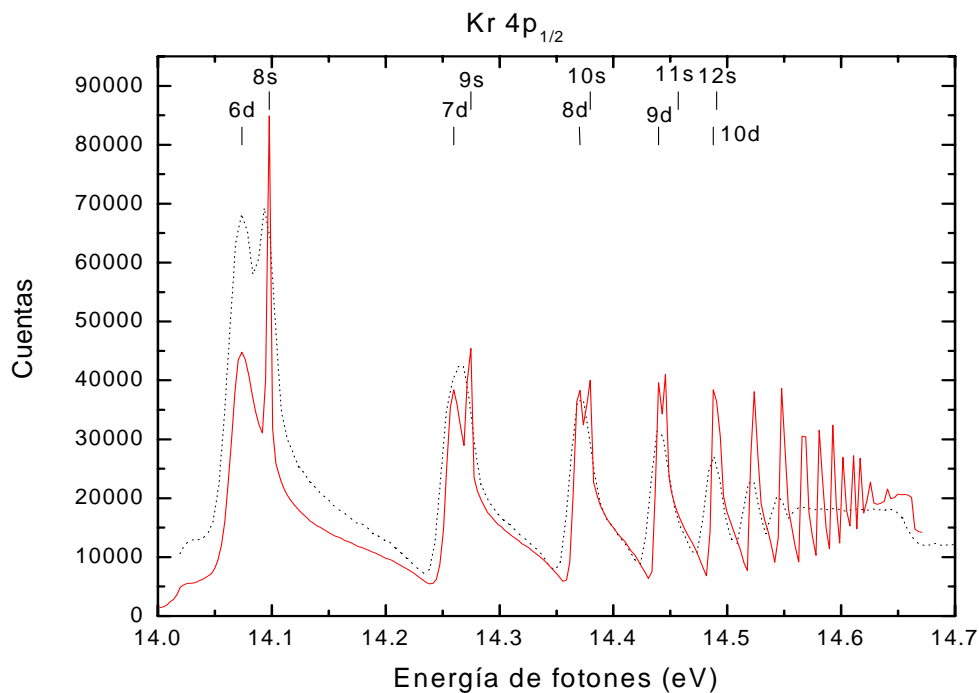


Figura 41. Resonancias autoionizantes de $Kr\ 4P_{1/2}$ comúnmente usadas para calibrar la energía de los fotones. Dos series de Rydberg están presentes: la ns y la nd . El espectro CIS mejor resuelto (línea sólida) y con más cuentas corresponde al obtenido en una línea con ondulator (PGMB) mientras que el otro (línea punteada) se obtuvo en una línea con imán de doblado (SS-SEYA-NAMIOKA).

En la Tabla 4 se muestran las posiciones en energía de resonancias autoionizantes ns y nd de Kr $4P_{1/2}$ usadas para calibrar la energía de fotones.

$4p \rightarrow$	λ (Å) ^a	eV	Γ (meV) ^b
6d	881.057	14.0723	1.42
8s	879.422	14.0895	
7d	869.490	14.2595	0.93
9s	868.598	14.2742	
8d	862.740	14.3711	0.93
10s	862.362	14.3774	
9d	858.516	14.4418	
11s	858.172	14.4476	
10d	855.649	14.4902	
12s	855.401	14.4944	
11d	853.646	14.5242	
13s			
12d	852.191	14.5490	
13d	851.085	14.5679	

Tabla 4. Resonancias autoionizantes ns y nd en Kr $4P_{1/2}$.

^a de tablas de Moore [68], ^b de S.B Whitfield [67].

Para concluir esta sección correspondiente a las calibraciones solo mencionaremos que el flujo de fotones también debe estimarse. La calibración de este es relativa, se puede obtener una estimación del flujo de fotones a partir de espectros CIS de gases nobles con sección eficaz de fotoionización conocida. Podemos saber cuánto cambia el flujo de fotones al variar su energía pero no podemos saber cuántos fotones inciden por segundo sobre la celda.

En esta sección se describió el espectrómetro utilizado y las partes que lo constituyen, a saber: fuente de radiación, celda y sistema de detección. Al tratar los temas relacionados con la fuente fueron abordados tanto la operación como los parámetros relevantes de un anillo de almacenamiento para producción de radiación sincrotrónica. Algunos de ellos fueron ejemplificados con datos de Aladdin. Se habló también de las características, propiedades y dominio de la radiación sincrotrónica producida ya sea por un ondulator o un imán de doblado, algunas diferencias fueron señaladas. Cuando se abordó la parte de “la celda” fue descrito el funcionamiento de la fuente de átomos (hornos interno y externo) y el sistema de vacío. La última parte del sistema experimental, la correspondiente a la detección fue descrita. Ahí se habló del principio de operación, conexiones, formas de funcionar y resolución de los analizadores electrostáticos; se mencionó que estos miden la energía cinética de los fotoelectrones y que los “chaneltrones” se encargan de contarlos. El cómo los cuentan y las conexiones que se hacen para que con ayuda de PCs programadas podamos obtener espectros ya sean del tipo PES o CIS se expuso también. Qué información proporcionan ambos tipos de espectros fue también señalada. Tras haber profundizado en los constituyentes del espectrómetro y explicado sus principios de operación se expusieron las razones que hacen importante hacer las calibraciones del volumen de la fuente de electrones, de la polarización y energía de los fotones así como también del flujo de fotones antes de hacer un experimento.

Con todo lo anterior y los fundamentos teóricos que en la primera parte de este trabajo se proporcionaron pasaremos a describir en el siguiente capítulo los experimentos que realizamos.

7. EXPERIMENTOS

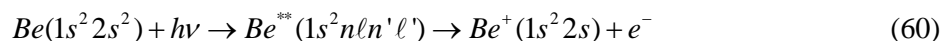
El Berilio (Be) es un metal alcalinotérreo de número atómico $Z = 4$. Tiene en su estado base la configuración electrónica $1s^2 2s^2$ (1S). Esto lo hace ser, después del Helio el átomo más simple con capa cerrada. Adicionalmente, el tener tan pocos electrones lo convierte en un candidato ideal para estudiar (tanto desde el punto de vista teórico como del experimental) los efectos de la correlación electrónica durante las dinámicas de fotoionización. Como vimos, ejemplos de los procesos donde cobran importancia efectos de la correlación electrónica durante la fotoionización son las excitaciones múltiples y procesos tipo “shake” (up, down y off).

Se realizaron dos corridas de experimentos en Berilio atómico utilizando la técnica ESSR (Electron Spectrometry using Synchrotron Radiation). La primera corrida fue llevada a cabo en la línea Stainless Steel (SS) Seya-Namioka en el verano del 2003. La segunda corrida se realizó en el verano del 2004 en la línea PGMA. Ambas líneas pertenecen al Synchrotron Radiation Center de la Universidad de Wisconsin-Madison. Los experimentos realizados fueron de dos tipos; en uno de ellos se midió la sección eficaz parcial de fotoionización para el canal $2s$ para energías de fotones comprendidas entre el umbral $2s$ y el $3p$. El segundo experimento consistió en medir la distribución angular de los fotoelectrones producidos durante el decaimiento de las resonancias $1s \rightarrow np$ ($n=2-9$).

En ambos experimentos los fotones fueron extraídos del anillo de almacenamiento Aladdin. En ambas corridas se hicieron los procesos de alineamiento y calibraciones del volumen de la fuente, de polarización y de energía de fotones vistos en el capítulo 6. Los fotones provenientes del ondulator o del imán de doblado fueron llevados por medios ópticos hasta la región de interacción (horno interno o celda) donde se encontraba la nube de átomos de Berilio. La energía cinética de los fotoelectrones producidos fue analizada por los analizadores electrostáticos (ESAs) y estos fueron contados por los “channeltrones”. Se registraron espectros del tipo PES y CIS con ayuda de PCs programadas. Las condiciones experimentales para cada caso se dan más adelante.

7.1 Medición de la sección eficaz parcial de fotoionización para el canal $2s$ entre los umbrales $2s$ y $3p$ en Berilio atómico.

En esta sección se detallan las condiciones experimentales en que se midió la sección eficaz parcial de fotoionización para el canal $2s$ entre los umbrales $2s$ y $3p$ en Be atómico. Esta medición implicó contar fotoelectrones provenientes del decaimiento de estados excitados alcanzados por excitación resonante con fotones en Be. A manera de reacción los procesos estudiados pueden representarse de la siguiente manera:



donde un fotón promueve los dos electrones $2s$ en berilio a los orbitales nl y $n'l'$. El decaimiento de los estados excitados formados (resonancias) fue monitoreado para el canal $2s$ por medio de espectros CIS. La región energética estudiada en este experimento abarcó desde 16.5 a 21.3 eV, intervalo que está comprendido entre los umbrales $2p$ y $3p$ (ver tabla 5) de Be. De manera que los canales de salida abiertos son:

2s, 2p, 3s y 3p. Dada la amplitud de la región energética de interés fue necesario tomar varios espectros CIS en los intervalos de energía de fotones: $16.5 \leq hv \text{ (eV)} \leq 20.25$, $19.5 \leq hv \text{ (eV)} \leq 20.25$ y $20.25 \leq hv \text{ (eV)} \leq (21.3 \text{ y } 21)$. Estos espectros fueron tomados tanto en la línea del imán de doblado (SS-Seya-Namioka) como en la línea del ondulator (PGMA) en los veranos del 2003 y del 2004 respectivamente.

Estado iónico de Be ⁺	Energía (eV)
1s ² 2s ² S	9.2959
1s ² 2p ² P	13.2543
1s ² 3s ² S	20.2305
1s ² 3p ² P	21.2688
1s ² 3d ² D	21.4569

Tabla 5. Umbrales de ionización teóricos relativos al estado base de Berilio [5].

En la corrida de la línea de imán de doblado (Seya) la fuente de átomos fue el horno interno embobinado con alambre de tungsteno de 0.010 pulgadas de diámetro. Este se cargó con 7cm de Be metálico en trozos de 0.5 cm aproximadamente. Se calentó resistivamente incrementando la corriente hasta hacer pasar 9.5 A en una diferencia de potencial de 20.28 V generando una potencia de 192.66 W; misma que corresponde a una temperatura aproximada de 1230 °C (ver Figura 30). A esta temperatura se estima que la presión de la nube de átomos de Berilio dentro del crisol fue de 1.2×10^{-2} Torr [69]; lo que corresponde a una densidad de 1×10^{14} átomos de Be/cm³.

Trabajamos con los analizadores electrostáticos I/II a 0°/90° con respecto al vector de polarización de la radiación incidente. La energía de paso de los analizadores fue, para los espectros de calibración de 20 eV y para los de Be de 10 eV. Como nuestros analizadores electrostáticos tienen una constante $f = 5.37$ (ver ecuación 55)

$$E_p = E_c = 5.37|V| \quad (61)$$

los voltajes nominales que se aplicaron en las placas fueron respectivamente 3.7244 V y 1.8622 V. Los “chaneltrones” 1 y 2 fueron puestos a un voltaje de 2.5 kV y 2.7 kV respectivamente. En esta corrida encontramos un buen acuerdo entre intensidad de fotones y resolución con las rendijas de entrada por salida a 100 X 100 μm. En estas condiciones y en el intervalo de energía de fotones a las que se tomaron los espectros CIS de Berilio estimamos el paso de banda del monocromador en 27.5 meV. Encontramos una polarización de 0.91(4), esta fue determinada a partir de una serie de distribuciones angulares de fotoelectrones de líneas de calibración de gases nobles (ver sección 6.3), y se supuso un comportamiento constante a lo largo de toda la región energética. La energía de los fotones se calibró con la serie de resonancias autoionizantes de Kr 4P_{1/2} (sección 6.4). Se encontró necesario correr 25 meV hacia altas energías toda la escala de energía de fotones.

Los espectros CIS tomados en la línea SS-Seya-Namioka abarcaron las regiones $16.5 \leq hv \text{ (eV)} \leq 20.25$ (Figura 45 panel superior) y $20.25 \leq hv \text{ (eV)} \leq 21.3$ (Figura 46). El primero fue adquirido con pasos de 15 meV (288 canales), con un tiempo de conteo en cada canal de 10 segundos y en las condiciones experimentales mencionadas anteriormente. En la segunda región ($20.25 \leq hv \text{ (eV)} \leq 21.3$) la única diferencia fue que los pasos fueron de 5 meV (211 canales).

Como la resolución de la línea PGMA es superior a la de la línea SS-Seya-Namioka, en la corrida del verano del 2004 se aprovechó para repetir los espectros CIS en las regiones de las resonancias más estrechas. Estas resonancias están en las regiones energéticas: $19.5 \leq hv \text{ (eV)} \leq 20.25$ (Figura 45 panel inferior) y $20.25 \leq hv \text{ (eV)} \leq 21.0$ (Figura 46 panel inferior). La preparación de la corrida experimental y la adquisición de espectros fue muy semejante a la descrita para la línea Seya. Encontramos en nuestra calibración a bajas energías que era necesario mover la escala 7 meV hacia altas energías. La polarización de los fotones encontrada fue de 0.99(5). Las rendijas (entrada X salida) del monocromador de la línea PGMA fueron puestas a $255 \times 150 \mu\text{m}$. Para energía de fotones de 20.7 eV se estimó un paso de banda del monocromador de 7.0 meV y se supuso constante a lo largo de la región estudiada. La fuente de átomos fue el horno externo ($\approx 1230 \text{ }^\circ\text{C}$) por lo que la celda fue la fuente de fotoelectrones. Se estima que dentro de la celda la presión fue del orden de 1.2×10^{-3} Torr [69]; lo que corresponde a una densidad de 1×10^{13} átomos de Be/cm³. Los analizadores empleados fueron ESAI(0°)/ESAI(90°) a energía de paso de 12 eV. Los chaneltrones I y II fueron puestos respectivamente a voltajes de 3.15 y 3.2 keV. En esta corrida (PGMA) todos los espectros CIS de Be ($19.5 \leq hv \text{ (eV)} \leq 20.25$ (Figura 45 panel inferior) y $20.25 \leq hv \text{ (eV)} \leq 21.0$ (Figura 46 panel inferior)) se registraron en pasos de 5 meV y el tiempo de conteo por canal fue de 20 segundos.

7.1.2 Tratamiento de espectros CIS para obtener la sección eficaz parcial de fotoionización para el canal 2s entre los umbrales 2s y 3p en Berilio atómico.

En esta sección se describe la resta del fondo de los espectros CIS para reportar la sección eficaz parcial de fotoionización para el canal 2s entre los umbrales 2s y 3p en Berilio atómico. Todo el proceso de resta de fondo está basado en la suposición de que este se incrementa de manera lineal con la energía de los fotones.

Aunque se hizo la medición de la sección eficaz parcial de fotoionización y típicamente esta se hace con los analizadores colocados al ángulo mágico, en este caso en que solo veíamos fotoelectrones a 0° ($\beta = 2$) (ver espectro PES de Be en Figura 42) el resultado de nuestra medición es proporcional a la sección eficaz parcial de fotoionización. Lo anterior puede visualizarse de la expresión para la sección eficaz parcial diferencial (13) si nosotros en ella sustituimos el valor de $\beta = 2$ y $\theta = 0$. Para poder restar el fondo a los espectros CIS se tomaron espectros PES a las energías de fotones inicial (PRE CIS PES) y final (POST CIS PES) de los primeros.

Por ejemplo, para restar el fondo del espectro CIS en el intervalo de energía $20.25 \leq hv \text{ (eV)} \leq 21.3$ (Figura 46), se tomaron espectros PES de Be 2s a energías de fotones de 21.3 eV (PRE CIS PES)(Figura 42) y 20.3 eV (POST CIS PES)(Figura 43).

El espectro PRE CIS PES de Be 2s @ 21.3 eV (Figura 43) fue adquirido en la línea SS-Seya-Namioka. Las condiciones en que se registro fueron las dadas en la sección 7.1 salvo que: la energía de los fotones incidentes fue de 21.3 eV, los pasos fueron de 20 meV (46 canales), el tiempo de conteo de 0.2 segundos y se registraron 20 barridos. Las condiciones del espectro POST CIS PES a 20.25 eV (Figura 43) fueron las mismas pero aquí los pasos fueron de 25 meV (37 canales).

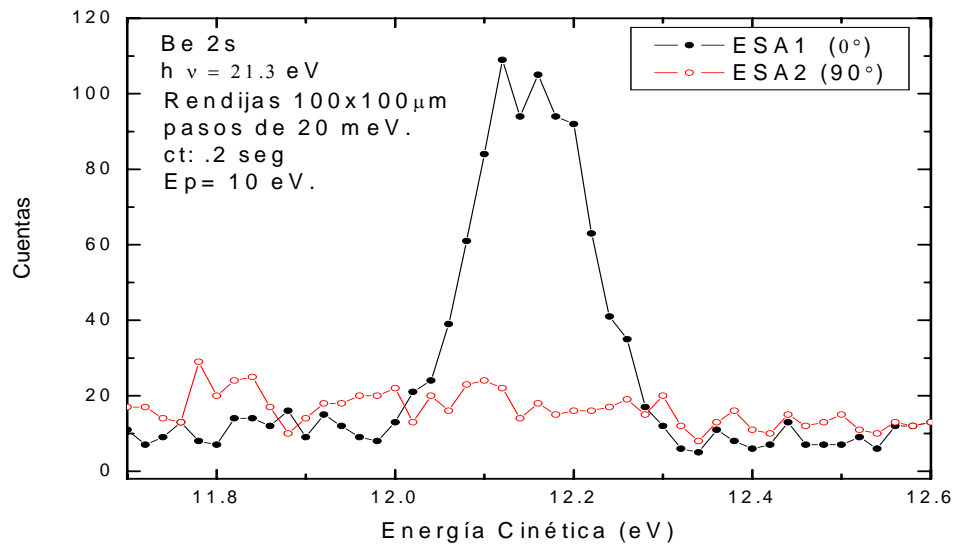


Figura 42. Espectro PRE CIS PES de Be 2s @ 21.3 eV, adquirido en la línea SS-Seya-Namioka y utilizado para resta del fondo en espectros CIS.

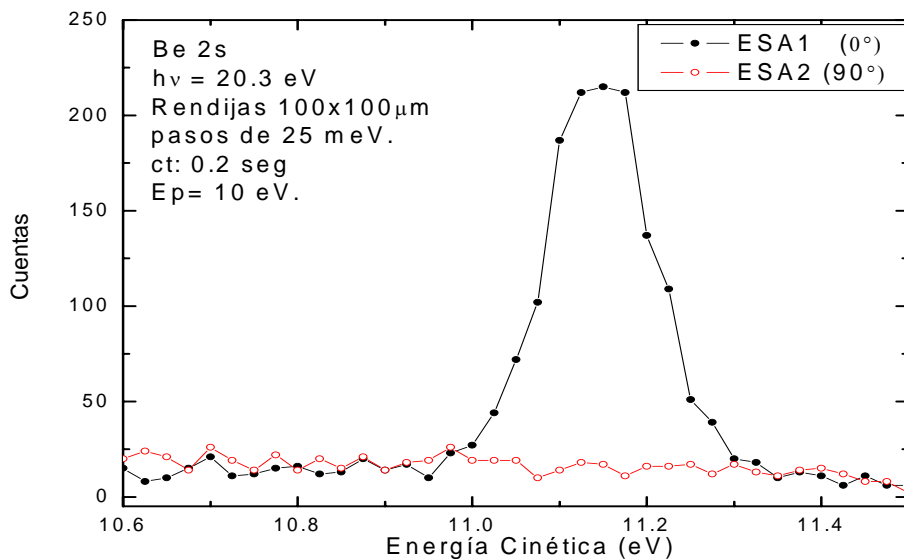


Figura 43. Espectro POST CIS PES de Be 2s @ 20.3 eV, adquirido en la línea SS-Seya-Namioka utilizado para resta del fondo en espectros CIS

En general, para ambos espectros PES (PRE y POST CIS) se registran en la bitácora experimental los valores de la corriente en la malla de Níquel al inicio y al fin de su adquisición. Con estos valores de corriente, con el tiempo de conteo (ct) y el número de barridos (sweeps) se calculan las cuentas de fondo bajo el máximo del pico de Be 2s normalizadas a la corriente (A) de la malla de Níquel (indirectamente el flujo de fotones) y al tiempo (s). De aquí se obtiene un número estimado de cuentas de fondo/s/A al inicio y al final del espectro CIS. Por otro lado multiplicamos la columna 4

del espectro CIS por un factor (de 10 para línea PGM y de 100 para la línea Seya) que hace sus valores iguales que la lectura del electrómetro registrada para los PES PRE Y POST. La nueva columna 4 es multiplicada ahora por la recta $(hv_{in,cts_{in}}/s/A * c.t \text{ CIS}(s))$ y $(hv_{fin,cts_{fin}}/s/A * c.t. \text{ CIS} (s))$. Donde c.t. es el tiempo de conteo en segundos (s) de fotoelectrones por canal del espectro CIS. Como resultado de las operaciones hechas a la columna cuatro tenemos en ella las cuentas de fondo a restar al espectro CIS. Por último a la columna del espectro real se le resta la columna 4. Con esto tenemos los espectros CIS ya sin cuentas de fondo.

Para poder comparar los espectros obtenidos (Seya y PGMA) con los datos teóricos [5] debimos hacer dos pasos más: convolucionar y escalar. El primero fue hacer convoluciones de los espectros teóricos al paso de banda del monocromador de la línea Seya (27.5 meV) (Figura 45 panel superior y Figura 46 panel superior), del espectro teórico al paso de banda de la línea PGMA (7 meV) (Figura 45 panel inferior) y de los datos teóricos y los del ondulator al paso de banda de la línea Seya (Figura 46 panel inferior). En todas las convoluciones se utilizó una ventana triangular de área igual a 1. Esto es con $h = 1/2\Gamma$ y base = 4Γ , donde 2Γ es el ancho a media altura. Para poder comparar el espectro de la línea PGMA con el del Seya (Figura 46 panel inferior) el primero se convolucionó por un ancho $2\Gamma=26.6$ meV que se obtuvo de la diferencia en cuadratura del paso de banda de la línea Seya menos el correspondiente de la línea PGMA:

$$2\Gamma = \sqrt{(27.5)^2 - (7)^2} = 26.6 \quad (62)$$

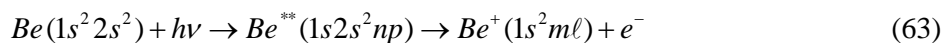
Ya teniendo los espectros convolucionados y con anchos comparables se multiplicaron tanto los espectros obtenidos en la línea Seya como los obtenidos en la línea PGMA por un factor que hizo sus intensidades comparables. Para la línea Seya fue 0.0030 y para la línea PGMA fue 9.6×10^{-4} .

Los espectros CIS así tratados se muestran en la sección de resultados. Nuestro tratamiento nos permite reportar la sección eficaz parcial de fotoionización para el canal 2s y hacer una comparación cualitativa con el cálculo para la sección eficaz total hecho por Kim y colaboradores [5].

7.2 Medición del parámetro de distribución angular (β) de los fotoelectrones producidos durante el decaimiento de las resonancias $1s \rightarrow np$ ($n=2-9$).

En esta parte del escrito se dan las condiciones experimentales en las que se midió la distribución angular de los fotoelectrones emitidos durante el decaimiento de las resonancias $1s \rightarrow np$ ($n=2-9$). Las regiones energéticas estudiadas abarcaron energías de fotones algunos eV por encima y por debajo de los máximos de las resonancias en cuestión.

La serie de procesos estudiados puede representarse como:



donde los números cuánticos principal y azimutal del ión final no necesariamente son iguales a los del estado excitado. A lo largo de este trabajo y buscando ser consistentes con trabajos anteriores [20-21] nos referiremos a las resonancias (neutras) con las etiquetas np mientras que a los canales de salida los designaremos como estados iónicos

mp' . Para cada resonancia estudiada se registró un espectro PES a la energía de fotones de su máximo. Los canales iónicos presentes en el correspondiente espectro PES fueron monitoreados por espectros CIS para energías de fotones algunos eV alrededor del máximo. La posición de los máximos de las resonancias en nuestra medición se corrigió en relación a las posiciones dadas por Jiménez [20-21] y a los datos ópticos de Mehlman, Janniti y colaboradores [6-7].

También se tomaron espectros PES a las energías de fotones inicial y final de los espectros CIS para poder restar el fondo.

Este experimento fue conducido en la línea PGMA del Synchrotron Radiation Center en el verano del 2004. Los fotones fueron extraídos de un ondulator insertado en uno de los tramos rectos del anillo Aladdin (U3 en Figura 13) y su polarización fue de 0.99(5). El inicio de la corrida experimental y las calibraciones ha sido detallado previamente (capítulo 6). En esta línea (PGMA) se trabajó con las rendijas de entrada por salida en $255 \times 150 \mu\text{m}$. Con esas aperturas y para las energías de fotones en que se trabajó (115-125 eV) se estimó el paso de banda del monocromador en 80 meV. Los espectros de las resonancias $1s\text{-}np$ se obtuvieron con el horno interno como fuente de átomos y fotoelectrones. Éste alcanzó una temperatura de operación estimada en 990°C . Temperatura que corresponde a una presión en la región de interacción de 4.5×10^{-4} torr, o equivalentemente a una densidad de 4.4×10^{12} átomos/cm³. Se emplearon ESA3/0° y ESA2/90° puestos a una energía de paso de 100 eV. Fue necesario aumentar la eficiencia de los chaneltrones 2 y 3 poniéndolos a voltajes de 4.2 y 4.1 keV respectivamente.

En la siguiente sección se detalla la manera en que se analizaron los espectros para poder reportar el resultado de nuestras mediciones.

7.2.1 Tratamiento de espectros CIS para reportar el parámetro de distribución angular (β) de los fotoelectrones que decaen de las resonancias $1s \rightarrow np$ ($n=2-6$) y la sección eficaz parcial de fotoionización (σ_i).

En esta sección se explican el tipo de espectros que se tomaron y su secuencia. También se discute la manera en que se procesaron para finalmente reportar los resultados experimentales

En los estudios de distribución angular se registra la intensidad de fotoelectrones con un analizador a 0° y otro a 90° con respecto al vector de polarización de la radiación incidente. En nuestro experimento se tomaron espectros tipo CIS para los canales de salida de interés de cada resonancia a 0° y 90° . Para registrar el espectro CIS nosotros le proporcionamos al programa de adquisición de datos la energía de amarre del canal que queremos estudiar. Esta energía de amarre se obtiene usando la relación de Einstein para el fotoefecto de espectros PES de referencia. Los espectros PES de referencia se obtuvieron para cada resonancia y para cada una de ellas a la energía de fotones en que alcanzaban su máximo. Los picos que aparecen en un espectro PES de referencia para cierta resonancia nos dicen cuáles son sus canales de salida.

Para poder hacer la resta de fondo de los espectros CIS se tomaron espectros PES PRE y POST CIS. Sus cuentas de fondo debajo del pico del canal de salida en estudio se normalizaron al tiempo (s) y a la corriente de la malla de Níquel (indirectamente al flujo de fotones). Con ellas (antes y después del CIS) y suponiendo un comportamiento lineal del fondo este puede sustraerse a los espectros CIS tanto a 0 como a 90 grados.

El siguiente paso (ya con los CIS sin las cuentas de fondo), es hacer el cociente de intensidades medidas $R' = I(0^\circ)/I(90^\circ)$ que tras ser multiplicado por el factor γ

$$R = \gamma R' \quad (64)$$

lo hace igual al valor de R que se obtiene a partir de un valor de β y polarización p conocidas

$$R = \frac{4 + \beta(3p + 1)}{4 - \beta(3p + 1)} \quad (65)$$

La ecuación anterior (65) se obtiene a partir de la ecuación (17) ó (66). Estas β conocidas son las que determinó Jiménez previamente [21]. La conversión del archivo con R' a R se hace con ayuda del programa ANALYZE. El cual en una de sus funciones nos permite obtener a partir del archivo con los datos de R el comportamiento de β en la región energética en estudio si le proporcionamos el valor de la polarización (p) de nuestros fotones. La ecuación que emplea el programa es

$$\beta = \frac{4(R - 1)}{[3p(R + 1) - (R - 1)]} \quad (66)$$

Posteriormente, a partir de este archivo (con el valor de β para cada punto de energía de fotones) obtenemos la sección eficaz parcial de fotoionización (σ). El mismo programa lo hace, para ello le proporcionamos el valor de la polarización (p) y el archivo CIS a cero o noventa grados. El paso de β a σ lo hace con la expresión

$$\sigma = \frac{4\pi I(\theta)}{1 + \frac{\beta}{4}[1 + 3p \cos(2\theta)]} \quad (67)$$

que se obtiene de despejar sigma (σ) de la relación (13) haciendo $d\sigma/d\Omega = I(\theta)$. Donde $I(\theta)$ quiere decir que los fotoelectrones pueden ser contados en el ángulo θ . Claramente para nuestro experimento θ puede ser 0° ó 90° .

A modo de ejemplo, en la Figura 44 se muestra un espectro PES de referencia obtenido en el máximo experimental de la resonancia $2p$ ($h\nu=115.42$ eV). Este valor de energía de fotones tras hacer las calibración de energía de fotones en realidad corresponde a 115.46 eV. En él se pueden ver las líneas $2s'$, $2p'$ y $3p'$ y entre otras cosas podemos ver que la emisión se favorece a 0° . El canal $2p'$ es el más intenso, indicativo de que la resonancia $2p$ decae preferentemente por ese canal. El espectro no ha sido corregido por el factor γ .

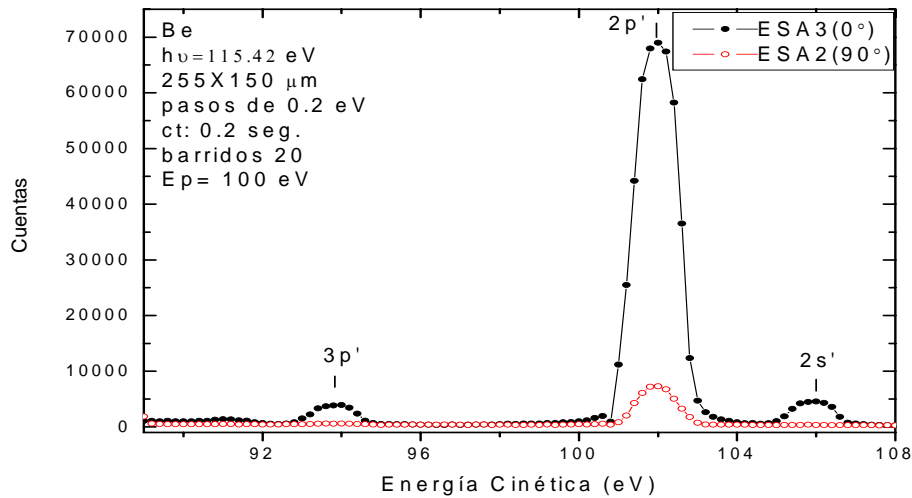


Figura 44. Espectro PES en el máximo de la resonancia 1s-2p.

Los espectros CIS nos dicen con que probabilidad decae una (o varias) resonancias por un canal iónico en particular. De un espectro CIS también se puede estimar el ancho de la resonancia. Por ejemplo, el ancho completo a media altura sin la contribución del monocromador (FWHM) de la resonancia 2p (115.46 eV) medido de un espectro CIS fue de 1.23 eV. Para registrar el espectro CIS de la resonancia 1s-2p en el canal 2p' nosotros le proporcionamos al programa de adquisición de datos la energía de amarre del canal 2p' en nuestro experimento. Esta energía de amarre se obtuvo del espectro PES de la Figura 45 haciendo uso de la ecuación de Einstein para el efecto fotoeléctrico (ecuación 1). Así, el espectrómetro siguió el comportamiento sólo del canal 2p' en el intervalo de energía de fotones establecido. Lo anterior se extiende a los canales de interés que aparecen en el espectro PES de referencia para cada resonancia.

Los espectros CIS a 0° y 90° de la resonancia 1s-2p que tomamos fueron para los canales 2p' y 3p' en el intervalo de energía de fotones de $115.25 \leq h\nu(\text{eV}) \leq 115.75$. Con ellos obtuvimos el comportamiento del parámetro de distribución angular (β) para ambos canales (2p' (Figura 47 panel superior) y 3p' (Figura 47 panel inferior)). Posteriormente a partir de β obtuvimos la sección eficaz parcial de fotoionización σ de esa resonancia también para cada canal (2p' (Figura 47 panel superior) y 3p' (Figura 47 panel inferior)).

8.0 Resultados y discusión.

En esta sección se presentan los espectros obtenidos en ambos experimentos. Primero presentaremos y analizaremos la información que nos dan los espectros de las excitaciones dobles de berilio (ecuación 60) y su comparación con la teoría. Posteriormente abordaremos el análisis de las distribuciones angulares durante el decaimiento de las resonancias $1s \rightarrow np$ ($n=2-9$) (ecuación 63).

En la Figura 45 panel superior se muestra la comparación entre el cálculo y el resultado de nuestras mediciones (en la línea Seya) para la serie de resonancias $3snp$ en berilio atómico entre 16.5 y 20.25 eV convergentes al umbral $3s$.

El resultado de nuestra medición corresponde a los puntos, la línea punteada a los mismos datos suavizados y la línea continua es el espectro teórico de Kim [5] convolucionado al ancho de la línea Seya. El panel superior de la misma Figura 45 puede analizarse en dos regiones: la primera de 16.5 a 19.5 eV corresponde a resonancias más anchas y de amplitud mayor a las resonancias encontradas en la segunda región, de 19.5-20.22 eV. En esta segunda región las resonancias se vuelven más estrechas y más cercanas entre sí ya que en la serie el electrón $3s$ converge a su umbral de ionización en 20.2305 eV (ver tabla 5). De observar las resonancias en el espectro de la región completa de la Figura 45 podemos apreciar que en la región de las resonancias más estrechas (19.5-20.22 eV) la resolución es pobre. Por ello esta región se volvió a estudiar en la corrida hecha en la línea PGMA. En el panel inferior de la Figura 45 se muestra el espectro ampliado en la región de 19.5-20.22 eV. El espectro teórico y los datos obtenidos en ambas líneas pueden compararse; la línea continua corresponde a la predicción teórica convolucionada al ancho del ondulator, los círculos huecos corresponden a los datos experimentales obtenidos en la línea Seya, la línea de segmentos que los une corresponde a los datos suavizados; el resultado de la medición en la línea PGMA corresponde a los puntos negros y la línea de guiones a el suavizado. Dicho lo anterior podemos decir a primera vista que el acuerdo entre teoría y experimento es bueno. Del panel superior de la Figura 45 podemos señalar que las amplitudes y forma de las resonancias en esta región son comparables. La caída en la intensidad de la señal para energías de fotones de 17.5 eV y hacia bajas energías se debe a que a bajas energías cinéticas (cuando se utiliza el horno interno) las cuentas de fondo se incrementan notablemente. Este incremento en el ruido es debido al diseño del horno interno, el cual al ser la fuente de átomos y de fotoelectrones está más cerca del sistema de detección, y, al llegar la radiación al horno también arranca electrones de éste. Esto hace que cuando restamos el fondo en esta región se pierda información sobre la señal real.

Un resultado importante que se puede ver en el panel inferior de la Figura 45 es que la teoría predice que la interacción entre las resonancias $3s5p$ y $3p4s$ hace que se acerquen entre sí; sin embargo en el experimento encontramos que de hecho se repelen.

A nivel instrumental podemos apreciar tras ver los anchos de las resonancias en los espectros, y en particular para el panel inferior de la Figura 46, que la resolución de la línea PGMA es bastante mayor que la de la línea Seya y que la resolución estimada corresponde a lo que se observa en el experimento.

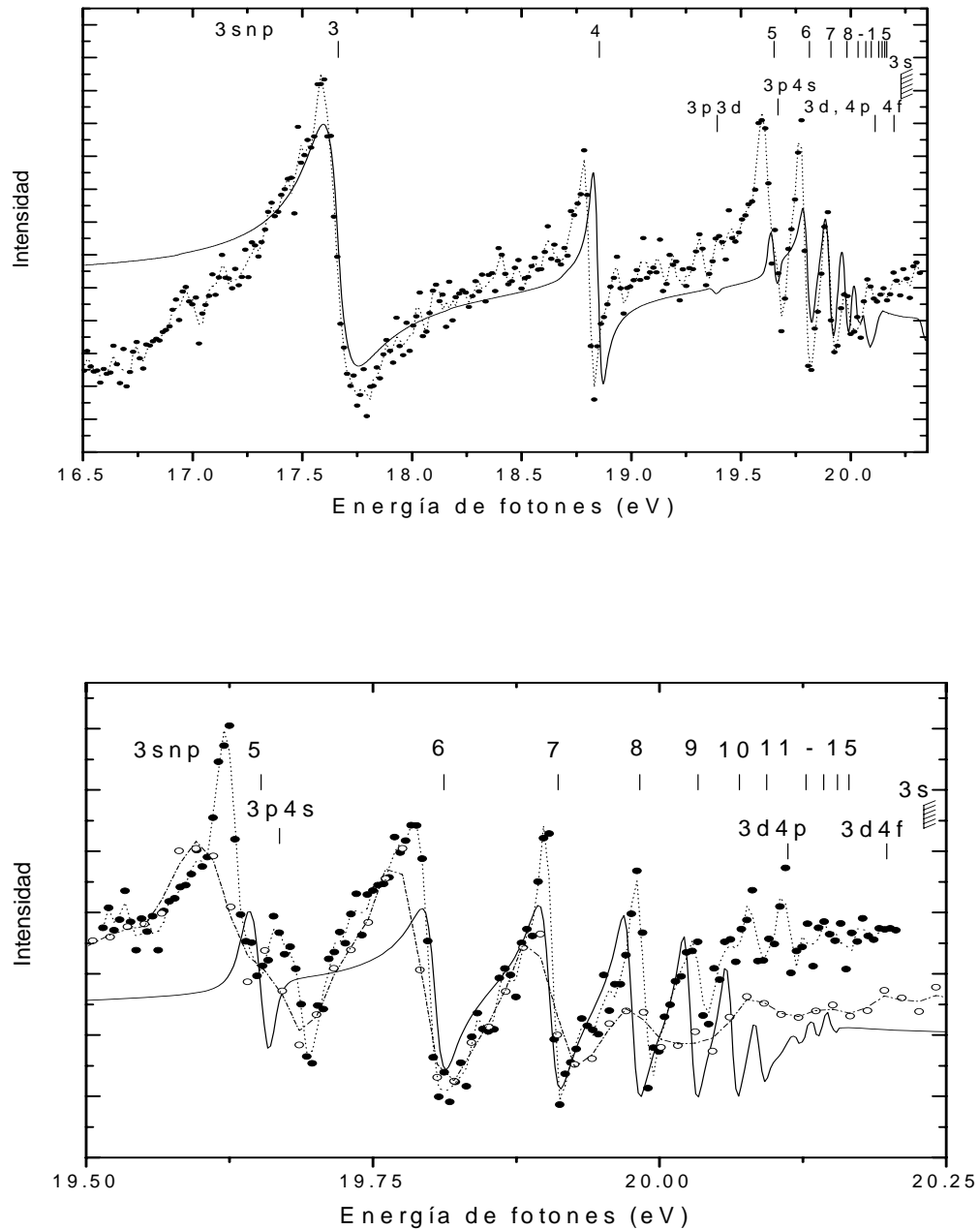


Figura 45. Comparación experimento (puntos) – teoría (línea continua) para la serie de resonancias 3snp en Berilio atómico en la región comprendida entre 16.5 y 20.25 eV (panel superior) y una ampliación de la región comprendida entre 19.5 y 20.2 eV (panel inferior). También se pueden ver algunos elementos de otras series: 3pnd (3,4), 3p4s, 3d4p y 3d4f. Las asignaciones fueron tomadas del trabajo de Kim [5]. Panel superior: espectro tomado en línea Seya (puntos) y datos teóricos (línea continua) convolucionados al paso de banda del monocromador de la primera. Panel inferior: teoría (línea continua) convolucionada al paso de banda de línea PGMA; los círculos negros corresponden al espectro adquirido en la línea PGMA y los círculos blancos al espectro obtenido en la línea Seya, ambos sin convolucionar.

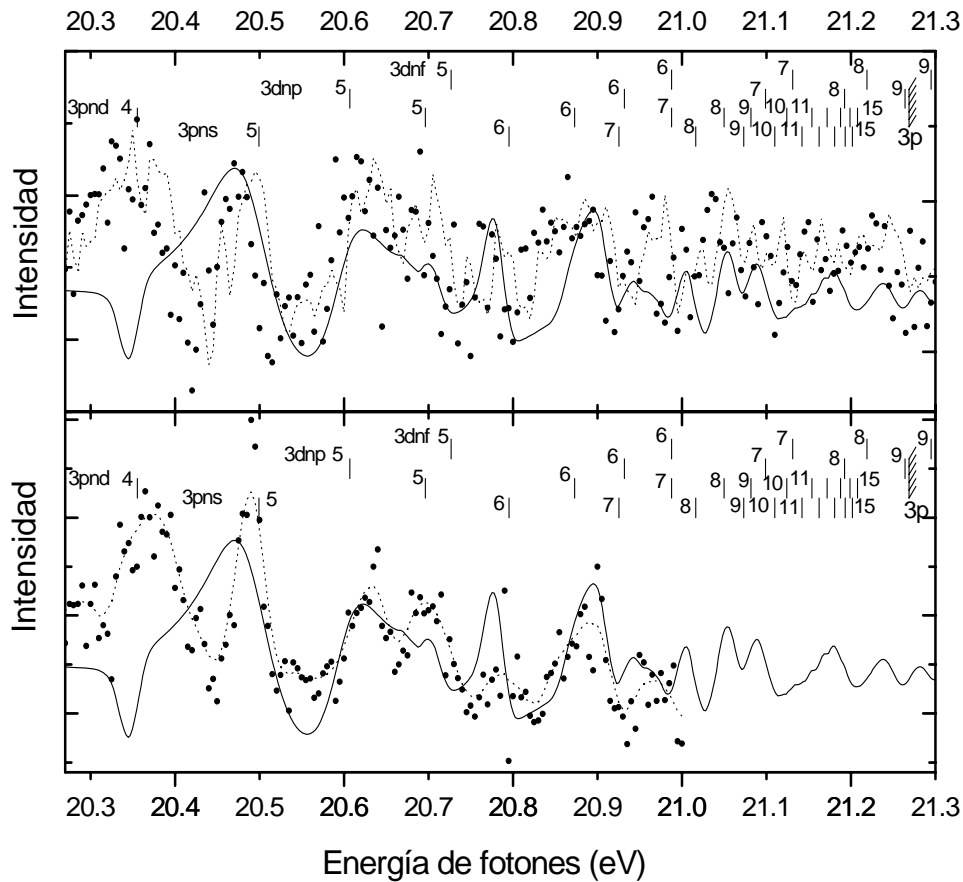


Figura 46. Comparación experimento (puntos y línea punteada) – teoría (línea continua) para las series de resonancias 3pnd, 3pns, 3dnp y 3dnf en Berilio atómico. El panel superior muestra la comparación con los resultados experimentales obtenidos en la línea SS-Seya-Namioka, los puntos “gruesos” corresponden a los resultados experimentales sin suavizar y la línea punteada los mismos pero suavizados. En el panel inferior se muestra una comparación de la teoría con los resultados experimentales obtenidos por la línea del ondulator (ambos convolucionados al paso de banda de la línea Seya).

En la Figura 46 se muestra la comparación entre el cálculo hecho por Kim [5] y los resultados experimentales obtenidos en la línea Seya (panel superior) y la línea PGMA (panel inferior). En ambos casos los puntos corresponden a los datos experimentales y las líneas punteadas que pasan por ellos a los datos suavizados. Los datos teóricos en ambos paneles fueron convolucionados al ancho de la línea Seya al igual que los datos obtenidos en la línea PGMA (panel inferior). En el panel inferior el espectro aparece incompleto porque cuando se tomó el espectro en la línea PGMA sólo se llegó hasta 21.0 eV.

En esta región aparecen mas series de resonancias que interactúan entre si que en la región previa, y esto hace muy complicada la interpretación y la asignación de las resonancias. Nuevamente podemos decir que cualitativamente el acuerdo es favorable

tanto en forma como en intensidades relativas. Un dato interesante que podemos ver es que la teoría predice que la resonancia $3p4d$ con q de Fano igual a cero (resonancia ventana) y en el experimento encontramos que tiene una q positiva y es más ancha. Por otro lado la resonancia vecina $3p5s$ experimentalmente es más delgada que lo predicho por la teoría.

Entonces, de ver los espectros podemos decir que el acuerdo entre teoría y experimento es cualitativamente bueno incluso aunque (como se mencionó anteriormente) nosotros medimos solo la sección eficaz parcial de fotoionización para el canal $2s$, (recordemos que de 19.5 a 20.25 eV tenemos abiertos tanto el canal $2s$ como el $2p$ y que el $3s$ se abre precisamente al pasar 20.26 eV) mientras que el cálculo es sobre la sección eficaz total.

Pasemos ahora a discutir los resultados obtenidos para la distribución angular de los fotoelectrones medida durante el decaimiento de las resonancias $1s \rightarrow np$ ($n = 2-9$). Para cada resonancia primero revisaremos cada canal de manera independiente tanto en β como en σ , después señalaremos las semejanzas y/o diferencias en cada canal para cada resonancia.

En la Figura 47 se muestran la sección eficaz parcial de fotoionización (σ) y el parámetro de distribución angular (β) para los fotoelectrones producidos durante el decaimiento de la resonancia $1s-2p$ por los canales $2p'$ (panel superior) y $3p'$ (panel inferior) para el intervalo de energía de fotones comprendido entre 115.26 y 115.75 eV. De ver los resultados en el panel superior para el canal $2p'$ podemos apreciar que β tiene un comportamiento bastante parecido y definitivamente negativo en toda la región estudiada. Particularmente en la región comprendida entre 115.26 y 115.6 eV las excursiones en el valor de β son pequeñas y cercanas a cero (de -0.059 a -0.25) lo cual implica que la distribución angular de los fotoelectrones está cerca de ser isotrópica. Para energías de fotones mayores a 115.6 eV, β se vuelve bastante más negativa (-0.65 en el mínimo) indicativo de una emisión preferente de fotoelectrones en la dirección perpendicular al vector de polarización de la radiación incidente. Es importante mencionar en este punto que de todos los decaimientos estudiados este es el único que presenta un comportamiento en β en el máximo de la resonancia y fuera de ella parecido.

El comportamiento de β y σ para el decaimiento de la resonancia $1s-2p$ en el canal $3p'$ se muestra en el panel inferior de la misma Figura 47. Aquí β tiene un valor ligeramente positivo en la posición de la resonancia $2p$ ($\beta = 0.12$) y cerca de ella, sin embargo a medida que salimos de la resonancia claramente el valor de β se vuelve más negativo tendiendo a un valor de -1.

De comparar las intensidades en las secciones eficaces para cada canal encontramos que el decaimiento de la resonancia $2p$ es preferentemente por el canal $2p'$ sobre el $3p'$, resultado que concuerda con mediciones anteriores [21].

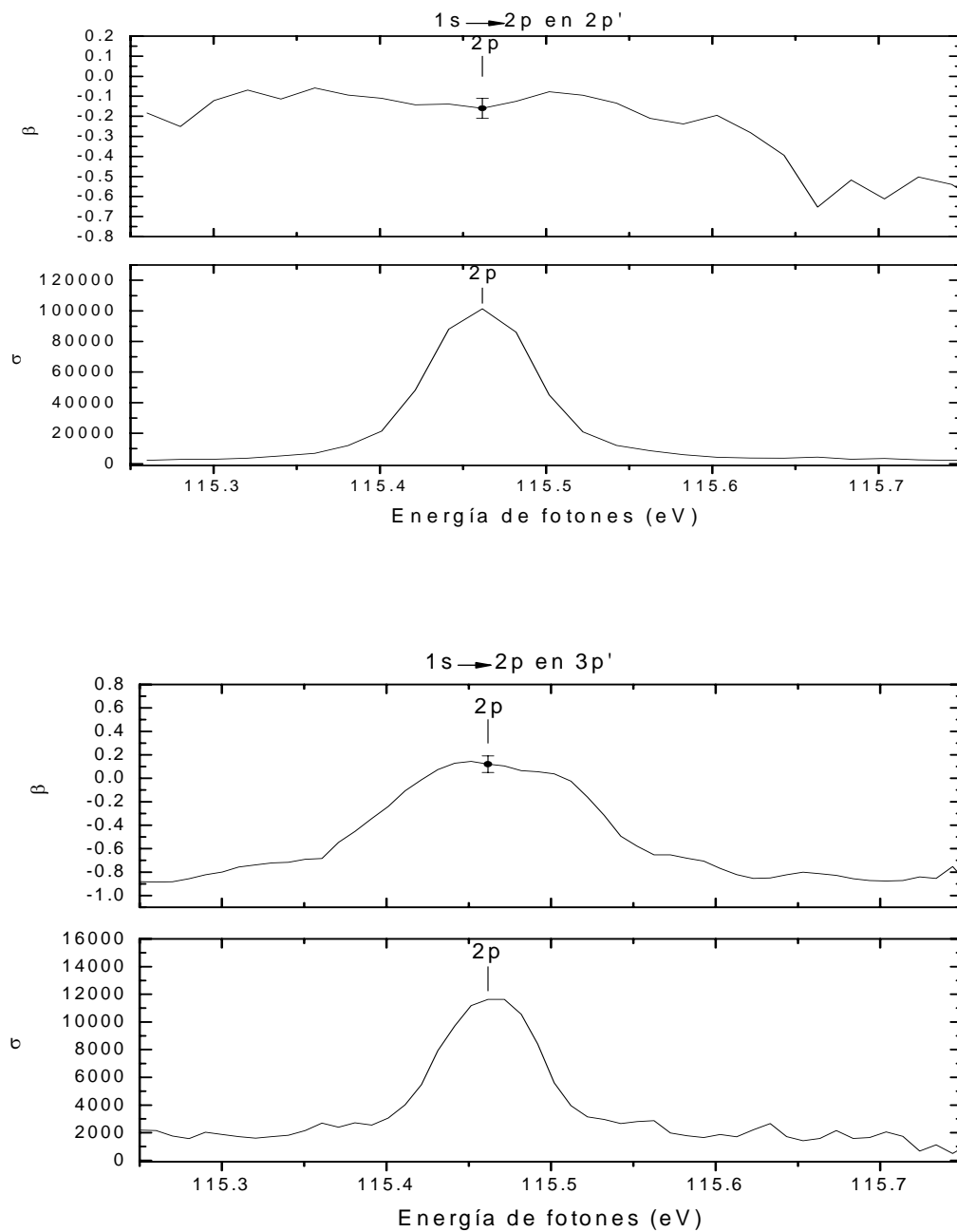


Figura 47. Sección eficaz parcial de fotoionización (σ) y parámetro de distribución angular (β) para los fotoelectrones producidos durante el decaimiento de la resonancia 1s-2p por el canal 2p' (panel superior) y por el canal 3p' (panel inferior) para el intervalo de energía de fotones comprendido entre 115.26 y 115.75 eV.

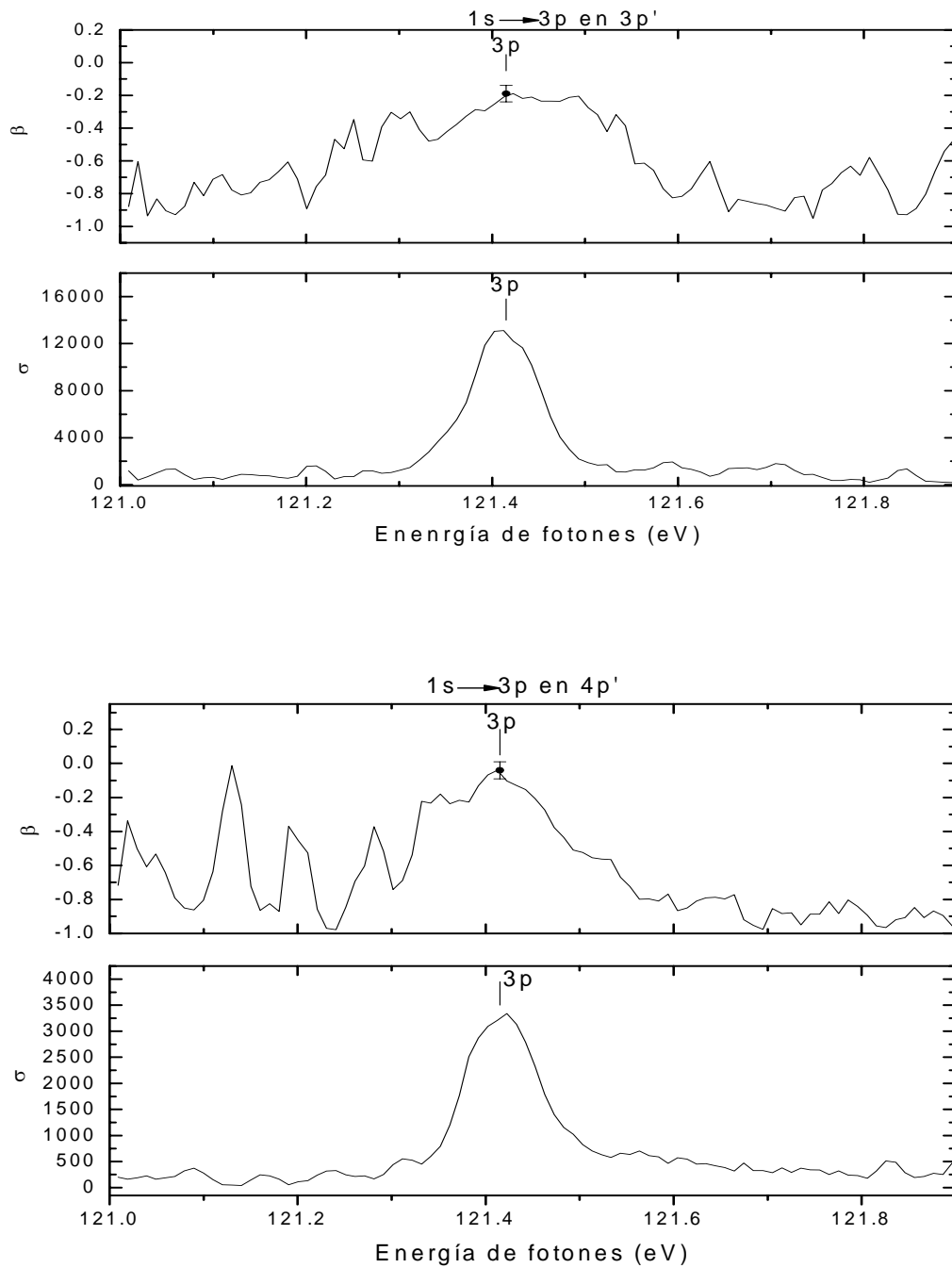


Figura 48. Sección eficaz parcial de fotoionización (σ) y parámetro de distribución angular (β) para los fotoelectrones producidos durante el decaimiento de la resonancia $1s-3p$ por el canal $3p'$ (panel superior) y por el canal $4p'$ (panel inferior) para el intervalo de energía de fotones comprendido entre 121.0 y 121.9 eV.

El comportamiento dinámico de β y σ para la resonancia 1s-3p por el canal 3p' y por el canal 4p' entre 121.0 y 121.9 eV se puede ver en la Figura 48. De comparar el comportamiento de β en los máximos de las resonancias en ambos canales podemos decir que la β de los dos está cerca de ser isotrópica. Al presentar ambos un ligero valor negativo se deduce que la emisión de fotoelectrones es ligeramente preferente en el plano perpendicular al vector de polarización de la radiación incidente; más para el canal 3p' que el 4p'. En ambos canales al alejarnos energéticamente de las posiciones de las resonancias el valor de β decrece hacia valores más negativos. Si la resonancia esta comprendida entre 121.3 y 121.55 eV las oscilaciones en β fuera de ella carecen de sentido pues ahí la estadística es pobre.

Para la misma resonancia (3p) nuevamente podemos ver que al igual que en la resonancia 2p el decaimiento es preferentemente en el canal iónico con el mismo número cuántico principal que la resonancia, $n = 3$ en este caso. Esto concuerda con los resultados obtenidos anteriormente [21]. Adicionalmente podemos ver que para el canal iónico 4p' el perfil de línea tiene un ligero perfil tipo Beutler-Fano (obsérvese Fig. 47 panel inferior que para el canal 4p' hay mas cuentas del lado derecho de la resonancia que del lado izquierdo de la misma). Un perfil de ese tipo corresponde a una $q > 0$ (ver Figura 5).

El comportamiento de β y σ observado para el decaimiento de las resonancias 4p, 5p y 6p por los canales 4p', 5p' y 6p' puede verse en los gráficos de las Figuras 50 y 51. La β de la resonancia 4p en los tres canales de salida es negativa. Como en todos los casos vistos hasta el momento la distribución está cerca de ser isotrópica en el máximo de la resonancia volviéndose más negativa al salir de ella.

La resonancia 4p decae preferentemente por el canal 5p' (shake up), seguido por el canal 4p' (espectador) siendo el canal 6p' (shake up) el menos probable.

La resonancia 5p decae preferentemente por el canal 5p' (espectador), el siguiente canal con mas probabilidad es el 6p' (shake up) y como en el caso de la resonancia 4p el canal producido por shake down es muy poco probable (4p'). La β para esta resonancia en todos los canales es definitivamente negativa, sus valores en las resonancias son cerca de ser isotrópicos especialmente para el canal 6p'.

Al igual que en las resonancias anteriores la β de esta resonancia (5p) por los canales 4p', 5p' y 6p' es ligeramente negativa en los máximos de las resonancias (especialmente en el canal 6p' su valor está cerca de ser isotrópico) y tiende a valores mas negativos al alejarse de los máximos.

Los átomos que alcanzan la resonancia 6p decaerán mas probablemente por el canal 6p' (espectador), el siguiente canal con mayor probabilidad es el 5p' (shake down) y minimamente por el canal 4p'. β para esta resonancia es ligeramente negativa con valores cercanos a -0.2 en los canales 5p' y 6p'. La β del canal 4p' es, en la posición de la resonancia también ligeramente negativa, pero vemos que fuera de ella oscila de manera significativa incluso volviéndose positiva hacia altas energías; sin embargo, estas excursiones son poco confiables por la pobre estadística en la región.

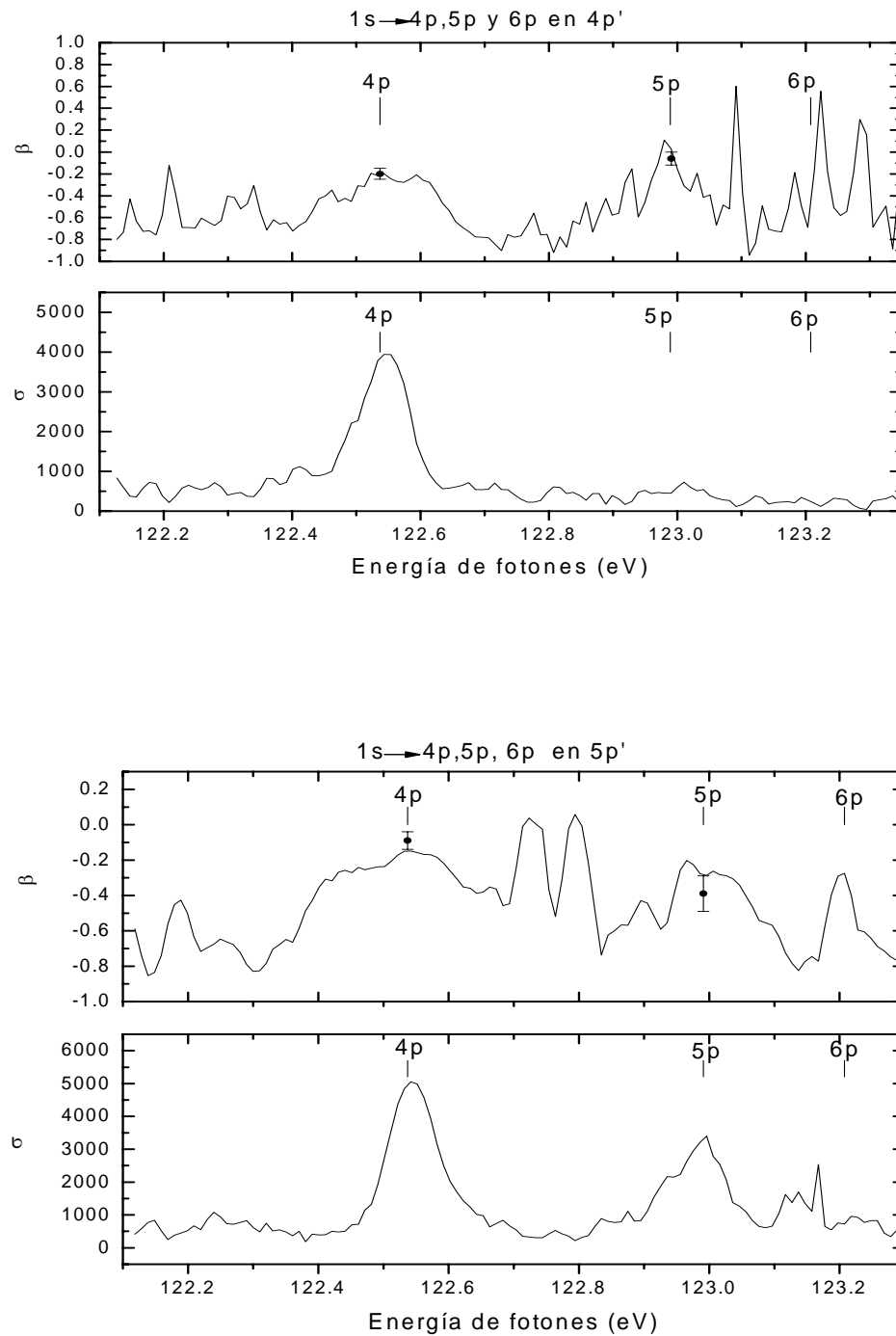


Figura 49. Sección eficaz parcial de fotoionización (σ) y parámetro de distribución angular (β) para los fotoelectrones producidos durante el decaimiento de las resonancias 1s-np ($n = 4, 5, 6$) por el canal 4p' (panel superior) y por el canal 5p' (panel inferior) para el intervalo de energía de fotones comprendido entre 122.1 y 123.3 eV.

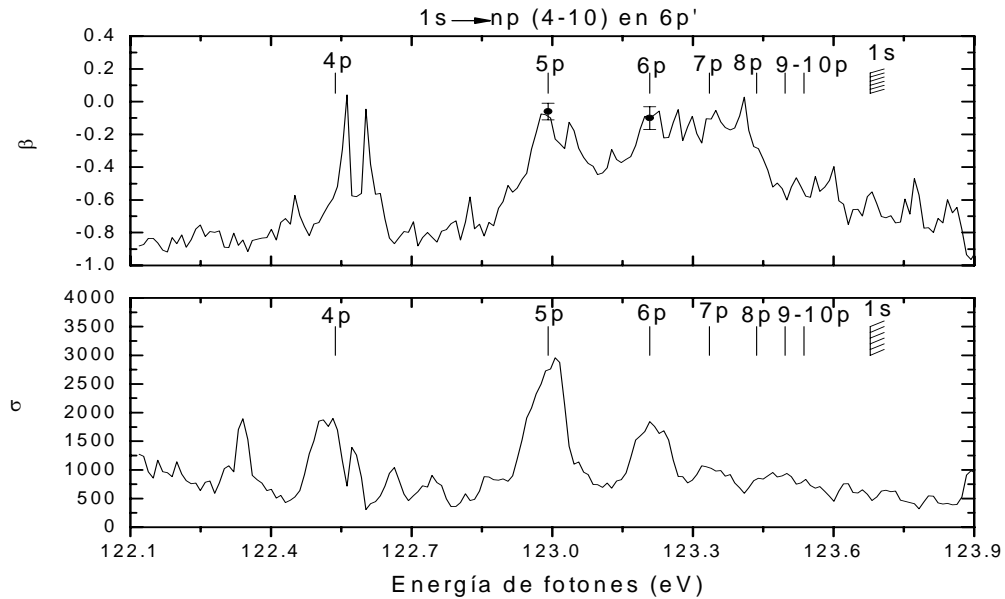


Figura 50. Sección eficaz parcial de fotoionización (σ) y parámetro de distribución angular (β) para los fotoelectrones producidos durante el decaimiento de las resonancias $1s-np$ ($n = 4 - 9$) por el canal $6p'$ para el intervalo de energía de fotones comprendido entre 122.1 y 123.9 eV.

Observamos que todas las resonancias tienen una q de Fano lo suficientemente grande como para que el perfil de línea que se observa sea esencialmente lorentziano. Salvo el decaimiento de la resonancia $2p$ en el canal $2p'$ todos los decaimientos presentan un comportamiento similar: cerca de la resonancia la distribución de los fotoelectrones está cerca de ser isotrópica con ligera preferencia por la emisión en la dirección perpendicular (todas las β son negativas salvo β de la resonancia $2p$ en el canal $3p'$) al vector de polarización de la radiación incidente, pero a medida que nos alejamos de ella la β se vuelve más negativa.

El espectro de σ $1s-np$ ($n = 4 - 10$) para el canal $6p'$ (Figura 50 panel inferior) nos sirvió adicionalmente para estimar el umbral de fotoionización para el electrón $1s$ promovido al continuo en Berilio atómico. Esto se hizo graficando el inverso del número cuántico efectivo al cuadrado de cada resonancia [$1/n_{\text{ef}}^2 = 1/(n - \delta)^2$] contra la posición en energía de las resonancias medidas ajustadas a los valores más precisos de experimentos de absorción [6-7] (ver Tabla 6 columna c). Donde n es el número cuántico principal de la resonancia y δ es un parámetro conocido como defecto cuántico. Se obtuvo una recta (ver Figura 51 panel superior). A la porción de esta recta formada por las posiciones de las resonancias con $n \geq 4$ se le hizo un ajuste lineal variando δ buscando que la pendiente correspondiera al valor conocido del Rydberg de Berilio (Figura 51 panel inferior). La ordenada al origen de la recta es el valor de la energía de amarre E_b del electrón ($1s$) que se promueve en dicha serie (np).

Lo anterior puede expresarse como

$$E = -\frac{\mu_{Be}}{2\hbar^2} \left(\frac{4e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^{*2}} + E_{b(1s)} \quad (68 a)$$

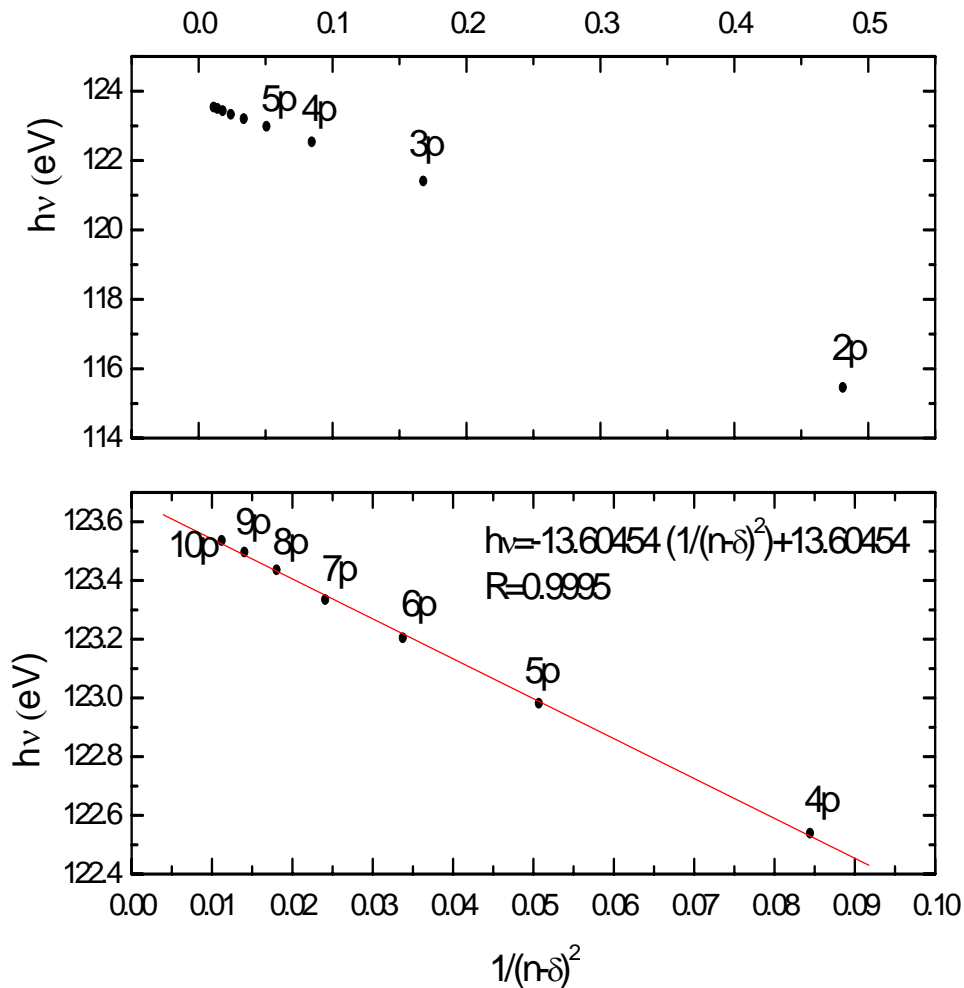


Figura 51. Grafico de inverso de numero cuántico efectivo contra posición en energía de las resonancias 1s-np para $n=2-10$ en Berilio atómico (panel superior) y para $n = 4-10$ (panel inferior).

En la tabla 6 se muestran las posiciones de las resonancias obtenidas en este trabajo y una comparación con los trabajos anteriores de Jannitti [7] y Jiménez [20-21]. Por último en la tabla 7 se muestra una comparación entre los diferentes valores del umbral 1s de Be reportados en la literatura y este trabajo.

Resonancia	Energía de fotones (eV) ^a	Energía de fotones (eV) ^b	Energía de fotones (eV) ^c
1s 2s ² 2p	115.46	115.49	115.46 ± 0.005
1s 2s ² 3p	121.39	121.42	121.41 ± 0.005
1s 2s ² 4p	122.52	122.52	122.54 ± 0.005
1s 2s ² 5p	123.00	122.96	122.98 ± 0.005
1s 2s ² 6p	-	123.16	123.20 ± 0.005
1s 2s ² 7p	-	-	123.34 ± 0.005
1s 2s ² 8p	-	-	123.44 ± 0.005
1s 2s ² 9p	-	-	123.50 ± 0.005
1s 2s ² 10p			123.54 ± 0.005

Tabla 6. Posiciones en energía de las resonancias 1s-np (n=2-9) en Berilio atómico.^a Jannitti [7],^b Jiménez [20-21] y ^c este trabajo (posiciones ajustadas a los valores mas precisos de Jannitti [7]).

Umbral/trabajo	Janniti [7]	Krause[1]	Bunge ^a	Este trabajo
Umbral 1s (eV)	123.3518	123.56	123.66	123.678± 0.008

^a Cálculo hecho por C.F. Bunge-Molina y P. Olalde-Velasco, trabajo no publicado.

Tabla 7. Valores repostados para el umbral 1s.

Con el análisis anterior encontramos para un defecto cuántico de los orbitales p $\delta_p = 0.55826$, un $Ry_{Be} = 13.60 \pm 0.20$ eV y el umbral de ionización del electrón 1s en $E_{b(1s)} = 123.678 \pm 0.008$ eV. El ajuste hecho a nuestros datos es la línea continua en la Figura 51 panel inferior.

Si de la ecuación (68 a) despejamos el defecto cuántico (δ),

$$-\delta = \sqrt{\frac{13.6049}{123.68 - hv(n)}} - n \quad (68 b)$$

con el valor del $Ry_{Be} = 13.6049$ eV, el umbral 1s estimado (123.68 eV) y la posición en energía de cada resonancia $hv(n)$ podemos saber cual es el defecto cuántico que corresponde a la posición asignada. Lo anterior se hizo y se muestra en la Tabla 8. Podemos ver que las posiciones de las resonancias 1s-np con n=3, 4, 5 y 8 dan defectos cuánticos muy similares al estimado en el ajuste; y aunque para n=2,6 y 7 la diferencia sigue siendo favorable ya no lo es para n=9 y 10. De lo anterior puede interpretarse que la posición asignada de las resonancias no es la correcta. Nuevamente podemos tomar el valor del defecto cuántico de ajuste ($\delta = 0.55826$), usar la ecuación (68 a) y para estas resonancias (n=2,6,7,9 y 10) estimar la posición "correcta (columna ^c en Tabla 8).

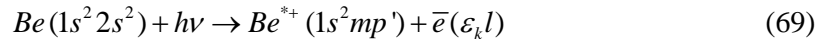
Resonancia	Energía (eV) ^a	(δ_p) ^b	Energía (eV) ^c
1s 2s ² 2p	115.46 ± 0.005	0.7134	117.13
1s 2s ² 3p	121.41 ± 0.005	0.5521	121.40
1s 2s ² 4p	122.54 ± 0.005	0.5473	122.53
1s 2s ² 5p	122.98 ± 0.005	0.5840	122.99
1s 2s ² 6p	123.20 ± 0.005	0.6521	123.22
1s 2s ² 7p	123.34 ± 0.005	0.7176	123.35
1s 2s ² 8p	123.44 ± 0.005	0.5314	123.43
1s 2s ² 9p	123.50 ± 0.005	0.3871	123.49
1s 2s ² 10p	123.54 ± 0.005	0.2460	123.53

Tabla 8. ^a nuestra asignación (tabla 6 columna c), ^b defecto cuántico obtenido de la ecuación (68 b) con nuestra asignación y ^c posiciones obtenidas con $\delta_p = 0.55826$ usando ecuación (68 a)

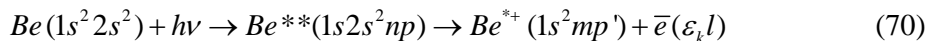
De la tabla 8 podemos ver que el valor que difiere mas es el de la resonancia 2p. Esto porque nuestro defecto cuántico de ajuste $\delta_p = 0.55826$ se obtuvo de las posiciones para $n > 3$. Por otro lado vemos que nuestras asignaciones difieren de las “correctas” por 10 meV en promedio (descartando la resonancia 2p).

Para interpretar los resultados experimentales relativos al parámetro de distribución angular de los fotoelectrones producidos por el decaimiento de las resonancias 1s- np , haremos una breve descripción de los procesos involucrados con un modelo sencillo. Los canales de salida a considerar serán los que los balances conocidos (energía, momento angular y paridad) en la aproximación dipolar eléctrica nos permiten. Con esto obtendremos información (vía la matriz de densidad reducida) sobre la distribución angular de los fotoelectrones. Posteriormente haremos uso de la teoría de Fano [16,17,35] sobre la interacción de estados discretos en el continuo y la llamada aproximación repentina (capítulo 1). En la última los elementos de matriz al cuadrado entre los estados np del estado resonante con los estados mp' del ión nos dan la probabilidad de decaimiento [20-21]. Estos estados del ión serán con $m > n$ satélites tipo shake-up, con $m < n$ satélites shake-down o si $m = n$ satélite espectador puro. La validez de nuestro modelo será puesta prueba con los resultados experimentales.

La fotoionización del átomo de Berilio a partir del estado base para dejar al ión en un estado satélite del tipo $1s^2 mp'$ ($m = 2 - 9$) puede llevarse acabo por dos vías, el proceso directo:



y el proceso resonante



Por simplicidad, para describir el proceso vemos cuales son los canales abiertos en el continuo. Sabemos que los procesos de fotoionización deben respetar los balances de energía, momento angular y paridad. En acoplamiento **LS** el estado base de Berilio es 1S_0 ($\mathbf{S} = \mathbf{0}$) y estado del ión $Be^{*+}(1s^2 mp')$ es un $^2P_{3/2,1/2}$ en cualquiera de los dos posibles valores de \mathbf{J} . En la aproximación dipolar eléctrica los balances de energía, momento

angular y en particular el de paridad obligan a que los únicos canales de salida permitidos para el fotoelectrón sean: ondas “s” u ondas “d”. Por otro lado, solo esperamos observar en el laboratorio el estado final del sistema (ión-fotoelectrón) como 1P_1 . Esto porque estamos en el contexto de la aproximación dipolar eléctrica y en ella, entre el estado inicial (átomo) y final (ión-fotoelectrón) $\Delta S=0$.

Pero para estas ondas (“s” o “d”) ¿qué proyecciones de momento angular son las pertinentes?. Para responder a esta cuestión debemos recordar que el fotón tiene un momento angular $l = 1$ y que la radiación linealmente polarizada tiene proyección $m_l = 0$. Esto restringe que el estado final de ión sea tal que su $\mathbf{L} = 1$ y su proyección $\mathbf{M}_L = 0$. Seccionemos nuestro problema analizándolo primero para el caso en el que el ión $\text{Be}^{*+} 1s^2 mp'$ se acopla con el fotoelectrón en ondas “s”. De aquí en adelante por cuestión de simplicidad dejaremos de escribir la parte de la capa cerrada del estado del ión y solo nos quedaremos con la etiqueta mp' que es la que determina el momento angular del ión. Entonces para el ión en el estado mp' ($l = 1$) y el fotoelectrón en ondas “s” ($l = 0$) tenemos que la única posibilidad para que $\mathbf{L} = 1$ y $\mathbf{M}_L = 0$ ocurre cuando la proyección del momento angular del ión es $m_l = 0$, ya que $m_l = 0$ también para las ondas tipo “s”. Con esto la etiqueta para el estado mp' ε_s se puede reescribir de manera más explícita como:

$$|mp' \varepsilon_s\rangle = |ml m_l\rangle |\varepsilon_{ie} m_{ie}\rangle = |mp' 0\rangle |\varepsilon_s 0\rangle \quad (71)$$

Un razonamiento similar nos lleva a obtener para el caso del estado $mp' \varepsilon_d$:

$$|mp' \varepsilon_d\rangle = \sqrt{\frac{3}{10}} |mp' -1\rangle |\varepsilon_d +1\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} |mp' 0\rangle |\varepsilon_d 0\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}} |mp' +1\rangle |\varepsilon_d -1\rangle \quad (72)$$

Donde los coeficientes de los vectores estado en la ecuación (72) son los Clebsch - Gordan (extraídos de tablas de acoplamiento de momentos angulares [35]) y reflejan el hecho de que cada estado contribuye con un peso diferente al vector estado del canal $mp' \varepsilon_d$. El estado final compuesto por los canales $mp' \varepsilon_s$ (71) y $mp' \varepsilon_d$ (72) puede expresarse matemáticamente como

$$|\Phi_{\text{Be}^{*+}\varepsilon_i}\rangle = \alpha |mp' 0\rangle |\varepsilon_s 0\rangle + \beta \left[\sqrt{\frac{3}{10}} |mp' -1\rangle |\varepsilon_d +1\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} |mp' 0\rangle |\varepsilon_d 0\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}} |mp' +1\rangle |\varepsilon_d -1\rangle \right] \quad (73)$$

La ecuación 73 es la función de onda del estado final que contiene toda la información del sistema. En ella los coeficientes α y β son números complejos que nos indican con cuánto contribuye cada canal de salida a la función de onda del estado final. Para los fines de esta discusión es conveniente expresar la ecuación (73) en términos de la fase δ , para ello podemos factorizar α de manera que

$$|\Phi_{\text{Be}^{*+}\varepsilon_i}\rangle = \alpha \left[|mp' 0\rangle |\varepsilon_s 0\rangle + \frac{\beta}{\alpha} \left(\sqrt{\frac{3}{10}} |mp' -1\rangle |\varepsilon_d +1\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} |mp' 0\rangle |\varepsilon_d 0\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}} |mp' +1\rangle |\varepsilon_d -1\rangle \right) \right] \quad (74)$$

donde β/α es igual a

$$\frac{\beta}{\alpha} = \frac{r_\beta e^{i\theta_\beta}}{r_\alpha e^{i\theta_\alpha}} = \frac{r_\beta}{r_\alpha} e^{i(\theta_\beta - \theta_\alpha)} = \frac{r_\beta}{r_\alpha} e^{\delta} \quad (75)$$

y así tenemos finalmente

$$\left| \Phi_{Be^{*+}\varepsilon_i} \right\rangle = r_\alpha e^{i\theta_\alpha} \left[|mp'0\rangle |\varepsilon_s 0\rangle + \frac{r_\beta}{r_\alpha} e^{i\delta} \left(\sqrt{\frac{3}{10}} |mp'-1\rangle |\varepsilon_d + 1\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} |mp'0\rangle |\varepsilon_d 0\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}} |mp'+1\rangle |\varepsilon_d - 1\rangle \right) \right] \quad (76)$$

la función de onda del estado final expresada en términos de la fase.

En nuestros experimentos medimos la distribución angular de los fotoelectrones a cero y noventa grados respecto al vector de polarización producidos durante el decaimiento de las resonancias. ¿Cómo podemos obtener información sobre la dirección preferente de emisión de los fotoelectrones durante el decaimiento a partir de esta función de onda del estado final? La respuesta es que podemos extraer la información haciendo uso de la matriz de densidad [70]. La matriz de densidad es un operador de proyección que para nuestro sistema puede expresarse como:

$$\rho' = \left| \Phi_{Be^{*+}\varepsilon_i} \right\rangle \left\langle \Phi_{Be^{*+}\varepsilon_i} \right| \quad (77)$$

Tenemos cuatro estados que describen todos los posibles estados del sistema ión-fotoelectrón que acoplados nos dan 1P_1 . Por simplicidad vamos a reetiquetarlos como:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |mp'0\rangle |\varepsilon_s 0\rangle \\ |2\rangle &= |m'p0\rangle |\varepsilon_d 0\rangle \\ |3\rangle &= |mp'-1\rangle |\varepsilon_d + 1\rangle \\ |4\rangle &= |mp'+1\rangle |\varepsilon_d - 1\rangle \end{aligned} \quad (78)$$

Toda la información del sistema ión-fotoelectrón está contenida en esta matriz de densidad. La matriz de densidad del sistema ión-fotoelectrón es una matriz de 4X4 cuyos 16 elementos de matriz son de tipo similar al que se calcula a continuación para el elemento $\langle 1|\rho'|1\rangle$

$$\begin{aligned} \langle 1|\rho'|1\rangle &= \langle mp'0|\langle \varepsilon_s 0| \left\langle \Phi_{Be^{*+}\varepsilon_i} \right\rangle \left\langle \Phi_{Be^{*+}\varepsilon_i} \right| |mp'0\rangle |\varepsilon_s 0\rangle \\ &= \langle mp'0|\langle \varepsilon_s 0| r_\alpha e^{i\theta_\alpha} \left[|mp'0\rangle |\varepsilon_s 0\rangle + \frac{r_\beta}{r_\alpha} e^{i\delta} \left(\sqrt{\frac{3}{10}} |mp'-1\rangle |\varepsilon_d + 1\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} |mp'0\rangle |\varepsilon_d 0\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}} |mp'+1\rangle |\varepsilon_d - 1\rangle \right) \right] \right\rangle \\ &= \left\langle r_\alpha e^{-i\theta_\alpha} \left[\langle mp'0|\langle \varepsilon_s 0| + \frac{r_\beta}{r_\alpha} e^{-i\delta} \left(\sqrt{\frac{3}{10}} \langle mp'-1|\langle \varepsilon_d + 1| - \sqrt{\frac{2}{5}} \langle mp'0|\langle \varepsilon_d 0| + \sqrt{\frac{3}{10}} \langle mp'+1|\langle \varepsilon_d - 1| \right) \right] \right] |mp'0\rangle |\varepsilon_s 0\rangle \right\rangle \\ &= r_\alpha^2 \end{aligned} \quad (79)$$

Por otro lado, la matriz de densidad con la información de los estados del ión es una matriz de 3X3; pues solo hay tres posibles estados del ión que acoplados a los posibles canales del fotoelectrón nos dan 1P_1 . Si nosotros tomamos la traza de la matriz de densidad del ión (Tr_{ion}) y proyectamos sus tres elementos en los estados del ión (ρ') (que no medimos en el experimento) al final nos quedamos solo con la información referente a los fotoelectrones (que sí medimos en el experimento). Esto se conoce como la matriz de densidad reducida ρ

$$\rho = Tr_{ion}\rho' \quad (80)$$

Al hacer lo arriba expuesto se obtiene

$$\begin{aligned} \rho = & \langle mp' 0 | \rho' | mp' 0 \rangle + \langle mp' -1 | \rho' | mp' -1 \rangle + \langle mp' +1 | \rho' | mp' +1 \rangle = r_\alpha^2 |\varepsilon_s 0\rangle \langle \varepsilon_s 0| - \sqrt{\frac{2}{5}} r_\alpha r_\beta e^{-i\delta} |\varepsilon_s 0\rangle \langle \varepsilon_d 0| - \\ & - \sqrt{\frac{2}{5}} r_\alpha r_\beta e^{i\delta} |\varepsilon_d 0\rangle \langle \varepsilon_s 0| + \frac{2}{5} r_\beta^2 |\varepsilon_d 0\rangle \langle \varepsilon_d 0| + \frac{3}{10} r_\beta^2 |\varepsilon_d +1\rangle \langle \varepsilon_d +1| + \frac{3}{10} r_\beta^2 |\varepsilon_d -1\rangle \langle \varepsilon_d -1| \end{aligned} \quad (81)$$

Donde debe notarse que la matriz de densidad (ecuación 77) solo se proyectó sobre los tres posibles estados del ión dejándonos únicamente la información de los fotoelectrones (ecuación 81). En este punto es deseable cambiar esas funciones a la representación de coordenadas. Una vez en la representación de coordenadas desearíamos solo quedarnos con la parte angular de ellas. Para hacer eso debemos proyectar nuestra matriz de densidad reducida (ecuaciones 80 y 81) de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \langle r, \theta, \phi | \varepsilon, l, m \rangle &= Y_{lm}(\theta, \phi) F_{\varepsilon l}(r) \\ \langle \varepsilon, l, m | r, \theta, \phi \rangle &= Y_{lm}^*(\theta, \phi) F_{\varepsilon l}(r) \end{aligned} \quad (82)$$

Donde $F_{\varepsilon l}(r)$ representa las funciones radiales del fotoelectrón que se usan para describir la dependencia radial de las funciones del fotoelectrón en el continuo ε con momento angular l ; y $Y_{lm}(\theta\Phi)$ son los armónicos esféricos. Hecho lo anterior se obtiene

$$\begin{aligned} \langle r, \theta, \phi | \rho | r, \theta, \phi \rangle = & r_\alpha^2 \frac{1}{4\pi} - r_\alpha r_\beta e^{-i\delta} \frac{1}{4\pi\sqrt{2}} (3\cos^2\theta - 1) - r_\alpha r_\beta e^{i\delta} \frac{1}{4\pi\sqrt{2}} (3\cos^2\theta - 1) + \\ & + r_\beta^2 \frac{1}{8\pi} (3\cos^2\theta - 1)^2 + 2r_\beta^2 \left(\frac{9}{16\pi} \right) \sin^2\theta \cos^2\theta \end{aligned} \quad (83)$$

misma que tras reorganizar se convierte en

$$\langle r, \theta, \phi | \rho | r, \theta, \phi \rangle = \frac{r_\alpha^2 + r_\beta^2}{4\pi} \left[1 + \frac{3\cos^2\theta - 1}{2} \left(\frac{r_\beta^2 - r_\alpha r_\beta}{r_\alpha^2 + r_\beta^2} \right) 2\sqrt{2} \cos\delta \right] \quad (84)$$

si recordamos que la expresión para sección eficaz parcial diferencial es

$$\frac{d\sigma_{if}}{d\Omega} = \frac{\sigma_{if}}{4\pi} \left[1 + \beta_{if}(h\nu) P_2(\cos\theta) \right] \quad (85)$$

Y luego, si establecemos una correspondencia entre las ecuaciones 84 y 85 tenemos que

$$\begin{aligned} \langle r, \theta, \phi | \rho | r, \theta, \phi \rangle &= \frac{d\sigma_{if}}{d\Omega}, \quad \sigma_{if} = r_\alpha^2 + r_\beta^2, \\ P_2(\cos \theta) &= \frac{3\cos^2 \theta - 1}{2} \quad \text{y} \quad \beta_{if} = 2\sqrt{2} \cos \delta \left(\frac{r_\beta^2 - r_\alpha r_\beta}{r_\alpha^2 + r_\beta^2} \right) \end{aligned} \quad (86)$$

y entonces

$$\sigma_{2pks} = r_\alpha^2 \quad \text{y} \quad \sigma_{2pkd} = r_\beta^2 \quad (87)$$

La ecuación (84) es pues la expresión para la sección eficaz parcial diferencial de fotoionización. En las ecuaciones (84) y (86) vemos que la distribución angular depende de la fase relativa δ entre los 2 canales de salida (87) (ondas “s” y ondas “d”). La expresión para β que obtuvimos es para el proceso de fotoionización directo que deja al ión en un estado excitado $m'p$ (satélite).

Nosotros, para llegar al estado final pasamos por una resonancia. Como esta resonancia $|1s2s2snp\rangle$ es un estado discreto que está por encima del primer potencial de ionización, hay interacción entre esta con las funciones de onda del continuo $|1s1smp' \varepsilon_i\rangle$. La teoría desarrollada por Fano [35] nos dice como interactúan ambos estados. Esta, aplicada a nuestro sistema nos dice que las funciones que son solución de la ecuación de Schrödinger son del tipo

$$|\Psi\rangle = a|1s2s2snp\rangle + \int b_\varepsilon |1s1smp' \varepsilon_i\rangle d\varepsilon \quad (88)$$

La energía de interacción que da origen a la mezcla de estados discreto y continuo (ecuación 88) está dado por V_e y es explícitamente para nuestro caso

$$V_e = \langle 1s2s2snp | H | 1s1smp' \varepsilon_i \rangle \quad (89)$$

donde el operador Hamiltoniano (H) en unidades atómicas tiene la forma

$$H = -\sum_{i=1}^4 \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^4 \frac{4}{r_i} + \sum_{i<j} \frac{1}{r_{ij}} + \sum_i \bar{l}_i \bar{s}_i \quad (90)$$

En la expresión (90) la primera suma corresponde a la energía cinética de cada uno de los electrones en Be, la segunda suma corresponde a la atracción coulombica entre el núcleo ($Z=4$) y los 4 electrones, r_i es la distancia del electrón i al núcleo y r_{ij} su distancia respecto a la posición del electrón j . La tercera suma es el término coulombico repulsivo entre los electrones, y la última suma contiene la información sobre la interacción entre el espín de los electrones (s_i) y su movimiento orbital (l_i).

Si en la expresión (89) se usan funciones de onda de “una configuración” para describir tanto a la resonancia como al ión con su fotoelectrón, y si suponemos que, los orbitales de la función de onda para la configuración de la resonancia no son ortogonales a los de

la función de onda del ión-fotoelectrón, entonces el término dominante de la expresión (89) es

$$V_e = \langle 1s | 1s \rangle \langle np | mp' \rangle \langle 2s2s | H | 1s \varepsilon_l \rangle \quad (91)$$

Lo anterior es válido por un lado, en el contexto de la aproximación repentina que implica que el hueco creado en la capa interna $1s$ ocurrió de manera súbita, de modo que el orbital $1s$ de la resonancia y el del ión son esencialmente los mismos que los del átomo antes de la perturbación. Por otro lado en el modelo del espectador, donde los elementos de matriz al cuadrado entre los estados np del estado resonante con los estados mp' del ión nos dan la probabilidad de decaimiento [20]. Estos estados del ión serán con $m > n$ satélites tipo shake-up, con $m < n$ satélites shake-down o si $m = n$ satélite espectador puro. Toda esta información está contenida en los dos primeros términos de V_e (expresión 91). Mientras que el último contiene la información relativa a la emisión de los fotoelectrones.

Por las aproximaciones que hemos hecho, cuando evaluamos la ecuación (91) encontramos que

$$V_e = \langle np | mp' \rangle \langle 2s2s | \frac{1}{r_{12}} | 1s \varepsilon_l \rangle \quad (92)$$

y si la expansión de $1/r_{12}$ en término de los armónicos esféricos [71]

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \frac{4\pi}{2k+1} \sum_{\mu=-k}^k Y_{k\mu}^*(\Omega_1) Y_{k\mu}(\Omega_2) \quad (93)$$

es introducida en (92) se obtiene

$$\langle 2s2s | \frac{1}{r_{12}} | 1s \varepsilon_l \rangle = \sum_{k,\mu} \frac{4\pi}{2k+1} \iint dV_1 dV_2 \psi_{2s}(\vec{r}_1) \psi_{2s}(\vec{r}_2) \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} Y_{k\mu}^*(\Omega_1) Y_{k\mu}(\Omega_2) \psi_{1s}(\vec{r}_1) \psi_{\varepsilon l m_l}(\vec{r}_2) \quad (99)$$

que solo es diferente de cero si $k = \mu = l = 0$. De manera que los fotoelectrones deben salir en ondas tipo “s”. Si lo anterior ocurre entonces $\sigma_{2pkd} = 0$ y entonces esperaríamos encontrar una distribución isotrópica de fotoelectrones ($\beta = 0$). Experimentalmente encontramos que en el máximo de la resonancia la distribución angular de los fotoelectrones está cerca de ser isotrópica pero no es cero. De donde podemos concluir que nuestras consideraciones no son del todo válidas y que sí hay contribución del canal de salida en ondas “d” (σ_{2pkd}).

9. CONCLUSIONES

A lo largo de este trabajo se proporcionaron los fundamentos teóricos y una descripción de la técnica necesaria para comprender los experimentos realizados en Berilio atómico.

Los experimentos realizados se basaron en la técnica ESSR (Electrón Spectrometry using Synchrotron Radiation). En esta técnica se emplea radiación sincrotrónica en la región del VUV-Rayos X blandos para fotoionizar sistemas cuánticos y después contar los fotoelectrones emergentes. Los fotones necesarios para conducir los experimentos fueron producidos por un imán de doblado o por un ondulator dentro del anillo de almacenamiento Aladdin del SRC de la universidad de Wisconsin. El modo de operar del anillo de almacenamiento y las características de los fotones producidos por los dos mecanismos (imán de doblado y ondulator) fueron dados. Vimos que la radiación producida por ambos mecanismos tiene en común un alto flujo, un estrecho ancho de línea, el ser linealmente polarizada, continua y sintonizable. Vimos también que el vacío es fundamental para la producción de radiación y para la conducción de los experimentos. La óptica nos permitió extraer radiación útil hacia nuestro espectrómetro. Las características, funcionamiento y una comparación entre las dos líneas empleadas (SS-Seya-Namioka y PGMA) fueron dadas. Encontramos que en cuanto al flujo de fotones, al intervalo de energía de fotones cubierto, a la resolución y la polarización, la línea PGMA supera a la línea SS-Seya-Namioka. Ya en la descripción de nuestro espectrómetro vimos que la producción de la nube de átomos se lograba calentando resistivamente ($T \approx 1200^\circ\text{C}$) un horno (interno o externo) que en su interior contenía al Berilio sólido y que podía funcionar como fuente de átomos únicamente (horno externo) o también como fuente de fotoelectrones (horno interno). Como el sistema de detección de nuestro espectrómetro está basado en los analizadores electrostáticos y los chaneltrones, vimos con cierto detalle tanto el principio de operación como las conexiones pertinentes para su funcionamiento. Después de que revisamos los tipos de espectros que podíamos adquirir y la información que nos dan cada uno (espectros PES y CIS) pasamos a la parte de las calibraciones. Estas son importantes para obtener mediciones confiables. Así hablamos del alineamiento y de las calibraciones del volumen de la fuente de fotoelectrones, de la polarización y de la energía de los fotones. Ya con toda la información sobre los fundamentos teóricos y la descripción de la técnica pasamos a la sección de los experimentos realizados.

Se hicieron dos experimentos en Be atómico, en el primero se midió la sección eficaz parcial de fotoionización para el canal 2s (ecuación 60) y en el segundo se midió el decaimiento de las resonancias 1s-np ($n = 2-6$) (ecuación 63).

En lo referente al primer experimento (ecuación 60), con los datos experimentales que obtuvimos hicimos una comparación con un cálculo hecho por Kim y colaboradores [5]. Nuestros datos experimentales fueron adquiridos en la línea Seya y en la PGMA. Para poder comparar los espectros obtenidos y el cálculo fue necesario convolucionar los datos de la teoría (Figura 45 panel superior y 46), y los del ondulator (Figura 46 panel inferior) al paso de banda del monocromador de la línea Seya; así como también los datos de la teoría al paso de banda del monocromador de la línea PGM A (Figura 45 panel inferior). En todas las convoluciones se utilizó una ventana triangular. Los detalles de la convolución fueron dados previamente.

Un resultado importante que se puede ver en el panel inferior de la Figura 45 es que la teoría predice que la interacción entre las resonancias 3s5p y 3p4s hace que se acerquen entre sí; sin embargo en el experimento encontramos que de hecho se repelen.

En la Figura 46 encontramos otros datos interesantes, el primero es que la teoría predice que la resonancia 3p4d tiene q de Fano igual a cero y en el experimento encontramos

que tiene una q positiva además que es más ancha que lo predicho por la teoría. Por otro lado la resonancia vecina $3p5s$ experimentalmente es más delgada que lo predicho por la teoría.

A nivel instrumental podemos apreciar tras ver los anchos de las resonancias en los espectros, y en particular para el panel inferior de la Figura 45, que la resolución de la línea PGMA es bastante mayor que la de la línea Seya y que la resolución estimada corresponde a lo que se observa en el experimento.

Como resultado de la comparación encontramos que aunque nosotros solo medimos el canal $2s$ y el cálculo [5] es sobre la sección eficaz total en general existe un buen acuerdo en cuanto al perfil, la posición y la intensidad de las líneas.

El segundo experimento (ecuación 63) se condujo en la línea PGMA (ondulador). En este se midió el comportamiento dinámico de β para el decaimiento de las resonancias $1s-np$ ($n=2-9$) al variar la energía de los fotones.

Encontramos que la β de las resonancias (en los canales) $2p$ ($2p'$), $3p$ ($3p'$ y $4p'$), $4p$ ($4p'$, $5p'$ y $6p'$), $5p$ ($4p'$, $5p'$ y $6p'$) y $6p$ ($4p'$, $5p'$ y $6p'$) está cerca de ser isotrópica con un ligero valor negativo (emisión preferente a 90°) en su máximo; al alejarnos del máximo encontramos que el valor negativo de β se acentúa tendiendo a menos uno. Interesantemente la β de la resonancia $1s-2p$ en el canal $2p'$ que también es ligeramente negativa en su máximo no se vuelve mas negativa al alejarnos de la resonancia, sino que se mantiene relativamente constante. La única β positiva que encontramos fue para el canal $3p'$ de la resonancia $1s-2p$, la cual al alejarnos del máximo también se volvió mas negativa llegando hasta -0.9 .

En relación a las secciones eficaces obtenidas para los canales de salida de las resonancias estudiadas encontramos que la resonancia $1s-2p$ prefiere decaer por un proceso tipo espectador (canal $2p'$). La resonancia $1s-3p$ prefiere decaer por un proceso tipo shake-up (canal $4p'$) al igual que la resonancia $1s-4p$ que decae preferentemente por el canal $5p'$, seguido en probabilidad por el canal $4p'$ (espectador) y finalmente por el $6p'$ (shake-up).

Adicionalmente estimamos el umbral de fotoionización del electrón $1s$ de Berilio atómico en 123.678 ± 0.008 eV. La estimación se hizo a partir de la serie de resonancias np convergentes al umbral $1s$ del espectro en el panel inferior de la Figura 51. Los detalles fueron dados en la sección de resultados.

Para interpretar los resultados experimentales relativos al parámetro de distribución angular de los fotoelectrones producidos por el decaimiento de las resonancias $1s-np$ ($n = 2-9$), hicimos una descripción de los procesos involucrados con un modelo sencillo. En este se supuso que los fotoelectrones son producto de la fotoionización directa (ecuación 69) sin pasar por las resonancias (ecuación 70). Los canales de salida considerados fueron los que los balances conocidos (energía, momento angular y paridad) en la aproximación dipolar eléctrica nos permiten. Con las aproximaciones anteriores obtuvimos información (vía la matriz de densidad reducida) sobre la distribución angular de los fotoelectrones. Posteriormente nos valimos de la teoría de Fano [16-17,35] sobre la interacción de estados discretos en el continuo y la llamada aproximación repentina (capítulo 1). Nuestro modelo predijo que los fotoelectrones producidos durante el decaimiento de las resonancias serían emitidos en ondas tipo “s”. Si lo anterior ocurría entonces $\sigma_{2pkd} = 0$ y entonces esperaríamos encontrar una distribución isotrópica de fotoelectrones ($\beta = 0$). Experimentalmente encontramos que en el máximo de la resonancia la distribución angular de los fotoelectrones está cerca de ser isotrópica pero no es cero. De donde podemos concluir que nuestras consideraciones no son del todo válidas y que si hay contribución del canal de salida en ondas “d” (σ_{2pkd}).

BIBLIOGRAFÍA:

- [1] M.O. Krause, C.D. Caldwell, *Phys. Rev Lett.* **59**, 2736 (1987).
- [2] H. P. Kelly, *Phys. Rev. A* **9**, 1582 (1974).
- [3] C.F. Bunge, *Phys Rev A* **14**, 1965 (1976);
C.F. Bunge, *At. Data Nucl. Data Tables*, **18**, 299 (1976);
C.F. Bunge, *Chem Phys. Lett.* **42**, 141 (1976).
- [4] V. Radojevic and W. R. Johnson, *Phys. Rev A* **31**, 2991 (1985).
- [5] D.S. Kim, S.S. Tayal, H.-L. Zhou, and S.T. Manson, *Phys. Rev A* **61**, 062701 (2000).
- [6] G. Mehlman and J.M. Esteva, *Astrophys. J.* **188**, 191 (1974).
- [7] E. Jannitti, P. Nicolosi and G. Tondello, *Phys Scr.* **36**, 93 (1987).
E. Jannitti, P. Nicolosi and G. Tondello. *Yongzhen and M. Mazzoni, Opt. Commun.* **63**, 37 (1987).
- [8] M. Rodbro, R. Bruch and P. Bisgaard, *J Phys B* **12**, 2413 (1979).
- [9] R. Wehlitz, D. Lukic, and J.B. Bluett, *Phys. Rev. A* **68**, 052708 (2003).
- [10] R. Wehlitz and S. B. Whitfield, *J Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34**, L710-L725 (2001).
- [11] D. Lukic, J.B. Bluett and R. Wehlitz, *Phys. Rev. Lett* **93**, 023003-1 (2004).
- [12] R. Wehlitz, D. Lukic and J.B. Bluett, *Phys. Rev. A* **71**, 012707 (2005).
- [13] M. García-Muñoz, G.M. Mason and J.A. Simpson, *Astrophys. J.* **217**, 859 (1977).
S.M. Kahn, and P. Jakobsen, *Astrophys. J.* **329**, 406 (1988).
- [14] B.H. Bransden y C.J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, 2ª Ed, Prentice Hall, Malasia (2003).
- [15] Madden R. P. y Codling K., *Phys. Rev. Lett.* **10**, 516 (1963)
- [16] U. Fano, *Phys Rev* **124**, 1866 (1961).
- [17] A. F. Starace, *Phys. Rev. A* **16**, 231 (1977).
- [18] M.O. Krause, T.A. Carlson and A. Fahlman, *Phys. Rev. A* **30**, 1316 (1984).
- [19] C.D. Caldwell , M.G. Flemming, M.O. Krause, P.V.D. Meulen, C. Pan and A.F. Starace, *Phys. Rev. A* **41**, 542 (1990).
- [20] J. Jiménez-Mier, S. Schaphorst, C.D. Caldwell y M. O. Krause, *J Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **32**, 4301 (1999).
- [21] J. Jiménez-Mier, S.B. Whitfield, R. Wehlitz and H. Diaz-Jiménez, *J Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34**, L693 (2001).
- [22] J. Jiménez-Mier, *México Nuclear* **2**, 29 (2001).
- [23] M.O. Krause, en "Electron Spectrometry of Atoms and Molecules" de Synchrotron Radiation Research, editado por H. Winick y S. Doniach, Plenum Publishing Corporation, (1980).
- [24] J.J Yeh, *Atomic calculations of Photoionization Cross Section and Asymmetry Parameters*, Gordon and Breach Science Publishers, AT&T (1993).
- [25] U. Becker y D. A. Shirley en *Partial Cross Sections and Angular Distributions de VUV and Soft X Ray Photoionization*, pags. 135 a 180, Editado por U. Becker y D.A. Shirley, Plenum press, New York 1996.
- [26] Cooper J. W., *Phys. Rev.* **128**, 681 (1962).
- [27] Manson S T, Cooper J W, *Phys. Rev.* **165**, 126 (1968).
- [28] M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, S. T. Manson, A. M. Mezane, and V. Radojević, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 093002, (2002).
- [29] H. P. Kelly, *Phys Rev* **136B**, 896 (1964).
- [30] H. P. Kelly, *Phys. Rev. A* **36**, 5143 (1987).
- [31] W.R. Johnson and C.D. Lin, *Phys. Rev. A* **20**, 964 (1979).

- [32] J. Cooper and R.N. Zare, *J. Chem. Phys.* **48**, 942 (1968) y errata en *J. Chem. Phys.* **49**, (1968).
- [33] S.T Manson A.F. Starace, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 389 (1982).
- [34] M.O Krause, T.A. Carlson and A. Fahlman, *Phys. Rev. A* **30**, 1316 (1984).
- [35] R. D.Cowan, *The theory of Atomic Structure and Spectra*, 1a Ed, University of California Press, EEUU (1981).
- [36] T.A. Carlson y M.O.Krause, *Phys. Rev.* **140**, A1057 (1965).
- [37] T. Åberg, *Phys. Rev.* **156**, 35 (1967).
- [38] S. T. Manson, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **9**, 21 (1976).
- [39] M. O. Krause, T. A. Carlson, R. D. Dismukes, *Phys. Rev.* **170**, 37 (1968).
- [40] S. B. Whitfield, J. Tulkki, T. Åberg, *Phys. Rev. A* **44**, R6983 (1991).
- [41] T. Pattard, T. Schneider y J. M. Rost, *J. Phys. B: At. Mol.Opt. Phys.* **36**, L189 (2003).
- [42] U. Becker, R. Hözels, H.G. Kerkhoff, B. Langer, D. Szostak, R. Wehlitz, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1120 (1986).
- [43] F. R. Elder , A.M. Gurewitsch, R.V. Langmuir, y H. C. Pollock , *Phys. Rev.* **71**, 829 (1947).
- [44] J.Schwinger, *Phys. Rev.* **70**, 798 (1946); *ibid* **75**, 1912 (1949).
- [45] A. A Sokolov and I. M. Ternov, 1963, *Dokl. Akad. Nauk. SSSR* **153**, 1052; [*Sov. Phys.-Dokl.* **8**, 1203 (1964)].
- [46] A. A. Sokolov, I. M. Ternov, *Russian Physics Journal* **10**, 39 (1967).
- [47] D.H.Tomboulia n and P.L. Hartman, *Phys. Rev.* **102**, 1423 (1956).
- [48] G.Margaritondo, *Introduction to Synchrotron Radiation*, 1a Ed, Oxford University Press, EEUU (1988).
- [49] *An invitation to see the light*, Manual para usuarios editado por el SRC, Universidad de Wisconsin, EEUU.
- [50] G.S. Smith, *An Introduction to Classical Electromagnetic Radiation*, 1a Ed, Cambridge University Press, p396, (1997).
- [51] S.L Hulbert and G.P. Williams de *Synchrotron Radiation Sources en Vacuum Ultraviolet Spectroscopy Vol I*, de la Serie *Experimental Methods in the Physical Sciences*, Vol 31, pags. 1 a 25, Editado por A. Samson y D.L. Ederer, Academic Press, EEUU (1998).
- [52] D. T. Attwood, *Soft x-rays and extreme ultraviolet radiation: principles and Applications*, Cambridge University Press, EEUU (1999).
- [53] K.J. Kim, en *Synchrotron Radiation de X-Ray Data Booklet*, compilado y editado por A.C. Thompson y D. Vaughan, 2ª Edición, Lawrence Berkeley National Laboratory, (2001).
- [54] G.R. Fowles, *Introduction to Modern Optics*, 1a Ed, Holt, Rinehart and Winston, EEUU (1968).
- [55] R. Reininger, S.L. Crossley, M.A. Lagergren, M.C. Severson, R.W.C. Hansen, *Nucl. Instr. And Meth. In Phys. Res. A* **347**, 304 (1994).
- [56] M. Seya, *Sci. Light* **2**, 8 (1952).
- [57] T. Namioka, *Sci. Light* **3**, 15, (1954).
T. Namioka, *J. Opt. Soc. Am.* **49**, 951, (1959).
- [58] M. Koike, de *Normal Incidence Monochromators and Spectrometers en Synchrotron Radiation Sources en Vacuum Ultraviolet Spectroscopy Vol II*, de la Serie *Experimental Methods in the Physical Sciences*, Vol 31, pags. 1 a 19, Editado por A. Samson y D.L. Ederer, Academic Press, EEUU (1998).
- [59] *Manual de Vacuum Technology Seminar de VARIAN*.
- [60] A. Roth, *Vacuum Technology*, 3a Ed, Amsterdam: North-Holland (1990).

- [61] U. Becker, *Vacuum* **38**, 597 (1988).
- [62] S.B. Whitfield, R. Wehlitz, M. Martins, *Rad. Phys. And Chem.* **70**, 3 (2004).
- [63] M. Martins comunicacion privada.
- [64] J. Moore, A. Davis, M. Copian, *Building Scientific Aparatus, A Practical Guide to Design and Construction*, pag. 225, 2^a Ed, Perseus Books Publishing LLC, EEUU, 1991.
- [65] <http://www.burle.com>
- [66] M. O. Krause, C. D. Caldwell, A. Menzel, S. Benzaid and J. Jiménez-Mier, *J.of Elec. Spectr. and Rel. Phen.* **79**, 241 (1996).
- [67] S. B. Whitfield comunicaci3n privada.
- [68] C. Moore, *Atomic Energy Levels, Vol II*, NSRDS-NBS 35, US Department of Commerce. Wasshington, (1949).
- [69] A. N. Nesmeianov, *Vapor Pressure of the Chemical Elements*, 1a Ed, R. Gary Editor, Elsevier, Amsterdam Holanda (1963).
- [70] C. Cohen-Tannaudji, B. Diu, F. Laloe, *Quantum mechanics tr. from the french by S. Hemley, N. Ostrowsky, D Ostrowsky*, Wiley-Interscience Publication, New York, EEUU.
- [71] I. Lindgren y J. Morrison, *Atomic Many Body Theory*, from Springer Series in Chemical Physics 13, 1a edici3n, editor J.P. Toennies, editorial Springer-Verlag Berlin Heideberg New York, 1982.
- [72] U. Fano y A.R.P. Rau, *Atomic Collisions and Spectra*, 1a edici3n, Academic Press Inc, EEUU, 1986.
- [73] F Yoshida., L Matsuoka. H. Osaka, S. Kikawa, Y. Fukushima, T. Nagata, Y. Azuma, S. Obara and S. Hasegawa, *Phys. Rev. A* **73**, 042709 (2006).