



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCALAMIENTOS UNIVERSALES PARA
SECCIONES EFICACES DE PRODUCCIÓN
DE RAYOS X POR IMPACTO DE IONES DE
 ^{12}C

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

Josué Ruíz Martínez

TUTOR

Javier Miranda Martín del Campo



Cd. Mx. 2023



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.

Datos del jurado

1.- Datos del alumno

Ruíz
Martínez
Josué
55 38 07 66 78
Universidad Nacional Autónoma
de México
Facultad de Ciencias
Física
306039511

2.- Datos del tutor

Dr.
Javier
Miranda
Martín del Campo

3.- Datos sinodal 1

Dra.
Rosario
Paredes
Gutiérrez

4.- Datos sinodal 2

Dra.
María Isabel
Gamboa
De Buen

5.- Datos sinodal 3

Dr.
Oscar Genaro
De Lucio
Morales

6.- Datos sinodal 4

Mtra.
Lourdes Verónica
Mejía
Ponce

7.- Datos del trabajo escrito

Título: Escalamientos universales para
secciones eficaces de producción
de rayos X por impacto de iones de ^{12}C .
IFUNAM.

No. de páginas: 49

Año: 2023

A mi familia.

A mi asesor, el Dr. Javier Miranda

Agradecimientos

A mi asesor, el Dr. Javier Miranda Martín del Campo, por todo su apoyo, por creer en mí y por su dirección en este trabajo.

A mis sinodales:

Dra. Rosario Paredes Gutiérrez
Dra. María Isabel Gamboa de Buen
Dr. Oscar Genaro de Lucio Morales
Mtra. Lourdes Verónica Mejía Ponce

por la revisión de este trabajo y las observaciones que hicieron para el mejoramiento del mismo.

A todos mis profesores y maestros que me han brindado el aprendizaje y el conocimiento que conforma mi pensamiento.

Índice general

Índice general	5
Índice de figuras	6
Índice de cuadros	8
1. Introducción	10
1.1. Ionización y emisión de rayos X	10
1.2. Transiciones	11
1.3. Modelos teóricos	13
1.4. Objetivos	14
2. Sección eficaz de producción de rayos X	15
2.1. Modelo PWBA	16
2.2. Modelo ECPSSR	20
2.2.1. Efectos de ligadura y polarización	20
2.2.2. Efecto de desviación Coulombiana	21
2.2.3. Efecto electrónico relativista	22
2.2.4. Efecto de pérdida de energía	23
3. Procedimientos para el estudio	25
3.1. Compilación de datos	25
3.2. Escalamiento basado en el coeficiente de velocidad ξ_L^R	27
3.3. Escalamiento basado en el coeficiente de velocidad v_1/v_{2L}	28
3.4. Métodos estadísticos	32
4. Resultados	33
4.1. Escalamiento por estado de carga	39
4.2. Comparación de los modelos PWBA y ECPSSR con los resultados experimentales	40
4.3. Discusión	43
5. Conclusiones	45
Bibliografía	47

Índice de figuras

1.1. Diagrama de los niveles de energía de las transiciones electrónicas (Autoría propia).	12
3.1. Propuesta de escalamiento dividiendo la sección entre el cuadrado del número atómico del proyectil (Sarkadi y Mukoyama, 1991).	29
3.2. Compilación de SEPRX L_α en función del coeficiente de velocidad reducida ξ_L^R . Miranda demuestra que el escalamiento al ser dividido entre Z_1^2 no funciona correctamente. Adaptado de (Miranda, 2019). . .	30
3.3. Proporción de las SEPRX para $Z = 29$ y 35 en función de v_1/v_{2L} . Adaptado de (Lapicki y Miranda, 2018 a).	31
4.1. Relación de la sección eficaz de producción de rayos X L total inducida con ^{12}C con el coeficiente de velocidad reducida v_1/v_{2L} . La curva es un polinomio de grado 5 obtenidas con el software "OriginPro 2022".	35
4.2. Relación de la sección eficaz de producción de rayos X L total inducida con ^{12}C con el coeficiente de velocidad reducida ξ_L^R . La curva es un polinomio de grado 5 obtenidas con el software "OriginPro 2022". . .	35
4.3. Relación del residuo entre datos experimentales y el ajuste polinomial de la sección eficaz de producción de rayos X L_{total} inducidas con ^{12}C con los coeficientes de velocidad reducida ξ_L^R y v_1/v_{2L} obtenidas con el software "OriginPro 2022".	36
4.4. Prueba T de los residuos (v_1/v_{2L} arriba, ξ_L^R abajo) dependientes de las SEPRX L_{total} obtenidas con el software "Stata 15".	36
4.5. Relación de la sección eficaz de producción de rayos X L_α inducida con ^{12}C con el coeficiente de velocidad reducida v_1/v_{2L} . La curva es un polinomio de grado 6 obtenidas con el software "OriginPro 2022".	37
4.6. Relación de la sección eficaz de producción de rayos X L_α inducida con ^{12}C con el coeficiente de velocidad reducida ξ_L^R . La curva es un polinomio de grado 6 obtenidas con el software "OriginPro 2022". . .	37
4.7. Relación del residuo entre datos experimentales y el ajuste polinomial de la sección eficaz de producción de rayos X L_α inducidas con ^{12}C con los coeficientes de velocidad reducida ξ_L^R y v_1/v_{2L} obtenidas con el software "OriginPro 2022".	38

4.8. Prueba T de los residuos (v_1/v_{2L} arriba, ξ_l^R abajo) dependientes de las SEPRX L_α obtenidas con el software "Stata 15".	38
4.9. Relación de la sección eficaz de producción de rayos X L total con el coeficiente de velocidad reducida con identificación del respectivo estado de carga obtenidas con el software "OriginPro 2022".	39
4.10. Relación de la sección eficaz de producción de rayos X L total con el coeficiente de velocidad reducida entre el cuadrado del estado de carga con identificación del respectivo estado de carga de los iones incidentes obtenidas con el software "OriginPro 2022".	40
4.11. Relación del cociente entre de la SEPRX L_α experimental y la SEPRX L_α teórica correspondiente (PWBA y ECPSSR) con el coeficiente de velocidad reducida obtenidas con el software "OriginPro 2022".	41
4.12. Prueba T de los modelos ECPSSR y PWBA dependientes de las SEPRX L_α obtenidas con el software "Stata 15".	41
4.13. Relación del cociente entre la SEPRX L_α experimental y la SEPRX L_{total} teórica correspondiente (PWBA y ECPSSR) con el coeficiente de velocidad reducida obtenidas con el software "OriginPro 2022".	42
4.14. Prueba T de los modelos ECPSSR y PWBA dependientes de las SEPRX L_{total} obtenidas con el software "Stata 15".	42

Índice de cuadros

3.1. Especificaciones de los métodos experimentales de las SEPRX recopiladas de diferentes autores.	26
4.1. Resultados de la prueba T de los residuos dependientes de las SEPRX L_{α}	34
4.2. Resultados de la prueba T de los residuos dependientes de las SEPRX L_{total}	34
4.3. Resultados de la prueba T de los modelos ECPSSR y PWBA de las SEPRX L_{α}	43
4.4. Resultados de la prueba T de los modelos ECPSSR y PWBA de las SEPRX L_{total}	43

Resumen

En este trabajo se presenta la comparación de dos modelos de escalamiento universal con dos coeficientes diferentes de velocidad reducida, ξ_L^R y v_1/v_{2L} para mostrar cual de los dos presenta mejores predicciones en comparación con los datos experimentales. Se realizó una compilación de datos experimentales de la sección eficaz de producción de rayos X (SEPRX) de la capa L_{total} ($\sigma_{L_{total}}$) y de la subcapa L_α (σ_{L_α}), producidos en la ionización inducida por la colisión de iones de ^{12}C con diferentes estados de carga sobre diversos átomos blanco. Se buscó una función que pudiera describir el comportamiento de la SEPRX, encontrando ajustes polinomiales de 5to. orden para las σ_{L_T} y de 6to. orden para las σ_{L_α} . Posteriormente se calculó el residuo del ajuste y se aplicó la prueba estadística T de Student, que es una prueba paramétrica que se emplea para determinar la significatividad de la diferencia entre las medias de dos muestras independientes, cuando estas no son amplias (Palacios et. al, 2022), con el fin de mostrar cuál de los métodos presenta mejores aproximaciones. El escalamiento con coeficiente de velocidad reducida ξ_L^R resultó tener mejores predicciones con respecto a los valores experimentales.

Por otra parte se busca una mejora o un escalamiento nuevo de las SEPRX a partir del estado de carga de los iones incidentes. Los resultados no muestran algún indicio de que esto suceda por lo que se desecha esta posibilidad.

Finalmente se comparan los valores de las SEPRX L_α y L_{total} modelos teóricos PWBA y ECPSSR tomando como referencia el escalamiento de las SEPRX L_α experimentales. Resultando que en general el modelo PWBA predice valores más altos que los valores experimentales mientras que el modelo ECPSSR predice valores más bajos en comparación de los valores experimentales.

Capítulo 1

Introducción

La ionización de las capas internas de los átomos inducida por el impacto de partículas cargadas se ha estudiado exhaustivamente, tanto teórica como experimentalmente a lo largo de las últimas décadas (De Lucio, 2000). Este estudio data desde el descubrimiento de los rayos X por Röntgen (1895). A partir de ahí se ha logrado obtener una descripción entendible para las ionizaciones de la capa K, mientras que para las capas L y M el estudio se vuelve más complejo al estar compuestas de diferentes subcapas lo que dificulta el estudio de los mecanismos de ionización.

Los experimentos de medición de la sección eficaz de producción de rayos X (SEPRX) son muy útiles para conocer la física de las capas internas del átomo.

La ionización se presenta con la interacción entre un ion y un átomo blanco por medio de una colisión de tal manera que resulta en uno o más electrones expulsados del átomo blanco. Después del proceso de la ionización se presenta el fenómeno de la emisión de rayos X como se mostrará a continuación.

1.1. Ionización y emisión de rayos X

La técnica de emisión de rayos X inducida por partículas (PIXE, *particle induced x-ray emission*) es una de las más utilizadas para estudiar la emisión de rayos X. En dicha técnica se irradia la muestra con partículas cargadas que son aceleradas a energías de megaelectronvolts (MeV) atravesando el blanco para causar una excitación en los electrones provocando que pasen de un nivel de energía a otro, dependiendo de la energía cedida al electrón, la excitación de electrones puede llegar a expulsar uno o más electrones del átomo blanco dando como resultado un ion, dejando vacantes o huecos en las capas internas del átomo. El número de electrones expulsados del átomo determinará el estado de carga del ion. Enseguida a la ionización se lleva a cabo la desexcitación, donde los electrones de las capas superiores liberan energía para llegar a ocupar las vacantes liberando el exceso de energía como un fotón de rayos X.

PIXE es una técnica de análisis de haz de iones no destructiva que se utiliza para obtener información cuantitativa de la composición elemental de la región cercana a la superficie de una muestra o un material. PIXE no proporciona información de los elementos con bajo número atómico como C, N, H y O, que ocupan, por ejemplo, más del 80% de los aerosoles atmosféricos. La sensibilidad de PIXE depende fuertemente de la sección eficaz de ionización de las capas internas del átomo blanco, que es proporcional al cuadrado de la carga del proyectil a velocidades iguales, por lo que es conveniente realizar un análisis haciendo uso de iones pesados.

La sección eficaz de ionización inducida por iones pesados es mayor que las secciones eficaces para la producción de vacantes en la capa más interna, inducida por cargas rápidas y sin estructura, como protones y electrones. La ionización de las capas internas es de gran importancia en el desarrollo de diferentes aplicaciones, como la implantación de iones, cálculo de poderes de frenado, estudios de sólidos y plasmas y la emisión de rayos X inducida por partículas. Con esta técnica, también se busca entender el mecanismo de la aparición de vacantes producidas por la colisión de iones pesados comparando los resultados con las teorías de aproximación de onda plana de Born (PWBA) y el cálculo de pérdida de energía (E), correcciones Coulombianas (C), correcciones de estado estacionario perturbado (PSS) y correcciones relativistas (R), en conjunto (ECPSSR).

1.2. Transiciones

Las subcapas electrónicas, se etiquetan con base en la notación de Siegbahn. Para la capa K no hay subcapas, mientras que en la capa L al tener tres subcapas, les corresponden las etiquetas L_i ($i=1-3$), la capa M tiene 5 subcapas, con etiquetas M_i ($i=1-5$) y la capa N tiene siete subcapas con etiquetas N_i ($i=1-7$). Dichas etiquetas se utilizan para denotar las líneas de rayos X que caracterizan a las transiciones electrónicas que las producen. Las líneas de rayos X se nombran de acuerdo a la capa de la cual se expulsa el electrón (Figura 1.1).

Los niveles de energía de los electrones en el átomo determinan el espectro de rayos X. A los rayos X emitidos cuando se rellenan las vacantes de la capa K, se les conoce como rayos X K. Si el electrón proviene de la capa L, se denota como K_α y si proviene de la capa M, se denota como K_β . Al tener una estructura fina (estructura de los niveles de energía considerando los efectos relativistas y de espín), las líneas K_α y K_β son dobletes. Los rayos X emitidos cuando se rellenan las vacantes de la capa L son conocidos como rayos X L, los cuales tienen muchos componentes como L_α , L_β , L_γ entre otros, en especial para elementos pesados.

Los estudios que se han realizado con PIXE, técnica de análisis multielemental, se enfocan por lo general en la ionización de las capas electrónicas K y L inducida por protones, deuterones o partículas α .

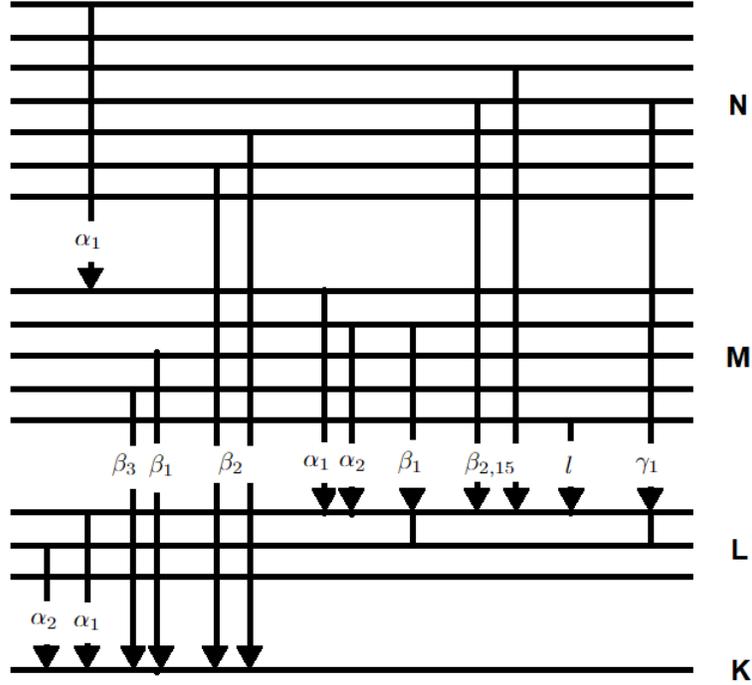


Figura 1.1: Diagrama de los niveles de energía de las transiciones electrónicas (Autoría propia).

Una de las magnitudes más importantes de PIXE es la sección eficaz de producción de rayos X que es la probabilidad de producir fotones de rayos X de una cierta línea. La SEPRX se puede calcular utilizando los parámetros físicos fundamentales de la sección eficaz de ionización los cuales son: la tasa de emisión de rayos X, la producción de fluorescencia y las transiciones Coster-Kronig (CK) (la vacante es llenada por un electrón de la misma capa pero de una subcapa con nivel de energía más alto) que ocurren en la ionización de la capas internas atómicas inducida por partículas cargadas. Para la líneas K se relaciona con la sección eficaz de ionización (probabilidad de ionizar el átomo) de la siguiente forma:

$$\sigma_{X,i} = \sigma_{I,K} \omega_K F_i, \quad (1.1)$$

donde $\sigma_{X,i}$ es la SEPRX, $\sigma_{I,K}$ es la sección eficaz de ionización, ω_K es la fluorescencia y F_i es la intensidad relativa de todas las posibles transiciones que producen la radiación en la línea i . En el capítulo 2 se describen las SEPRX.

Este trabajo se enfoca en la observación de los escalamientos de energía de las SEPRX de la capa L y de la subcapa L_{α} , que se denotan como σ_{Ltotal} y $\sigma_{L\alpha}$ respec-

tivamente, donde σ_{Ltotal} es la suma de todas las SEPRX de las subcapas del nivel de energía L y se comparan los resultados experimentales de las SEPRX con los modelos teóricos, lo que nos permite observar cuál de los modelos predice valores más cercanos a los valores experimentales.

1.3. Modelos teóricos

Los primeros cálculos teóricos para las secciones de ionización Coulombiana se hicieron con la aproximación del encuentro binario (BEA, *binary-encounter approximation*), la aproximación semiclásica (SCA, *semiclassical approximation*) y el modelo PWBA.

En la teoría BEA (García, 1970) se considera a la interacción del proyectil y el electrón blanco que se ioniza como una colisión clásica. Este modelo proporciona una descripción cualitativa de los datos experimentales, pero para las comparaciones cuantitativas resulta ser insuficiente.

El modelo SCA propuesto por Bang y Hansteen (De Lucio, 2000) supone que el proyectil se mueve a lo largo de una trayectoria clásica, mientras que la transición del electrón se describe como un fenómeno mecánico-cuántico cuyos cálculos son muy complejos y no se utilizarán en este trabajo.

La teoría PWBA realizada por Merzbacher y Lewis (De Lucio, 2000) considera al proyectil y al blanco dentro del marco de la teoría cuántica. Considerando la dispersión de un proyectil incidente de velocidad v , carga Ze y masa M_1 colisionando con un átomo estacionario de masa M_2 en un estado inicial i , donde el proyectil transmite parte de su energía al átomo dejándolo en un estado final f arbitrario.

El modelo teórico que se utiliza para comparar datos experimentales es el ECPSSR de Brandt y Lapicki (2000) el cual está basado en la aproximación de onda plana de Born (PWBA) con correcciones de pérdida de energía (E), desviación Coulombiana de los iones incidente, teoría de perturbaciones de estados estacionarios (PSS) y efectos relativistas para los iones de las capas internas como se describe en De Lucio, 2000. En la colisión de iones pesados ocurren otros fenómenos como la creación de moléculas con un pequeño periodo de vida, la captura de electrones por el átomo bombardeado y múltiples ionizaciones de capas superiores del átomo blanco. Rodríguez (1994) menciona que al modelo ECPSSR se le pueden agregar mejoras, como son: el modelo de átomo separado (SA, *Separated Atom*), el modelo de átomo unido, corrección de energías de ligadura entre el electrón blanco y el proyectil, ionización múltiple de las capas externas por los proyectiles (MI, *Multiple Ionization*) (Lapicki et al., 1986) y correcciones de acoplamiento de las capas internas (IS, *Intra-Shell coupling*), en donde se considera el reparto de las vacantes entre las subcapas L provocado por las transiciones producidas por la ionización del átomo blanco debido al ion impactado (Sarkadi y Mukoyama, 1991). Por ello la ionización de una subcapa no es independiente de las otras subcapas.

Las SEPRX y las secciones eficaces de ionización, dependen de cinco variables principales: los número atómicos del proyectil y del blanco, las masas atómicas del proyectil del blanco, así como la energía de incidencia del proyectil.

Proponer un escalamiento significa buscar dos variables (una independiente y otra dependiente), que permitan obtener una curva única, para describir el comportamiento de las secciones para todas las combinaciones de proyectiles, átomos blanco y energías de incidencia. Dichas variables, conocidas como universales, permitirán “escalar” todos los valores de las secciones determinadas experimentalmente con dicha curva, con lo que se estarán reduciendo a un solo valor, agrupando los datos. Las variables universales deben de incluir todas las variables originales.

1.4. Objetivos

En este trabajo se estudia el comportamiento y la predicción de las SEPRX de las capas L_{total} y L_{α} inducidas por la colisión de iones de ^{12}C con estado de carga de 2 a 6. Utilizando blancos con números atómicos entre 29 y 83, para la aceleración de los iones de ^{12}C en el intervalo de 1.6 MeV a 54 MeV.

Se comparan dos escalamientos de la energía de incidencia de los iones a partir de variables de velocidad reducida, descritos por Miranda (2016) y por Lapicki y Miranda (2018 a). Se considera la posibilidad de escalar la sección de producción de rayos X según la predicción teórica descrita por Gorlachev (2011) en donde se busca encontrar leyes de escalamiento que dependen del número atómico puesto que Miranda (2019) demostró que esta teoría no funciona de manera adecuada. En esta tesis se considera dividir las SEPRX entre el estado de carga al cuadrado para observar si en función del coeficiente de velocidad se pueden encontrar leyes de escalamiento. Finalmente se busca la existencia de un escalamiento mejorado o nuevo considerando el estado de carga. Para ello se relacionarán los coeficientes de velocidad reducida con las SEPRX al dividirse entre el cuadrado del estado de carga para así poder encontrar alguna dependencia de un escalamiento con el estado de carga.

En este trabajo se comparan los resultados teóricos de los escalamientos propuestos mencionados por Miranda (2016) y Lapicki y Miranda (2018 a) los cuales consideran diferentes variables de velocidad reducida con los resultados experimentales compilados. Se busca cual de los dos modelos de escalamiento obtendrá mejores predicciones de un escalamiento al compararse con los resultados experimentales de las SEPRX de la capa L_{total} y L_{α} para la colisión de iones de ^{12}C con átomos blanco con número atómico $29 \leq Z \leq 83$.

También se comparan los resultados de los modelos teóricos PWBA y ECPSSR para identificar cuál de los modelos proporciona mejores predicciones de las SEPRX en comparación de los resultados experimentales.

Capítulo 2

Sección eficaz de producción de rayos X

La sección eficaz de producción de rayos X es la probabilidad de producir fotones de rayos X de una línea particular. Esta magnitud depende de varios factores como lo son el tipo de proyectil, la energía de incidencia del proyectil, el átomo blanco entre otros. Para la línea K, dicha magnitud se relaciona con la probabilidad de ionizar el átomo (sección eficaz de ionización) mediante la relación de la ecuación 1.1.

La producción de fluorescencia ω es el cociente del número total de fotones de rayos X emitidos entre el número total de vacantes. Para la capa L y capas superiores, además de las transiciones radiativas de electrones que provienen de las capas superiores, se pueden presentar transiciones no radiativas en las subcapas L_1 , L_2 , y L_3 . Así que, al crearse una vacante en la subcapa L_1 , esta se puede llenar con un electrón de la subcapa L_2 , dejando a su vez una vacante que se ocupa por un electrón de la subcapa L_3 dejando solo una vacante en esta subcapa. A este tipo de transiciones se les conoce como Coster-Konig F_{ij} (Harada, 2002).

Las secciones de producción en las líneas L más utilizadas con PIXE son:

$$\sigma_{X,L\alpha} = (\sigma_{L_1}f_{13} + \sigma_{L_1}f_{12}f_{23} + \sigma_{L_2}f_{23} + \sigma_{L_3})\omega_3F_{3\alpha}, \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{X,L\beta} &= \sigma_{L_1}\omega_1F_{1\beta} + (\sigma_{L_1}f_{12} + \sigma_{L_2})\omega_2F_{2\beta} \\ &+ (\sigma_{L_1}f_{13} + \sigma_{L_1}f_{12}f_{23} + \sigma_{L_2}f_{23} + \sigma_{L_3})\omega_3F_{3\beta}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\sigma_{X,L\gamma} = \sigma_{L_1}\omega_1F_{1\gamma} + (\sigma_{L_1}f_{12} + \sigma_{L_2})\omega_2F_{2\gamma}, \quad (2.3)$$

$$\sigma_{X,L_i} = (\sigma_{L_1}f_{13} + \sigma_{L_1}f_{12}f_{23} + \sigma_{L_2}f_{23} + \sigma_{L_3})\omega_3F_i, \quad (2.4)$$

donde σ_{L_i} es la sección de ionización de la subcapa i ; ω_i es la fluorescencia i , f_{ij} es la probabilidad de ocurra una transición Coster-Kronig de la capa j a la capa i ; F_{nx} es la probabilidad de que ocurra una transición radiativa tomada como la fracción de rayos X originados por una vacante de la subcapa L_n y la cual contribuye a la línea L_x .

Para poder calcular la sección de producción de rayos X de las líneas L es necesario conocer el valor de las secciones de ionización para cada subcapa. Se puede definir una fluorescencia promedio y utilizar la intensidad relativa a la línea i , análogamente al caso de la capa K, de tal forma que:

$$\sigma_{X,L_i} = \sigma_{i,L} \omega_L F_i \quad (2.5)$$

En la ecuación (2.5) $\sigma_{i,L}$ es la ionización total de la capa L, ω_L es la fluorescencia promedio y F_i es la intensidad relativa cuyo valor depende de la energía de incidencia del proyectil. La energía del fotón emitido caracteriza al elemento que se utiliza como blanco. Utilizando PIXE se puede medir dicha energía y así saber qué elementos constituyen la muestra. Incluso es posible realizar análisis multielemental de diferentes muestras, como lo son muestras biomédicas, dermatológicas, neurobiológicas, fluidos biológicos, aerosoles atmosféricos, muestras geológicas, arqueológicas y análisis de materiales.

2.1. Modelo PWBA

La aproximación de onda plana de Born PWBA fue desarrollada por Merzbacher y Lewis. A partir de la teoría de perturbaciones se considera un sistema cuántico bajo la influencia de un potencial V (De Lucio, 2000).

El Hamiltoniano H del sistema es:

$$H = H_0 + V, \quad (2.6)$$

donde H_0 es el Hamiltoniano no perturbado. Desarrollando la teoría de perturbaciones a primer orden dependiente del tiempo, se expresa la probabilidad por unidad de tiempo $dP_{v_0,v}$ en el que sucede una transición del estado inicial v_0 a otro estado en el continuo entre v y $v + dv$ como:

$$dP_{v_0,v} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{v_0,v}|^2 \delta(E_v - E_{v_0}) dv, \quad (2.7)$$

con $V_{v_0,v} = \langle v|V|v_0 \rangle$ y E , corresponde a la energía de i -ésimo estado del sistema. Esta aproximación se puede aplicar al estudio de una colisión entre una partícula y un átomo, cuya partícula incide con un momento inicial \vec{p}_0 y se dispersa con un momento final \vec{p} eligiendo el sistema de referencia de centro de masa por simplicidad. Si la colisión es inelástica habrá un cambio en las energías del proyectil y del átomo. Así la energía inicial será $E_{v_0} = \frac{p_0^2}{2m} + E_0$ y la energía final será $E_v = \frac{p^2}{2m} + E_n$, donde E_0 y E_n corresponden a las energías inicial y final del átomo, con m la masa reducida del sistema, definida como $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, con lo que se obtiene:

$$dP_{\vec{p},E_n,\vec{p}_0,E_0} = \frac{4}{\hbar} |V_{\vec{p},E_n,\vec{p}_0,E_0}|^2 \delta(p^2 - p_0^2 + 2m(E_n - E_0)) dp_x dp_y dp_z, \quad (2.8)$$

donde sucede que:

$$V_{\vec{p}, E_n, \vec{p}_0, E_0} = \int \int \varphi_{\vec{p}}^*(\vec{R}) \Psi(\vec{r}) V_{\varphi, P_0}(\vec{r}) \Psi(\vec{R}) \varphi_{\vec{p}_0}(\vec{r}) d^3 r d^3 R, \quad (2.9)$$

ecuación en la que φ es la función de onda del proyectil y Ψ es la función de onda electrónica del átomo, \vec{R} es la posición del ion y \vec{r} la posición del electrón.

Para determinar la sección eficaz de dispersión $d\sigma$ del proyectil cuando el átomo pasa al estado n se expresa el diferencial de momento en coordenadas esféricas $dp_x dp_y dp_z = p^2 \sin\theta dp d\theta d\phi = p^2 dp d\Omega$ para integrar respecto al momento. Aquí θ es el ángulo de dispersión del proyectil. Se puede suponer que la forma de la función de estado inicial de la partícula incidente es la de una onda plana y que la forma de la función de onda final es la de una onda esférica, que se puede aproximar a una plana si es vista desde una distancia lejana al centro dispersor. Así, los estados inicial y final de la partícula incidente se denotan como:

$$\varphi_{\vec{p}_0} = \sqrt{\frac{m}{p_0}} e^{i\vec{p}_0 \cdot \vec{R} / \hbar}, \quad \varphi_{\vec{p}} = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\vec{p} \cdot \vec{R} / \hbar}, \quad (2.10)$$

donde $\varphi_{\vec{p}_0}$ está normalizada de forma que la densidad de flujo incidente \vec{j} sea igual a la unidad y $\varphi_{\vec{p}}$ está sujeta a la normalización de Dirac. De esta forma se tiene que $dP_{\vec{p}, E_n, \vec{p}_0, E_0} = d\sigma_n$, con lo cual la sección eficaz de dispersión se expresa como:

$$d\sigma_n = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^2} \frac{p}{p_0} \left| \int \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} V \Psi_n^* \Psi_0 d^3 r d^3 R \right|^2 d\Omega, \quad (2.11)$$

con $p^2 = p_0^2 - 2mE_n + 2mE_0$ y $\vec{q} = \frac{1}{\hbar}(\vec{p} - \vec{p}_0)$ el momento transferido.

En esta aproximación se puede considerar al proyectil como un ion de carga $Z_1 e$ y a la interacción dominante durante la colisión como la eléctrica, donde el potencial V se describe como:

$$V(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} - \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{Z_1 e^2}{|\vec{R} - \vec{r}_j|}, \quad (2.12)$$

De esta manera considerando este potencial para la sección eficaz de dispersión se obtiene:

$$d\sigma_n = \frac{Z_1^2 m^2 e^4}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{p}{p_0} \left| \sum_{j=1}^{Z_2} \int \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \Psi_n^* \Psi_0 d^3 r \right|^2 d\Omega, \quad (2.13)$$

Despreciando otro tipo de interacciones, anulando así la interacción entre el núcleo y el proyectil debido a la ortogonalidad de las funciones. Tomando en cuenta que la magnitud de \vec{q} se puede asociar con el ángulo θ como:

$$\hbar^2 q dq = p p_0 \sin\theta d\theta \quad (2.14)$$

y

$$v_1 = p_0/m, \quad (2.15)$$

al integrar con respecto a $d\phi$ se tiene la probabilidad de que el cambio de momento de la partícula incidente en la colisión y que el átomo cambie de estado como:

$$d\sigma_n = 8\pi \left(\frac{Z_1 e^2}{\hbar v_1} \right)^2 \frac{dq}{q^3} |F_{n0}(q)|^2, \quad (2.16)$$

con

$$F_{n0}(q) = \sum_{j=1}^Z \frac{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_j}{2} \Psi_n^*, \quad (2.17)$$

el factor de forma atómico inelástico para el potencial electrostático.

Para calcular la sección eficaz de ionización, se define la sección eficaz de transferencia de energía para el electrón de la subcapa s , entre ε y $d\varepsilon$, como:

$$d\sigma_n = 8\pi(2j_s + 1) \left(\frac{Z_1 e^2}{\hbar v_1} \right)^2 \frac{dq}{q^3} |F_n(q)|^2 d\varepsilon, \quad (2.18)$$

con j_s el momento angular total de la subcapa s y se toma el factor $2j_s + 1$ para tomar en cuenta la degeneración debida a los electrones de la subcapa s . La energía del electrón expulsado es entonces $\frac{p_e^2}{2m_e} + \hbar\omega_{2s}$

Para hacer el cálculo de las secciones de manera general, se definen las cantidades adimensionales W , k y Q como:

$$\begin{aligned} W &= \frac{\varepsilon}{Z_{2s}^2 R_\infty} \\ k &= \frac{a_{2s} p_e}{\hbar} \\ Q &= a_{2s}^2 q^2, \end{aligned} \quad (2.19)$$

Con $a_{2s} = \frac{n^2 \hbar \omega_{2s}}{Z_{2s} R_\infty}$ el radio hidrogenoide efectivo, Z_{2s} el número atómico efectivo y p_e el momento final del electrón expulsado.

Transformando la sección a estas nuevas variables, donde $|F_{\varepsilon s}(q)|^2 d\varepsilon = |F_{Ws}(Q)|^2 dW$, al integrar sobre todos los momentos y energías transferidas por el proyectil en la colisión, se tiene que la sección de ionización total de la subcapa s está dada por:

$$\sigma_s = (2j_s + 1) \frac{4_1^2 a_{2s}^2}{Z_{2s}^2 \eta_s} f_s, \quad (2.20)$$

donde

$$f_s = \int_{W_{min}}^{W_{max}} dW \int_{Q_{min}}^{Q_{max}} \frac{dQ}{Q^2} |F_{Ws}(Q)|^2 \quad (2.21)$$

con los límites de integración para Q como:

$$\hbar q_{min} = \sqrt{2mE_1} - \sqrt{2m(E_1 - \varepsilon)}, \quad (2.22)$$

$$\hbar q_{max} = \sqrt{2mE_1} + \sqrt{2m(E_1 - \varepsilon)}, \quad (2.23)$$

mientras que los de W se obtienen a partir de $\varepsilon_{min} = \hbar\omega_{2s}$ y $\varepsilon_{max} = E_1$ si se considera que el proyectil cede toda su energía al electrón. Así los valores mínimos y máximos para Q y W son:

$$Q_{min} = \frac{m^2}{m_e} \eta_s \left[1 - \left(1 - \frac{W m_e}{m \eta_s} \right)^{1/2} \right]^2, \quad (2.24)$$

$$Q_{max} = \frac{m^2}{m_e} \eta_s \left[1 + \left(1 - \frac{W m_e}{m \eta_s} \right)^{1/2} \right]^2, \quad (2.25)$$

$$W_{min} = \frac{\hbar\omega_{2s}}{Z_{2s}^2 R_\infty} = \frac{\theta_s}{n^2}, \quad (2.26)$$

$$W_{max} = \frac{\varepsilon_{max}}{Z_{2s}^2 R_\infty} = \frac{m}{m_e} \eta_s. \quad (2.27)$$

Para fines prácticos $W_{max} = \infty$. De esta manera la función f depende de las variables θ_s y η_s , de tal manera que la sección de ionización se puede expresar como:

$$\sigma_s = \sigma_{0s} \frac{f_s(\eta_s, \theta_s)}{\eta_s} = \sigma_{0s} F(\xi_s, \theta_s), \quad (2.28)$$

donde se define a σ_{0s} como:

$$\sigma_{0s} = 4\pi(2j_s + 1) \frac{Z_1^2 a_{2s}^2}{Z_{2s}^2}. \quad (2.29)$$

El modelo PWBA resulta adecuado para describir ionizaciones a grandes energías, pero sus predicciones son mayores que las secciones medidas a bajas energías (Madison y Merzbacher, 1975). Al no considerar la interacción entre el núcleo y el proyectil existe una desviación en los resultados experimentales, pero a velocidades altas se describe bien el proceso ya que la trayectoria del ion es prácticamente una línea recta; sin embargo a velocidades bajas existe una desviación Coulombiana en la trayectoria del proyectil que disminuye su velocidad al pasar cerca del núcleo. PWBA es válida para $Z_1 \ll Z_2$ y $v_1/v_0 \gg 1$, es decir, a altas energías (De Lucio, 2000).

2.2. Modelo ECPSSR

La teoría ECPSSR propuesta por Brandt y Lapicki (1981) realiza correcciones al modelo PWBA como se había descrito anteriormente. Estas correcciones son: efectos de ligadura y polarización, efecto de desviación Coulombiana, efecto electrónico relativista y efecto de pérdida de energía que describe De Lucio (2000), las cuales se desarrollan a continuación.

2.2.1. Efectos de ligadura y polarización

Si en la colisión ion átomo la velocidad del ion es baja, los efectos de su presencia en los electrones del átomo blanco tendrán una duración de tiempo mayor, alterando sus estados iniciales. Dada la velocidad baja se requiere de una penetración grande del ion en las capas internas del átomo blanco para poder expulsar un electrón, al encontrarse cerca el ion del átomo la energía de ligadura de los electrones es mayor, lo que resulta en una disminución de la sección de ionización. Este efecto se toma en cuenta para las capas K y L , haciendo uso de la aproximación de estados estacionarios perturbados (PSS), donde el factor de corrección de ligadura es:

$$\epsilon_s^B = 1 + \frac{\langle \Delta E_s \rangle}{\hbar \omega_{2s}}, \quad (2.30)$$

con $\langle \Delta E_s \rangle$ el cambio promedio de la energía de la subcapa s durante la colisión, para el cual se debe de considerar la energía de ligadura del electrón ΔE_s debido al ion incidente con parámetro de impacto b . Dicho cambio se determina utilizando la teoría de perturbaciones de primer orden:

$$\Delta E_s(R) = \int \Psi_s^*(\vec{r}) \frac{Z_1 e^2}{|\vec{R}(t) - \vec{r}|} \Psi_s(\vec{r}) d^3 r \quad (2.31)$$

donde $\vec{R}(t)$ es el vector de posición del ion y $\Psi(\vec{R})$ es la función de onda no perturbada del electrón de la capa s . El valor de $\langle \Delta E_s \rangle$ se determina con el procedimiento de Rodriguez (1994). En el trabajo de Rodriguez se describe el factor de corrección por ligadura de la siguiente forma:

$$\epsilon_n^B = 1 + \frac{2Z_1}{\theta_s Z_{2s}} g_s(\xi_s) \quad (2.32)$$

donde $g_s(\xi_s)$ son funciones $g_k, g_{L_1}, g_{L_{2,3}}$ que dependen de ξ . Durante la colisión, los estados iniciales atómicos de la nube electrónica se polarizan debido a la interacción que ocurre al pasar el ion por fuera de las capas internas, lo que provoca un aumento en la sección eficaz de ionización. Este efecto de polarización se puede considerar haciendo uso de la aproximación PSS, definiendo el factor de corrección por polarización como:

$$\epsilon_s^P(\xi_s, \theta_s; c_s) = 1 - \frac{2Z_1}{Z_2 \theta_s} h_s(\epsilon_s, C_s), \quad (2.33)$$

donde:

$$h_s(\xi_s, c_s) = \frac{2n}{\theta_s \xi_s^3} I(c_s n / \xi_s), \quad (2.34)$$

con c_s una constante dependiente de la subcapa que se considera en la ionización y donde la función $I(x)$ está dada por:

$$I(x) = \frac{3\pi}{4} \left(\ln \frac{1}{x^2} - 1 \right). \quad (2.35)$$

Así, combinando los efectos de ligadura y de polarización, se obtiene el factor de corrección:

$$\zeta_s(\xi_s) = 1 + \frac{2Z_1}{Z_2 \theta_s} [g_s(\xi_s) - h_s(\xi_s; c_s)], \quad (2.36)$$

el cual se puede tomar en cuenta como una corrección de θ_s para $\zeta_s \theta_s$, y la sección eficaz de ionización para la capa s (De Lucio, 2000) se expresa como:

$$\sigma_s^{PSS} = \sigma_s^{PWBA}(\eta_s, \zeta_s \theta_s). \quad (2.37)$$

2.2.2. Efecto de desviación Coulombiana

El siguiente efecto a considerar es el de la desviación Coulombiana. Si en la ionización el proyectil incidente interactúa con una alta velocidad, el núcleo no altera de forma significativa la trayectoria del proyectil. A bajas velocidades dicha interacción es significativa, produciendo una desviación en la trayectoria y una disminución de la velocidad al aproximarse al núcleo. Para bajas energías, el proyectil se considera una función de onda Coulombiana. Brandt y Lapicki (1981) derivan el valor del factor de corrección para considerar el efecto de desviación Coulombiana basándose en la teoría SCA desarrollada por Bang y Hansteen a partir de la ecuación:

$$\left(\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right)^{hyp} = e^{-\pi d q_0 \tau} \left(\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right)^{sl} \quad (2.38)$$

donde los superíndices *hyp* y *sl* se refieren a las trayectorias hiperbólica y rectilínea respectivamente, $d = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_1}$ es la mitad de la distancia de máximo acercamiento del ion, $\hbar q_0 = \frac{\hbar \omega_{2s}}{v_i}$ es el posible momento mínimo transferido y $\tau = 1 + \frac{E_f}{\hbar \omega_{2s}}$. Considerando la sección diferencial de ionización sobre una trayectoria recta en el límite de colisiones lentas, en términos de q_0 :

$$\left(\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right)^{sl} \propto (q_{0s} \tau)^{-(10+2l_2)}, \quad (2.39)$$

donde l_2 es el momento angular orbital del electrón en la capa s , es decir, $l_2 = 0$ para las capas K y L_1 y $l_2 = 1$ para las capas L_2 y L_3 .

Integrando la ecuación (2.39) sobre t desde 1 hasta ∞ , se obtiene la sección eficaz con corrección Coulombiana:

$$\sigma_s^C = C_s (\pi d q_{0s}) \sigma_s^{PWBA} \quad (2.40)$$

con:

$$C_s(\pi dq_{0s}) = (9 + 2l_2)E_{10+2l_2}(\pi dq_{0s}) \quad (2.41)$$

como el factor de desviación Coulombiana.

Al combinar los efectos de polarización Coulombiana y unión-polarización, la sección CPSS (De Lucio, 2000) se expresa como:

$$\sigma_s^{CPSS} = C_s(\pi dq_{0s} \zeta_s) \sigma_s^{PWBA}(\eta_s, \zeta_s, \theta_s). \quad (2.42)$$

2.2.3. Efecto electrónico relativista

El efecto electrónico relativista toma importancia cuando se tienen blancos pesados y proyectiles de baja velocidad. Para $Z_2 > 50$ se necesita emplear funciones de onda relativistas para los electrones atómicos, lo que resulta en que la densidad de electrones es mayor cerca del núcleo, al comparar con funciones de onda no relativistas, de manera que las velocidades de los electrones de las capas internas sean mayores. Cuando la energía del proyectil es baja, la colisión debe tener lugar cerca del núcleo para que sea posible expulsar electrones, cuyas velocidades son mayores, por lo que el momento mínimo transferido será mayor. En consecuencia, estos efectos provocan el aumento en las secciones de ionización de las capas internas.

Para la corrección relativista, Brandt y Lapicki (1979) desarrollaron una corrección a la PWBA. Primero se considera que cuando $\xi_1 \ll 1$ la sección de ionización en PWBA es proporcional a la cuarta potencia de T_{max} .

$$T_{max} = 2mv_1^2 = m\theta_s \omega_{2s} \xi_s^2, \quad (2.43)$$

donde T_{max} es la energía máxima que se puede transferir al electrón. Se establece la masa relativa del electrón en un potencial central como función de r , esto es, $m^R(r)$. Lapicki y Losonsky (1979) mencionan que se puede hacer a partir del teorema del Virial de manera que la masa relativista de un electrón en un potencial central se expresa en términos de potencias de $\frac{Z_{2s}}{r}$, como se muestra a continuación:

$$m^R(r) = \left[1 + \left(\frac{Z_{2s}}{2rc^2} \right)^2 \right]^{1/2} + \frac{Z_{2s}}{2rc^2}. \quad (2.44)$$

Evaluando esta función en un valor promedio $\langle R(t) \rangle = \alpha b$ para una trayectoria recta con parámetro de impacto b y donde $\alpha = \sinh(1) = 1.1752$. Al promediar $m^R(ab)$ sobre todos los parámetros de impacto, se obtiene el factor de corrección relativista dado por:

$$m_s^R(\xi_s) = (1 + 11y_s^2)^{1/2} + y_s, \quad (2.45)$$

para las capas K y L_1 , y_s toma el valor de:

$$y_s = \frac{0.4 \left(\frac{Z_{2s}}{137} \right)^2}{n \xi_s}, \quad (2.46)$$

y para las capas L_2 y L_3 , y_s toma el valor de:

$$y_s = \frac{0.15 \left(\frac{Z_{2s}}{137} \right)^2}{\xi_s}. \quad (2.47)$$

Reemplazando ξ_s por $[m_s^R(\xi)]^{1/2} \xi$ o reemplazando η_s por $m_s^R \eta$ en la sección eficaz no relativista de la PWBA, se puede definir la velocidad reducida relativista como:

$$\xi_s^R = [m_s^R(\xi)]^{1/2} \xi_s. \quad (2.48)$$

Considerando en conjunto los efectos: relativista, de desviación Coulombiana y el de ligadura y polarización, se tiene una sección de ionización corregida (De Lucio, 2000) descrita de la forma:

$$\sigma_s^{CPSSR} = C_s (\pi d q_0 \zeta_s) \sigma_s^{PWBA} (\xi_s^R / \zeta_s, \zeta_s \theta_s). \quad (2.49)$$

2.2.4. Efecto de pérdida de energía

La sección PWBA comúnmente se calcula a partir de las ecuaciones (2.20) o (2.28), con los límites de integración de Q_{max} a ∞ en lugar de los límites exactos de la ecuación (2.25) con las condiciones: $m_1 \ll m_2$ y $\varepsilon = \hbar \omega_{2s} + E_f \ll E_i$. Para que la energía de incidencia sea pequeña, es decir εE_i , la consideración acerca de Q_{max} no es adecuada, por lo que se deben de utilizar los límites exactos. Brandt y Lapicki (1981) proponen una corrección tomando este hecho. A partir de la ecuación (2.39), se describe la sección diferencial con los límites de integración exactos, de la siguiente manera:

$$\left(\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right)^{EPWBA} = \left(\frac{d\sigma_s}{dE_f} \right)^{PWBA} \left[\left(\frac{q_0}{q_{min}} \right)^{\nu+1} - \left(\frac{q_0}{q_{max}} \right)^{\nu+1} \right], \quad (2.50)$$

donde $\nu = 9 + l_2$ y q_{min} , q_{max} son las transferencias de momento mínima y máxima de las ecuaciones (2.22) y (2.23). Al integrar la ecuación (2.50) sobre todos los estados finales E_f posibles, se expresa la sección de la siguiente forma:

$$\sigma_s^{EPWBA} = f_s(z_s) \sigma_s^{PWBA}, \quad (2.51)$$

en la que

$$f_s(z_s) = \frac{1}{2\nu(\nu-1)} [(\nu z_s + 1)(1 - z_s)^\nu], \quad (2.52)$$

y

$$z_s = \left(1 - \frac{m_1 \hbar \omega_{2s}}{m E_1} \right)^{1/2}. \quad (2.53)$$

Si la energía del ion incidente es muy pequeña se toma el valor de q_{min} exacta a partir de la ecuación (2.22), de forma que:

$$q_{min} = \frac{p_o - p}{\hbar} = K_i - K_f = \frac{2q_0}{1 + (1 - \Delta)^{1/2}}, \quad (2.54)$$

donde $\Delta = \frac{E_1 - E_{1f}}{E_1}$ y E_{1f} es la energía final del ion después de la colisión. Lapicki y Losonsky (1979) mostraron que cuando se toma en cuenta la pérdida de energía del ion, en el factor de corrección Coulombiana de las ecuaciones (2.40) y (2.41) debe cambiarse el argumento dq_0 por :

$$Z_1 Z_2 m (K_f^{-1} - K_i^{-1}) = \frac{Z_1 Z_2}{m v_i v_f} (K_i - K_f). \quad (2.55)$$

A partir de las ecuaciones (2.53), (2.54) y (2.55) se encuentra que para tomar en cuenta el efecto de pérdida de energía en la corrección por desviación Coulombiana de la ecuación (2.40), basta con multiplicar dq_0 por $\frac{2}{z_s(1+z_s)}$. Por lo que la sección de ionización con pérdida de energía y desviación Coulombiana queda como:

$$\sigma_s^{EC} = C_s \left(\frac{2\pi d q_{0s}}{z_s(1+z_s)} \right) f(z_s) \sigma_s^{PWBA}. \quad (2.56)$$

Así la sección de ionización que considera todos estos efectos (De Lucio, 2000) se puede expresar como:

$$\sigma_s^{ECPSSR} = C_s \left(\frac{2\pi d q_{0s} \zeta_s}{z_s(1+z_s)} \right) f(z_s) \sigma_s^{PWBA}(\zeta_s^R / \zeta_s, \zeta_s \theta), \quad (2.57)$$

con:

$$z_s = \left(1 - \frac{\zeta_s \hbar \omega_{2s} m_1}{m E_1} \right)^{1/2}. \quad (2.58)$$

En trabajos anteriores realizados por Lapicki y Miranda (2018 a), se ha relacionado el coeficiente de velocidad reducida con la sección eficaz de producción de rayos X en la búsqueda de leyes de escalamiento, usando iones de diferentes tipos intentando encontrar una dependencia con el número atómico del proyectil, en esta investigación se compilieron datos de diversos tipos de iones colisionando contra átomos de carbono, buscando una dependencia de las leyes de escalamiento tanto para el número atómico como para el estado de carga.

Capítulo 3

Procedimientos para el estudio

El estudio de las interacciones ion-átomo resulta útil en la investigación de diversas propiedades atómicas, como son los niveles de energía, la formación de moléculas, efectos de la radiación en material biológico y hasta la astrofísica (Lapicki y Miranda, 2014). Además, el conocimiento de estos fenómenos encuentra una aplicación directa en la ya citada técnica PIXE.

En las últimas décadas se ha obtenido una gran cantidad de resultados de análisis de las capas internas de los átomos (Cuadro 3.1). En particular para la capa K se ha podido realizar una mejor descripción del proceso de ionización, ya que el estudio tanto teórico como experimental resulta ser más simple. En el caso de la capa L los desacuerdos entre los resultados teóricos y experimentales observados sugieren un estudio más amplio para obtener una comprensión más profunda de los mecanismos de ionización. En estos años se ha realizado un número limitado de mediciones con iones pesados, incluyendo las del carbono que se compilaron para esta tesis. En los artículos citados más adelante, se reportan mediciones de las SEPRX de la capa L total y de la capa L_{α} .

Por lo anterior, es necesario contar con bases de datos que contengan los resultados de estos experimentos, para proponer posibles escalamientos con variables universales, que involucren los números atómicos de iones y blancos, así como la energía (o velocidad) del ion. De igual manera, poder hacer comparaciones con los modelos teóricos, para establecer si alguno de ellos hace una mejor descripción de las SEPRX.

En esta sección se mostrarán la compilación de datos, los tipos de escalamiento, y los métodos estadísticos empleados en este trabajo.

3.1. Compilación de datos

Se han compilado varios resultados experimentales de la SEPRX inducidos por el impacto de iones de ^{12}C , en donde se emplearon intervalos de energías que comprenden desde 1.6 MeV hasta 54 MeV. Los elementos que se tomaron como átomos blanco

se encuentran entre los números atómicos $29 \leq Z \leq 83$. Los cuales se han relacionado en función de los parámetros de velocidad reducida ξ_L^R (Miranda, 2016) y v_1/v_{2L} (Lapicki y Miranda, 2018 a), mostrando la posibilidad de encontrar un escalamiento universal para las secciones eficaces de la línea α y la sección eficaz total σ_{LT} .

A lo largo de las décadas recientes se han llevado a cabo varios trabajos en búsqueda de los valores de la SEPRX de las capas L inducidos por la colisión de iones de ^{12}C . La compilación presentada a continuación data desde los años 80, donde se recabaron los datos de la sección eficaz de producción de rayos X para las líneas L_α y L_{total} .

Los detalles de los métodos experimentales usados en cada uno de los artículos se resumen en el Cuadro 3.1. En donde, se incluyen aspectos como el número atómico del blanco, los intervalos de energía, el estado de carga, el tipo de acelerador empleado y el detector de rayos X.

Ref.	Número atómico Z	Energías (MeV)	Estado de carga	Acelerador	Detector
1	60,64,67,70,79,82	25	4	Tandem Van de Graaff	Si
2	79, 83	3,6-9.5	2, 3	3 MV Tandem Pelletron	Si(Li)
5	48, 49, 51, 52, 56, 65, 70	2,6-10	6	EN Tandem Van de Graaff	Si(Li)
6	57, 58, 59, 60, 62, 63, 66, 68	4,8-33,6	3	Warsaw van de Graaff	Si
13	40, 41, 42, 47, 48, 49, 50, 51, 73, 74, 82, 83	9,6-18,2	2	-	-
14	78	9-54	4	Van de Graaff Tandem	GeHP
17	58, 60, 71	4-10	3	3 MV Tandem Pelletron	Si(Li)
21	75, 78, 79	4-8	2	3 MEV Pelletron	Si(Li)
22	58, 60, 62, 63, 64, 66	6-9	4	NEC 9SDH-2 Pelletron	Canberra LEGe
23	29, 31, 32, 35, 39	2-12	4	3 MV Tandem Pelletron	Si(Li), HpGe
24	57, 58, 60, 62	35-50	4	15 UD pelletron	HPGe
25	29, 31, 35, 39, 42, 47, 50, 57, 60, 64, 67, 70, 79, 82	2-12	2, 3	3MV NEC tandem	Si(Li)
30	73	4-20	-	5 MV Tandem	KETEX SDD
31	79	1,6-3,4	-	Van de Graaff	KEVEX, Si(Li)
32	47, 79	2,8-5	3	1 MV RBI Tandatron	Si(Li), SDD

Cuadro 3.1: Especificaciones de los métodos experimentales de las SEPRX recopiladas de diferentes autores.

Del trabajo realizado por Battacharya et al. (1994 a) sólo se obtuvieron las secciones de ionización por lo que se calcularon las SEPRX a partir de las secciones de ionización con los parámetros atómicos necesarios obtenidos de las tablas de Campbell (2003, 2009), para la producción de fluorescencia y las transiciones Coster-Kronig se tomaron los valores de las tablas de Campbell y Wang (1989). De los trabajos realizados por Gugiu et al. (2009) y Prieto et al. (2017) sólo se obtuvieron las gráficas de las SEPRX y los valores de éstas se recuperaron gracias a la digitalización haciendo uso del software de acceso libre “Engauge” que obtiene los valores a partir de la gráfica.

Se calculó el valor del coeficiente de velocidad reducida correspondiente a cada una de las SEPRX compiladas. Los valores de los modelos PWBA y ECPSSR de las SEPRX se obtuvieron a partir del software “ISICS2011” (Cipolla, 2011).

3.2. Escalamiento basado en el coeficiente de velocidad

$$\xi_L^R$$

El modelo PWBA predice una curva universal para las secciones eficaces σ_{Li} descrita por Metha et al. (1993) como:

$$\theta_{Li}(Z_2/Z_1)^2(\sigma_{Li}/a_2^2) = f(\eta_L, \theta_{Li}^2) \quad (3.1)$$

donde θ_{Li} es la energía de amarre, Z_1 es el número atómico del proyectil, Z_{2L} es el número atómico del blanco, a_2 es el radio de Bohr y η_L es la energía reducida del proyectil.

El primer escalamiento universal propuesto para las líneas L_α y L_{total} de las SEPRX se refiere a un parámetro de velocidad relativista reducido descrito por Miranda (2016) definido por:

$$\xi_L^R = \frac{1}{4}(\xi_{L_1}^R + \xi_{L_2}^R + 2\xi_{L_3}^R), \quad (3.2)$$

la velocidad relativista reducida para la subcapa i se expresa como:

$$\xi_{L_i}^R = (m_{L_i}^R)^{1/2} \xi_{L_i}, \quad (3.3)$$

donde $m_{L_i}^R$ es la masa relativista reducida y ξ_{L_i} es la velocidad reducida adimensional dada por la ecuación

$$\xi_{L_i} = \frac{v_1}{\frac{1}{2}\theta_{Li}v_{2,L_i}}, \quad (3.4)$$

con la energía de ligadura reducida

$$\theta_{L_i} = \frac{n^2 \hbar \omega_{2L_i}}{Z_{2L}^2 R}, \quad (3.5)$$

con v_1 la velocidad del proyectil, v_{2,L_i} la velocidad del electrón en la subcapa atómica L_i , $R = 1.097 \times 10^7 m^{-1}$ la constante de Rydberg, n el número principal cuántico, $\hbar \omega_{2L_i}$ la energía de ligadura del electrón en la subcapa L_i y el número atómico del átomo blanco proyectado como $Z_{2L} = Z_2 - 4.15$.

Cuando se trata de iones pesados el comportamiento apropiado con el número atómico del proyectil Z_1 no está todavía bien comprendido, especialmente al estudiar la emisión de rayos X L. El modelo teórico predice una dependencia de Z_1^{-2} que no está completamente demostrada, debido a la falta de una escala adecuada de las secciones transversales para todos los proyectiles (Miranda y Lapicki, 2018 a).

En este caso, la normalización predicha por el modelo PWBA y el parámetro de velocidad reducida no dan como resultado curvas universales para ninguno de los casos estudiados. En un trabajo realizado por Miranda (2019) se busca una curva universal que se presenta en el escalamiento propuesto para las SEPRX L_α experimentales inducidas por el impacto de iones pesados. Por otro lado Sarkadi y Mukoyama (1991)

intentaron realizar un escalamiento dividiendo la sección entre el cuadrado del número atómico del proyectil (Figura 3.1) obteniendo resultados nulos de dicho escalamiento. En la Figura 3.2 se muestran las SEPRX de las líneas α en función del parámetro de velocidad ξ_L^R en donde no se encontraron curvas universales y se propone utilizar el parámetro de velocidad reducida mencionado por Lapicki y Miranda (2018 a).

3.3. Escalamiento basado en el coeficiente de velocidad

$$v_1/v_{2L}$$

Como antecedente a este trabajo, una gran cantidad de datos experimentales de la SEPRX de la capa L inducida por la colisión de protones como proyectil, se compilaron en un trabajo realizado por Lapicki y Miranda (2018 a). Las energías para acelerar los protones empleadas están dentro del intervalo de 10 keV y 1 GeV, con átomos blanco de número atómico $19 \leq Z_2 \leq 95$. Con estos datos se realizó un ajuste en términos de la variable v_1/v_{2L} que escala con un mínimo de parámetros ajustables. Al evaluar las SEPRX compiladas en función de la variable v_1/v_{2L} se presenta una curva que está expresada con base en la siguiente función:

$$\frac{v_1}{v_{2L}} = \frac{6.33E_1^{1/2}}{(Z_{2L}/2)}, \quad (3.6)$$

El valor de v_1 es la velocidad orbital del electrón, $v_{2L} = Z_{2L}/n$ y $Z_{2L} = Z_2 - 4.15$ es la carga nuclear apantallada en la capa L con número cuántico principal $n = 2$ y E_1 la energía en MeV del protón en el laboratorio. Además, las SEPRX alcanzan un máximo cuando $v_1 = v_{2L}$. Lo que implica que:

$$v \equiv \log(v_1/v_{2L}). \quad (3.7)$$

Para cada Z_{2L} los datos compilados se pueden ajustar como

$$\sigma_{LX} = F(v), \quad (3.8)$$

donde $F(v) \leq \sigma_{LX}^{max}$ y $F(0) = \sigma_{LX}^{max}$

$$\sigma_{LX} = \sigma_{LX}^{max}(Z_{2L})e^{-(1+a_1Z_{2L})v^2+a_2v^7}, \quad (3.9)$$

Para valores pequeños de v , la función exponencial que tiene dos términos en su argumento proporcionales a v^2 y v^7 se forma una parábola inversa cerca de $v = 0$. Así la dependencia de Z_{2L} es lineal solo con v^2 y no con v^7 . El mejor ajuste se da con $a_1 = 0.00484$ y $a_2 = 0.005$. $\sigma_{LX}^{max}(Z_{2L})$ se puede calcular con cualquier teoría de ionización de las capas internas ya que prácticamente los picos de σ_{LX} están alrededor de 0.

Hay una mejora al incorporar la corrección para tomar en cuenta los cambios de la energía de enlace de los estados del electrón que surgen debido a la presencia del proyectil cargado positivamente en el átomo al modelo ECPSSR, lo que se denomina como modelo UA-ECPSSR o ECUSAR (*Energy-loss Coulomb-deflection United Separated Atom Relativistic*). La SEPRX se calculó en este caso con la teoría ECUSAR.

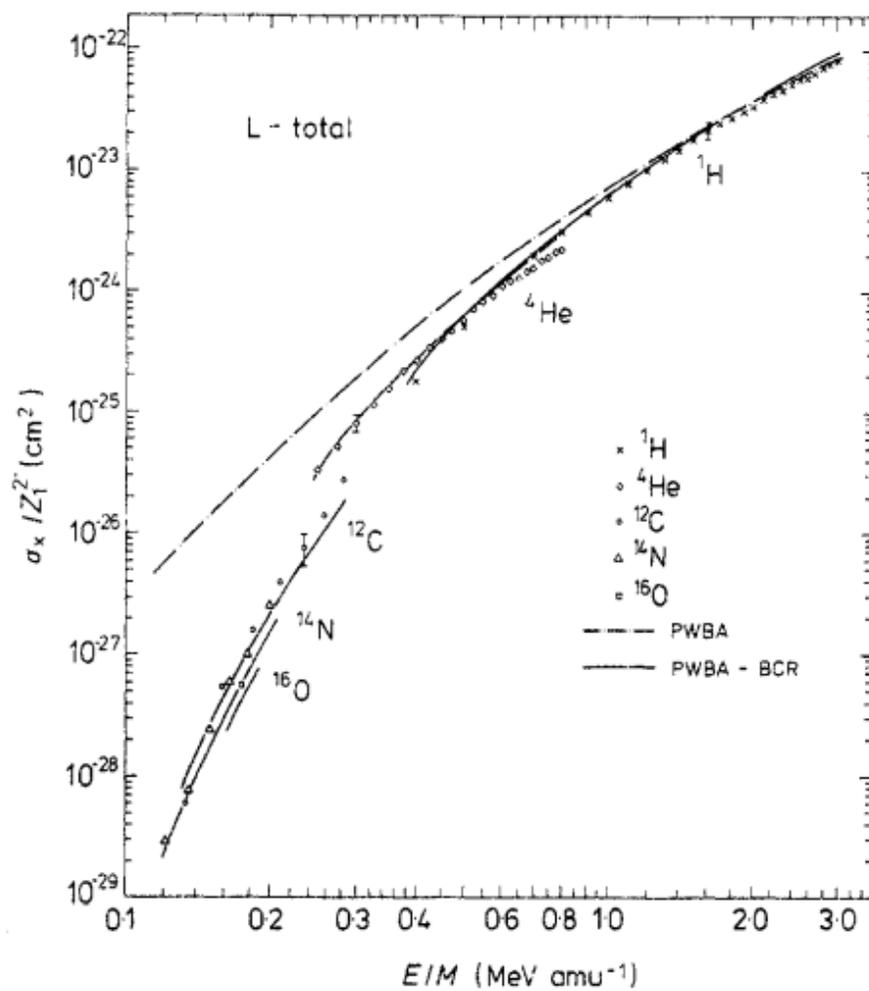


Figura 3.1: Propuesta de escalamiento dividiendo la sección entre el cuadrado del número atómico del proyectil (Sarkadi y Mukoyama, 1991).

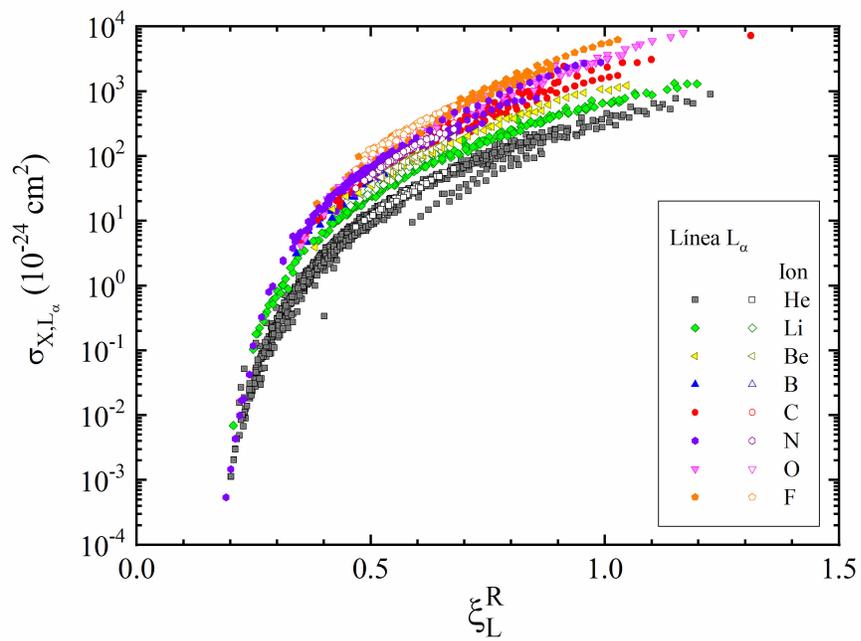


Figura 3.2: Compilación de SEPRX L_α en función del coeficiente de velocidad reducida ξ_L^R . Miranda demuestra que el escalamiento al ser dividido entre Z_1^2 no funciona correctamente. Adaptado de (Miranda, 2019).

La proporción de las SEPRX resultó estar de acuerdo con el ajuste universal. Los ajustes difieren de 1 a 2 factores en el 3.4% de las proporciones datos/ajuste y el 0.7% de las proporciones datos/ajuste difieren de 1 a 4 factores. La desviación estándar es del 32%, con una curva Gaussiana de 5.6%, mientras que el ajuste más preciso solo tiene el 3.4% de 5699 proporciones fuera de ese factor.

El ajuste empleado resultó ser un hecho universal debido a que cubre un amplio segmento de elementos abarcando un intervalo de cinco órdenes de magnitud de la energía de protón, con $0.026 \text{ MeV} \leq E_1 \leq 1 \text{ GeV}$. En la Figura 3.3 se muestran las proporciones de las SEPRX para $Z = 29$ y 35 en función de los coeficientes de velocidad v_1/v_{2L} realizado por Lapicki y Miranda (2018 a), las curvas teóricas se logran ajustar muy bien a los datos experimentales encontrando un arreglo universal.

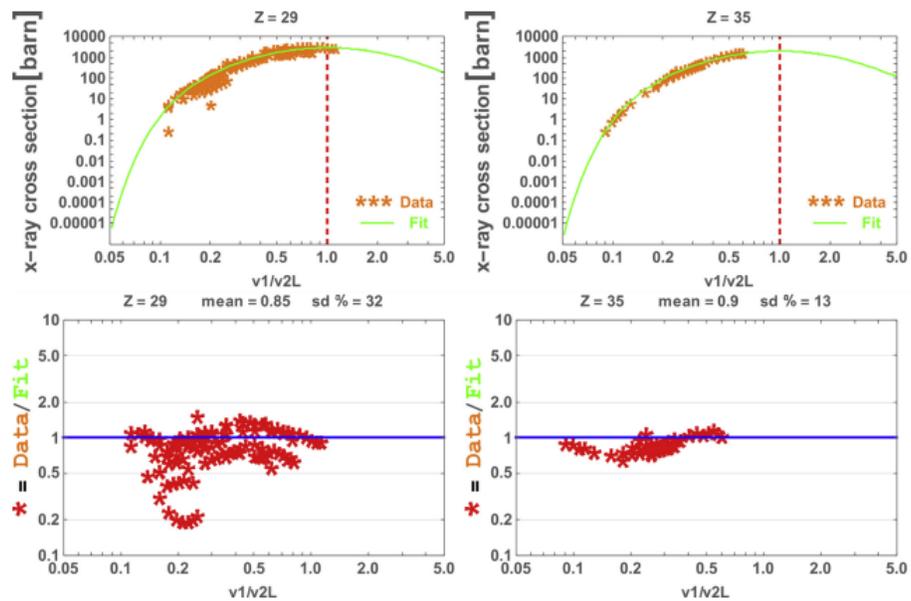


Figura 3.3: Proporción de las SEPRX para $Z = 29$ y 35 en función de v_1/v_{2L} . Adaptado de (Lapicki y Miranda, 2018 a).

En este trabajo se utilizará este procedimiento como el segundo escalamiento propuesto para la energía de incidencia de los iones de ^{12}C , además de que se buscará el escalamiento de las secciones mediante el cálculo de cociente de la sección entre el cuadrado del estado de carga de los iones incidentes en cada experimento.

3.4. Métodos estadísticos

En este trabajo se busca encontrar una función que logre describir de la mejor manera posible el comportamiento de las SEPRX como función de cada una de las variables de velocidad reducida. Existe una gran cantidad de funciones que puedan ser útiles para esta tarea, sin embargo se intentará buscar un polinomio, en donde la variable dependiente se trate como el $\log_{10}(\sigma_L)$.

Aplicando el logaritmo inverso para poder calcular el residuo r de los valores del ajuste a los datos experimentales utilizando la siguiente expresión:

$$r = \frac{|\sigma_{ajuste} - \sigma_{experimental}|}{\sigma_{experimental}} \quad (3.10)$$

Con base en la comparación de los residuos se evalúa cuál de los dos métodos resulta en mejores predicciones teóricas. Para la comparación se aplica la prueba T en los residuos. La prueba T supone que las muestras poseen una distribución normal y varianzas similares, operando con los valores de las medias y con el error típico de la diferencia entre las medias (Palacios et al., 2022).

Además se relacionaron las SEPRX L_{total} divididas entre el estado de carga de los iones incidentes de ^{12}C correspondientes con respecto del coeficiente de velocidad reducida v_1/v_{2L} con el fin de observar si se presenta un posible escalamiento dependiente del estado de carga.

Capítulo 4

Resultados

Las SEPRX experimentales compiladas se graficaron en función del coeficiente de velocidad relativista reducida para la capa L total y la subcapa L_α utilizando dos coeficientes de velocidad reducida diferentes: v_1/v_{2L} y ξ_L^R .

Se realizaron ajustes polinomiales para encontrar funciones que se aproximaron a la curva de las gráficas. A las gráficas correspondientes a las SEPRX L_{total} figuras 4.1 y 4.2 se les aplicó un ajuste polinomial de 5to. orden y para las correspondientes a las SEPRX L_α un ajuste polinomial de 6to. orden figuras 4.5 y 4.6.

El valor de los coeficientes de los ajustes polinomiales para los valores de las gráficas de las SEPRX L_{total} y L_α en función de los coeficientes de velocidad reducida correspondientes se muestran en los siguientes polinomios:

$$\begin{aligned}\sigma_{LT} = & -2.78 + 1266.45a - 1.10 \times 10^5 a^2 \\ & + 5.40 \times 10^6 a^3 - 1.34 \times 10^8 a^4 + 1.32 \times 10^9 a^5,\end{aligned}\quad (4.1)$$

en este primer caso a se refiere al coeficiente de velocidad reducida v_1/v_{2L}

$$\sigma_{LT} = -3.96 + 20.96b - 26.13b^2 + 18.32b^3 - 6.55b^4 + 0.93b^5, \quad (4.2)$$

para este caso b es la variable de velocidad reducida ξ_L^R

$$\begin{aligned}\sigma_{L\alpha} = & -17.62 + 1.16 \times 10^4 c - 2.9816 \times 10^6 c^2 + 4.0816 \times 10^8 c^3 \\ & - 3.0416 \times 10^10 c^4 + 1.17 \times 10^12 c^5 - 1.82 \times 10^13 c^6,\end{aligned}\quad (4.3)$$

aquí c representa el coeficiente de velocidad reducida v_1/v_{2L} y

$$\begin{aligned}\sigma_{L\alpha} = & -21.21 + 167.37d - 523.46d^2 + 879.84d^3 \\ & - 813.86d^4 + 390.82d^5 - 79.14d^6,\end{aligned}\quad (4.4)$$

con d igual a ξ_L^R .

Los ajustes de las ecuaciones 4.1 y 4.2 se muestran en las figuras 4.1 y 4.2 correspondientes al estudio de las SEPRX L_{total} . A partir de los resultados experimentales y teóricos predichos con los diferentes coeficientes de velocidad reducida se obtuvieron los residuos que se graficaron como función del coeficiente de velocidad reducida correspondiente (Figura 4.3). Para comparar ambos métodos con los datos experimentales se realizó la prueba T estadística de la distribución de los residuos obtenida de la Figura 4.3 obteniendo los resultados de la Figura 4.4.

Los ajustes de las ecuaciones 4.3 y 4.4 se muestran en las figuras 4.5 y 4.6 que corresponden al estudio de las SEPRX L_{α} . Siguiendo el mismo procedimiento, se muestran las distribuciones de los residuos en la Figura 4.7. La prueba T de las distribuciones se muestran en la Figura 4.8.

Dado que la finalidad de este procedimiento es identificar cuál de los dos escalamientos se ajusta mejor a los datos experimentales, se espera que el residuo definido por la ecuación (3.10) sea lo más cercano posible al valor esperado igual a cero cuando la predicción sea mejor. Al tomar los residuos de manera global mediante la prueba T (con todos los datos experimentales), se identificará cuál de las dos variables reducidas resulta más apropiada.

En los Cuadros 4.1 y 4.2 se muestran los valores de la media, desviación estándar, el intervalo de confianza al 95 % y el valor de la prueba T para los residuos de los escalamientos con SEPRX L_{total} y L_{α} respectivamente. Los resultados de la prueba T de la distribución de los residuos que consideran las SEPRX L_{total} en el caso del método con el coeficiente de velocidad reducida v_1/v_{2L} muestran una media de 0.08 mientras que en el caso en donde el coeficiente de velocidad reducida es ξ_L^R la media es de 0.04. Los resultados de la prueba T para la distribución de los residuos que dependen de las SEPRX L_{α} con coeficiente de velocidad reducida v_1/v_{2L} muestran una media de 0.02 mientras que en el caso en donde el coeficiente de velocidad reducida es ξ_L^R la media obtenida es de 0.01.

Coefficiente de velocidad	Media	Desviación estándar	Intervalo de confianza al 95 %	Valor T
v_1/v_{2L}	0.08	0.50	0.03	3.47
ξ_L^R	0.04	0.33	0.01	3.07

Cuadro 4.1: Resultados de la prueba T de los residuos dependientes de las SEPRX L_{α} .

Coefficiente de velocidad	Media	Desviación estándar	Intervalo de confianza al 95 %	Valor T
v_1/v_{2L}	0.02	0.26	-0.005	1.62
ξ_L^R	0.01	0.22	-0.009	1.22

Cuadro 4.2: Resultados de la prueba T de los residuos dependientes de las SEPRX L_{total} .

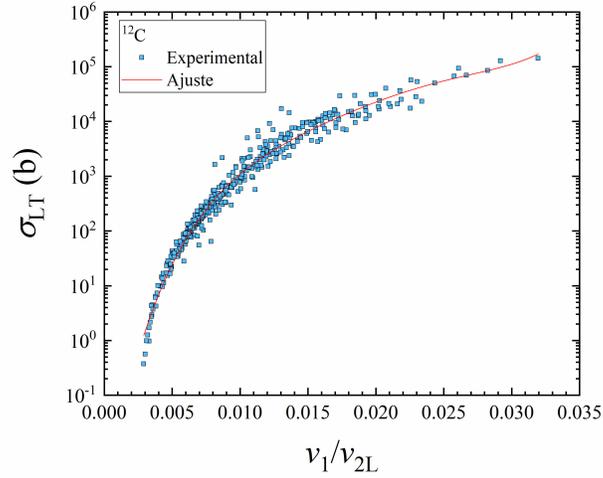


Figura 4.1: Relación de la sección eficaz de producción de rayos X L total inducida con ^{12}C con el coeficiente de velocidad reducida v_1/v_{2L} . La curva es un polinomio de grado 5 obtenidas con el software “OriginPro 2022”.

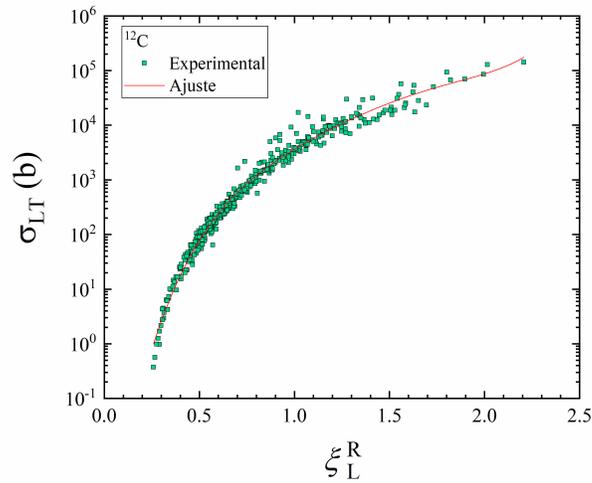


Figura 4.2: Relación de la sección eficaz de producción de rayos X L total inducida con ^{12}C con el coeficiente de velocidad reducida ξ_L^R . La curva es un polinomio de grado 5 obtenidas con el software “OriginPro 2022”.

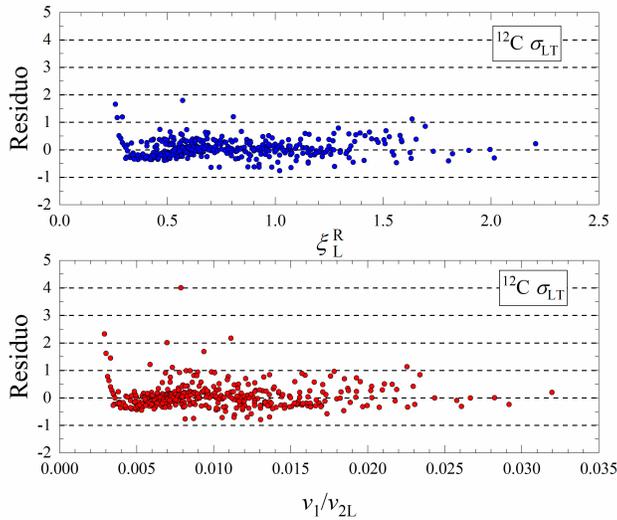


Figura 4.3: Relación del residuo entre datos experimentales y el ajuste polinomial de la sección eficaz de producción de rayos X L_{total} inducidas con ^{12}C con los coeficientes de velocidad reducida ξ_L^R y v_1/v_{2L} obtenidas con el software “OriginPro 2022”.

```

One-sample t test
-----
Variable      Obs      Mean      Std. Err.      Std. Dev.      [95% Conf. Interval]
-----
Residu~1      437      .0832997    .0239886      .501471        .036152      .1304474

    mean = mean(ResiduoTv1)
Ho: mean = 0
                                t = 3.4725
                                degrees of freedom = 436

    Ha: mean < 0
Pr(T < t) = 0.9997
    Ha: mean != 0
Pr(|T| > |t|) = 0.0006
    Ha: mean > 0
Pr(T > t) = 0.0003

. ttest ResiduoTcsi == 0

One-sample t test
-----
Variable      Obs      Mean      Std. Err.      Std. Dev.      [95% Conf. Interval]
-----
Residu~i      437      .049364    .0160413      .3353367      .017836      .0808919

    mean = mean(ResiduoTcsi)
Ho: mean = 0
                                t = 3.0773
                                degrees of freedom = 436

    Ha: mean < 0
Pr(T < t) = 0.9989
    Ha: mean != 0
Pr(|T| > |t|) = 0.0022
    Ha: mean > 0
Pr(T > t) = 0.0011

```

Figura 4.4: Prueba T de los residuos (v_1/v_{2L} arriba, ξ_L^R abajo) dependientes de las SEPRX L_{total} obtenidas con el software “Stata 15”.

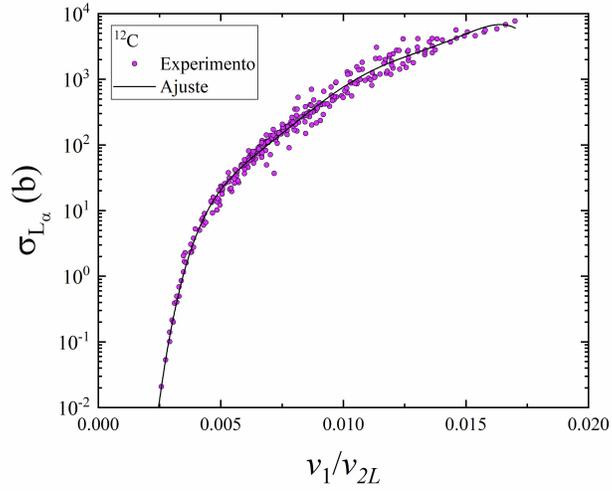


Figura 4.5: Relación de la sección eficaz de producción de rayos X L_α inducida con ^{12}C con el coeficiente de velocidad reducida v_1/v_{2L} . La curva es un polinomio de grado 6 obtenidas con el software “OriginPro 2022”.

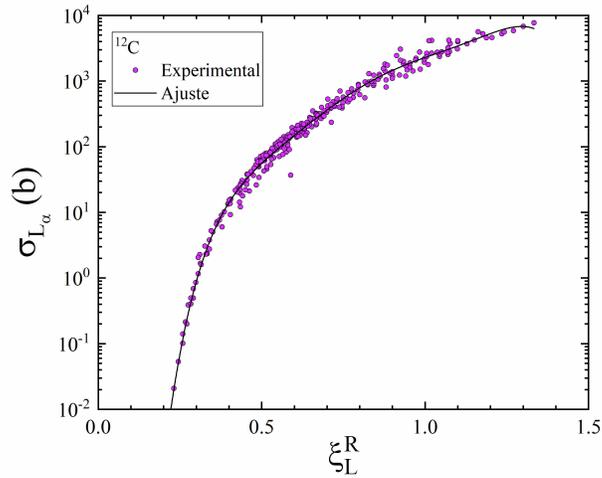


Figura 4.6: Relación de la sección eficaz de producción de rayos X L_α inducida con ^{12}C con el coeficiente de velocidad reducida ξ_L^R . La curva es un polinomio de grado 6 obtenidas con el software “OriginPro 2022”.

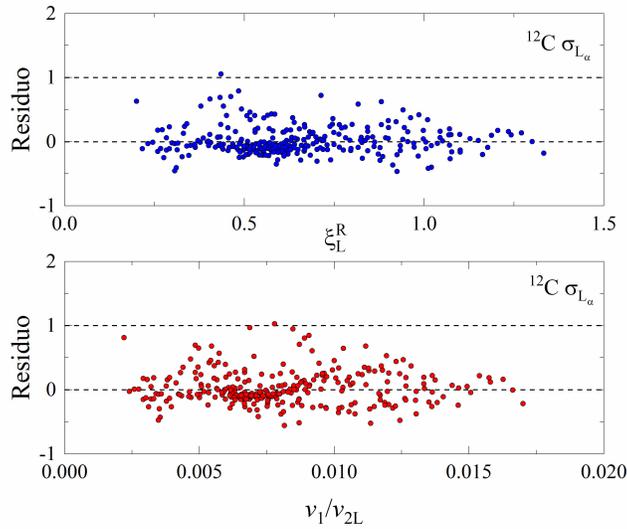


Figura 4.7: Relación del residuo entre datos experimentales y el ajuste polinomial de la sección eficaz de producción de rayos X L_α inducidas con ^{12}C con los coeficientes de velocidad reducida ξ_L^R y v_1/v_{2L} obtenidas con el software “OriginPro 2022”.

```

One-sample t test
-----
Variable | Obs   Mean   Std. Err.   Std. Dev.   [95% Conf. Interval]
-----|-----
Resv1    | 292   .0250679   .0154143   .2633994   -.0052697   .0554055

mean = mean(Resv1)
Ho: mean = 0
t = 1.6263
degrees of freedom = 291

Ha: mean < 0      Ha: mean != 0      Ha: mean > 0
Pr(T < t) = 0.9475  Pr(|T| > |t|) = 0.1050  Pr(T > t) = 0.0525

. ttest RescsiL == 0

One-sample t test
-----
Variable | Obs   Mean   Std. Err.   Std. Dev.   [95% Conf. Interval]
-----|-----
RescsiL  | 292   .0159351   .0129904   .2219795   -.0096319   .041502

mean = mean(RescsiL)
Ho: mean = 0
t = 1.2267
degrees of freedom = 291

Ha: mean < 0      Ha: mean != 0      Ha: mean > 0
Pr(T < t) = 0.8895  Pr(|T| > |t|) = 0.2209  Pr(T > t) = 0.1105

```

Figura 4.8: Prueba T de los residuos (v_1/v_{2L} arriba, ξ_L^R abajo) dependientes de las SEPRX L_α obtenidas con el software “Stata 15”.

4.1. Escalamiento por estado de carga

Las SEPRX L_{total} compiladas se graficaron en función del parámetro de velocidad v_1/v_{2L} como se muestra en la Figura 4.9 identificando las SEPRX por estado de carga. Posteriormente se les aplicó la división entre el cuadrado del estado de carga correspondiente del ion incidente. Así los valores $\sigma_{LT}/Z_{1,C}^2$ se graficaron en función del coeficiente de velocidad reducida v_1/v_{2L} (Figura 4.10). Para los artículos que presentaban más de un estado de carga, en el caso en el que no se especificó el estado de carga del ion, se tomó en cuenta el menor valor reportado.

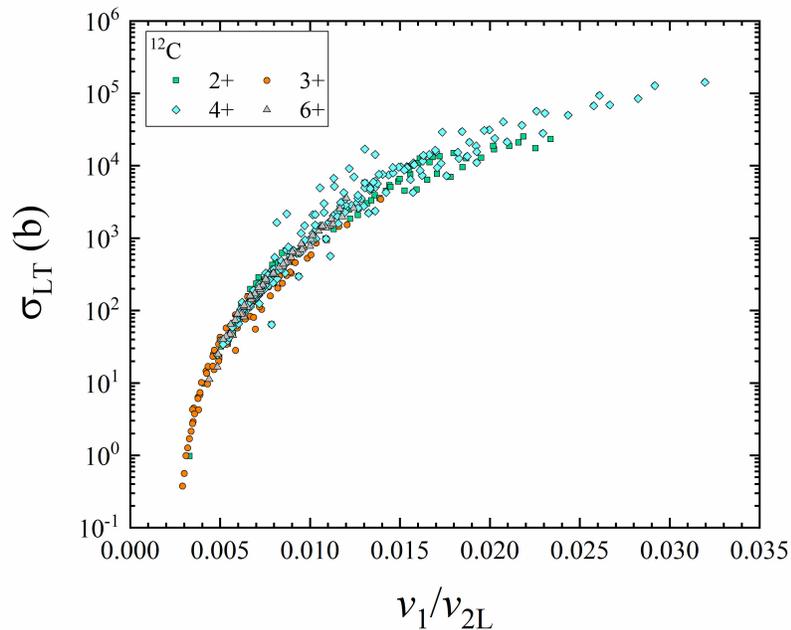


Figura 4.9: Relación de la sección eficaz de producción de rayos X L total con el coeficiente de velocidad reducida con identificación del respectivo estado de carga obtenidas con el software “OriginPro 2022”.

Se esperaba encontrar un mejor escalamiento a los mencionados anteriormente con este nuevo arreglo. Como se observa en la Figura 4.10 se distingue cada estado de carga de los iones con un color distinto. No obstante, a pesar de lo predicho por la teoría, la dispersión de los datos aumenta considerablemente, en vez de agruparlos en una sola curva. Esto significa que dicho escalamiento no es apropiado para los datos experimentales actuales.

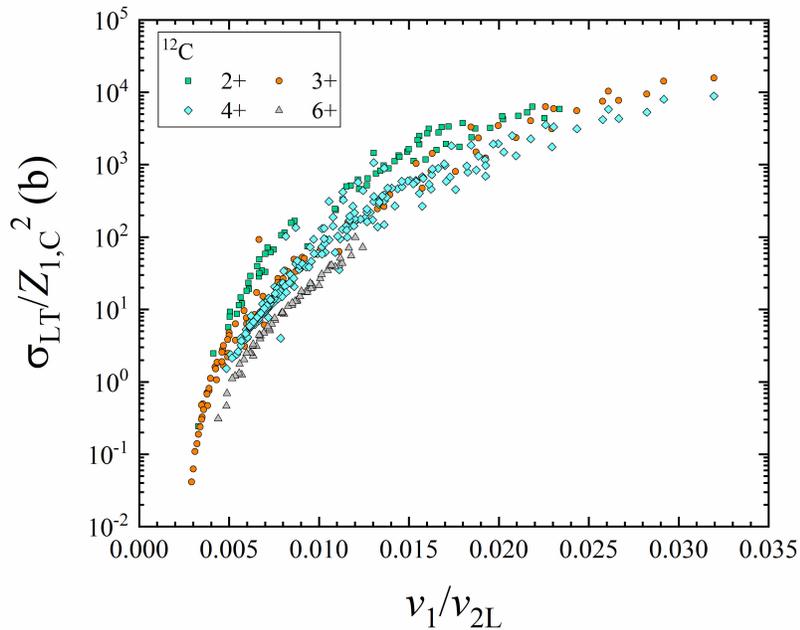


Figura 4.10: Relación de la sección eficaz de producción de rayos X L total con el coeficiente de velocidad reducida entre el cuadrado del estado de carga con identificación del respectivo estado de carga de los iones incidentes obtenidas con el software “OriginPro 2022”.

4.2. Comparación de los modelos PWBA y ECPSSR con los resultados experimentales

Por último se obtuvieron los cocientes de las SEPRX L_α tanto para el modelo teórico PWBA como para el modelo teórico ECPSSR. Estos a su vez se relacionaron con el coeficiente de velocidad reducida ξ_L^R (Figura 4.11) y se realizó la prueba T en ambas relaciones (Figura 4.12). Los resultados que se obtuvieron para el cociente con el modelo PWBA muestran una media de 0.42 mientras que para el cociente con modelo ECPSSR se obtuvo una media de 1.60 (Cuadro 4.3). Por otra parte, para las SEPRX L_{total} (Figura 4.13) se obtuvo la prueba T en ambas relaciones (Figura 4.14) con una media de 0.47 para los resultados del modelo PWBA y una media de 1.41 para el modelo ECPSSR (Cuadro 4.4).

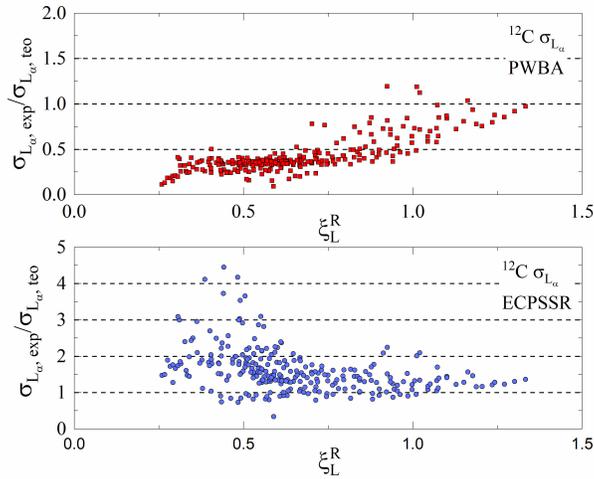


Figura 4.11: Relación del cociente entre de la SEPRX L_α experimental y la SEPRX L_α teórica correspondiente (PWBA y ECPSSR) con el coeficiente de velocidad reducida obtenidas con el software “OriginPro 2022”.

```
. import excel "F:\Word\Docencia\Tesis Josue\SecLtC.xlsx", sheet("ECPSSR") firstrow
. ttest Ra == 1
```

ECPSSR

One-sample t test

Variable	Obs	Mean	Std. Err.	Std. Dev.	[95% Conf. Interval]	
Ra	270	1.605235	.0366322	.6019285	1.533112	1.677357

```

mean = mean(Ra)
Ho: mean = 1
Ha: mean < 1
Pr(T < t) = 1.0000
Ha: mean != 1
Pr(|T| > |t|) = 0.0000
Ha: mean > 1
Pr(T > t) = 0.0000
t = 16.5219
degrees of freedom = 269

. import excel "F:\Word\Docencia\Tesis Josue\SecLtC.xlsx", sheet("PWBA") firstrow clear
. ttest Ra == 1
```

PWBA

One-sample t test

Variable	Obs	Mean	Std. Err.	Std. Dev.	[95% Conf. Interval]	
Ra	270	.4205522	.0115977	.1905695	.3977185	.443386

```

mean = mean(Ra)
Ho: mean = 1
Ha: mean < 1
Pr(T < t) = 0.0000
Ha: mean != 1
Pr(|T| > |t|) = 0.0000
Ha: mean > 1
Pr(T > t) = 1.0000
t = -49.9623
degrees of freedom = 269
```

Figura 4.12: Prueba T de los modelos ECPSSR y PWBA dependientes de las SEPRX L_α obtenidas con el software “Stata 15”.

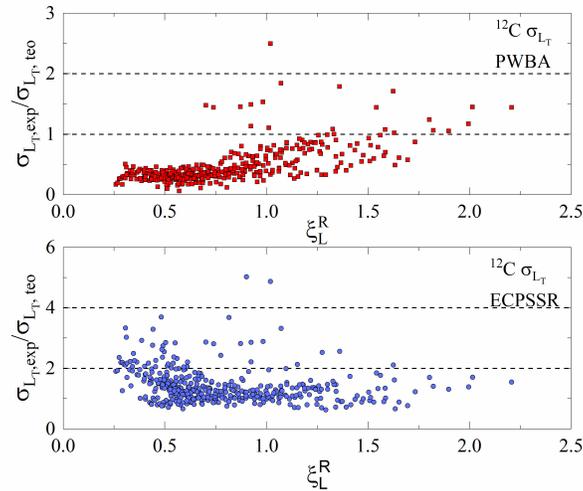


Figura 4.13: Relación del cociente entre la SEPRX L_α experimental y la SEPRX L_{total} teórica correspondiente (PWBA y ECPSSR) con el coeficiente de velocidad reducida obtenidas con el software “OriginPro 2022”.

```
. import excel "F:\Word\Docencia\Tesis Josue\SecLtC.xlsx", sheet("ECPSSR") firstrow
. ttest RT == 1
```

ECPSSR

```
One-sample t test
```

Variable	Obs	Mean	Std. Err.	Std. Dev.	[95% Conf. Interval]
RT	408	1.41125	.0286867	.5794439	1.354858 1.467643

```

mean = mean(RT)
Ho: mean = 1
Ha: mean < 1
Pr(T < t) = 1.0000
Ha: mean != 1
Pr(|T| > |t|) = 0.0000
Ha: mean > 1
Pr(T > t) = 0.0000
t = 14.3359
degrees of freedom = 407
```

```
. import excel "F:\Word\Docencia\Tesis Josue\SecLtC.xlsx", sheet("PWBA") firstrow clear
. ttest RT == 1
```

PWBA

```
One-sample t test
```

Variable	Obs	Mean	Std. Err.	Std. Dev.	[95% Conf. Interval]
RT	408	.4706579	.0151128	.3052635	.4409491 .5003668

```

mean = mean(RT)
Ho: mean = 1
Ha: mean < 1
Pr(T < t) = 0.0000
Ha: mean != 1
Pr(|T| > |t|) = 0.0000
Ha: mean > 1
Pr(T > t) = 1.0000
t = -35.0261
degrees of freedom = 407
```

Figura 4.14: Prueba T de los modelos ECPSSR y PWBA dependientes de las SEPRX L_{total} obtenidas con el software “Stata 15”.

Método	Media	Desviación estándar	Intervalo de confianza al 95 %	Valor T
ECPSSR	1.605	0.601	1.533	16.521
PWBA	0.420	0.190	0.397	-49.962

Cuadro 4.3: Resultados de la prueba T de los modelos ECPSSR y PWBA de las SEPRX L_α .

Método	Media	Desviación estándar	Intervalo de confianza al 95 %	Valor T
ECPSSR	1.4115	0.579	1.354	14.467
PWBA	0.470	0.305	0.440	-35.026

Cuadro 4.4: Resultados de la prueba T de los modelos ECPSSR y PWBA de las SEPRX L_{total} .

4.3. Discusión

Con relación a los escalamientos propuestos para la velocidad reducida, se aprecia que, tanto para la $\sigma_{L_{total}}$ (Figura 4.4) como para la σ_{L_α} (Figura 4.8), la prueba T demuestra que la probabilidad de que los residuos sean iguales a cero es mayor en ambos casos cuando se usa la variable reducida ξ_L^R que la v_1/v_{2L} . Esto es, el escalamiento propuesto con la primera resulta más adecuado, por presentarse una menor dispersión global de los datos experimentales con respecto a la predicción del polinomio ajustado.

Una posible explicación a este hecho es que la velocidad reducida ξ_L^R toma en consideración el número de electrones en cada subcapa (L_1, L_2, L_3), en contraste con v_1/v_{2L} , que es una variable que tiende a promediar de la misma manera todas las subcapas.

Como se mencionó anteriormente, una simple prueba visual de la dispersión de los datos experimentales divididos por el cuadrado del estado de carga, demuestra que dicha propuesta de escalamiento no es adecuada. Hasta el momento no existe, entre la comunidad científica especializada en el tema, una posible explicación del por qué los modelos teóricos no pueden ajustarse a los experimentos a través de un escalamiento de esta naturaleza.

En cuanto a la comparación de los valores experimentales con la teoría a través de los cocientes (que deben ser lo más cercanos posible a 1 cuando la predicción es correcta), las figuras 4.12 y 4.14 demuestran que para ambas secciones eficaces la ECPSSR predice valores estadísticamente significativos menores que el experimento (hay una subestimación), pues los cocientes son mayores que 1, mientras que la PWBA resulta en valores mayores estadísticamente significativos que los experimentales. No puede asegurarse que ninguno de los dos modelos sea mejor que el otro.

Existe la posibilidad de que, si se consideran otras correcciones, tales como la de átomo unido (UA, *united atom*) o por ionización múltiple (MI, *multiple ionization*), la ECPSSR pudiera acercarse más a los valores experimentales. Sin embargo, esto queda fuera del alcance del presente trabajo.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo se realizó la compilación de las SEPRX L_{total} y SEPRX L_{α} inducidas por iones de ^{12}C publicadas por diferentes autores. Se graficó la relación entre las SEPRX en función del parámetro de velocidad reducida v_1/v_{2L} con el propósito de observar un posible nuevo escalamiento basado en los trabajos mencionados por Lapicki y Miranda (2018 a). En este escalamiento se incluye como nueva variable el estado de carga para observar posibles dependencias entre las SEPRX y el estado de carga que nos ayuden a encontrar un mejor escalamiento.

Al observar la gráfica de la figura 4.10 no se alcanza a percibir un escalamiento, por lo que se concluye que no se encuentra nada al relacionar las SEPRX L_{total} con el estado de carga del ion incidente. Es decir, los modelos teóricos que originalmente proponían esta dependencia son incorrectos.

A su vez, en el trabajo presente se compararon dos métodos de escalamiento con diferentes coeficientes de velocidad; v_1/v_{2L} y ξ_L^R . Al comparar con los resultados experimentales compilados de las SEPRX L_{total} , el método que mostró resultados teóricos con mejor estimación resultó ser el que considera como coeficiente de velocidad reducida a ξ_i^R debido a que los residuos y su aplicación con la prueba T demuestran que está más cerca del valor cero. Para los resultados de las SEPRX L_{α} la mejor estimación la obtuvo el método con coeficiente de velocidad reducida, ξ_L^R ya que al igual que en el caso anterior, su aplicación con la prueba T de los residuos demuestra tener un valor más cercano a cero.

En general, las SEPRX L_{total} y L_{α} que se predicen con el modelo ECPSSR son menores que las experimentales mientras que para las SEPRX que se predicen con el modelo PWBA son mayores que las experimentales. Sin embargo estos resultados no son favorables debido a que los valores de los modelos teóricos y los resultados experimentales no coinciden por lo que es necesario buscar alguna corrección a los modelos teóricos, como las correcciones UA o MI.

Se propone reproducir estos análisis con diferentes iones y a su vez que cada uno cuente con diferentes estados de carga como proyectiles en el proceso de producción de rayos X. De esta manera se obtendrá una mejor visión de la predicción y comportamiento de las SEPRX.

Bibliografía

- [1] M.C. Andrews, F.D. McDaniel, J.L. Duggan, P.D. Miller, P.L. Pepmiller, H. E. Krause, and G. Lapicki. *Phys. Rev. A*, 36 (1987) 3699.
- [2] D. Bhattacharya, M. Sarkar, M. B. Chatterjee, P. Sen, G. Kuri, D. P. Mahapatra and G Lapicki, *Phys. Rev. A* 49 (1994) 6.
- [3] W. Brandt and G. Lapicki, *Phys. Rev., A* 20 (1979) 465.
- [4] W. Brandt and G. Lapicki, *Phys. Rev. A* 23 (1981) 1717.
- [5] I. Bogdanovic, S. Fazinic, and M. Jaksic, *Phys. Rev. A* 56 (1997) 2860.
- [6] J Braziewicz, J Semaniak, T Czyzewski, L Glowacka, M Jaskola, M Haller, R Karschnick, W Kretschmer and D Trautmann, *J. Phys. B* 27 (1994) 1535.
- [7] J. L. Campbell and J.X. Wang, *At. Data and Nucl. Data Tables* 43 (1989) 281.
- [8] J. L. Campbell, *At. Data and Nucl. Data Tables* 85 (2003) 291.
- [9] J. L. Campbell, *At. Data and Nucl. Data Tables* 95 (2009) 115.
- [10] S.J. Cipolla, *Comput. Phys. Commun.*, 182 (2011), 2439.
- [11] O. De Lucio, Tesis de maestría en Ciencias Físicas, Posgrado en Ciencias Físicas, UNAM (México, 2000).
- [12] J. Garcia, *Phys. Rev. A* 1 (1970) 1402.
- [13] I. Gornachev, N. Gluchshenko, I. Ivanov, P. Kharkin, A. Kireyev, U. Koztayeva, A. Kurakhmedov, F Pen'kov, A. Platov, Y. Sambayev, M. Zdorovets, *Nucl Instrum. and Meth. B* 499 (2011) 100.
- [14] M.M. Gugiu, C. Ciortea, D.E. Dumitriu, D. Fluerasu, A. Enulescu, L Piticu, A.C. Scafes, M.D. Pena, *J. Phys.* 56 (2009) 71.
- [15] J. Harada, Tesis de Licenciatura en Ciencias Físicas, Facultad de Ciencias, UNAM (México, 2002).
- [16] G. Lapicki and W. Losonsky, *Phys. Rev. A* 20 (1979) 481.

- [17] G. Lapicki, A. C. Mandal, S. Santra, D. Mitra, M. Sarkar, D. Bhattacharya, P. Sen, L. Sarkadi, and D. Trautmann, *Phys. Rev. A* 72 (2005) 022729.
- [18] G. Lapicki, R. Mehta, J. L. Duggan, P.M. Kocur, J. L. Price, McDaniel, *Phys. Rev. A* 34 (1986) 3813.
- [19] G. Lapicki and J. Miranda, *Nucl. Instr. and Meth. B* 414 (2018) 184.
- [20] G. Lapicki and J. Miranda, *At. Data Nucl. Data Tables* 100 (2014) 651.
- [21] G. Lapicki, G. A. V. Ramana, G. J. Naga Raju, B Seetharami Reddy, S. Bhuloka Reddy, and V. Vijayan, *Phys. Rev. A* 70 (2004) 062718.
- [22] M. Lugo-Licona, J. Miranda, C. M. Romo-Kröger, *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 262 (1994) 391.
- [23] R. Mehta, J. L. Duggan, F. D. McDaniel, M. R. McNeir, Y. C. Yu, D. K. Marble, G. Lapicki, *Phys. Rev. B* 79 (1993) 175.
- [24] R. Mehta, N.K. Puri, Ajay Kumar, A. Kumar, B.P. Mohanty, P. Balouria, L.M. Govil, M.L Garg, T. Nandi, A. Ahmad, G. Lapicki, *Phys. Rev. B* 241 (2005) 63.
- [25] R. Mehta, H. L. Sun, D. K. Marble, J. L. Duggan, F. D. McDaniel and G. Lapicki, (1995). *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 28(7), 1187.
- [26] J. Miranda, *J. Nucl. Phys. Mat. Sci. Rad. Appl.* 4 (2016) 69.
- [27] J. Miranda, *AIP Conf. Proc.* 2160 (2019) 070002.
- [28] Palacios Martínez, Ignacio (dir.), Rosa Alonso Alonso, Mario Cal Varela, Yolanda Calvo Benzie, Francisco Xabier Fernández Polo, Lidia Gómez García, Paula López Rúa, Yonay Rodríguez Rodríguez José Ramón Varela Pérez. 2019. *Diccionario electrónico de enseñanza y aprendizaje de lenguas*. ISBN 978-84-09-10971-5. (Disponible en línea en <https://www.dicenlen.eu/es/diccionario/entradas/prueba-t>, con fecha de acceso 24/05/2022).
- [29] J. E. Prieto, A. Zucchiatti, P. Galán, P. Prieto, *Nucl Instrum. and Meth. B* 406 (2017) 167.
- [30] L. Rodriguez, Tesis Doctoral en Ciencias Físicas, Facultad de Ciencias División de Posgrado, UNAM (México, 1994).
- [31] L. Sarkadi and T. Mukoyama, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 13 (1980) 2255.
- [32] H. Sildahi, S. Fazinic, A. Haidra, I. Zamboni, S. Ouziane, *Nucl Instrum. and Meth. B* 459 (2019) 158.
- [33] E. Batyrbekov, N. Gluchshenko, I. Gorlachev, I. Ivanov, A. Platov, *Nucl. Instrum. Meth. B* 330 (2014) 86.
- [34] D. Bhattacharya, M. Sarkar, M. B. Chatterjee, P. Sen, G. Kuri, D. P. Mahapatra, and G. Lapicki, *J. Phys. B* 14 (1994) L255.

- [35] G. Lapicki and J. Miranda, *At. Data Nucl. Data Tables* 119 (2018) 444.
- [36] M. Lugo, Tesis Doctoral en Ciencias Físicas, Facultad de Ciencias División de Posgrado, UNAM (México, 2004).
- [37] D. H. Madison, E. Merzbacher, Vol. I edited by B. Craseman (Academic Press, New York, 1975).
- [38] E. J. McGuire, *Phys. Rev. A* 5 (1972) 1052.
- [39] J. Miranda, *AIP Conf. Proc.* 1544 (2013) 101.
- [40] H. Paul and J. Muhr, *Phys. Rep., Sect. B* 42 (1989) 346.
- [41] H. Paul, J. Sacher, *At. Data Nucl. Data Tables* 42 (1989) 105.
- [42] J. E. Prieto, A. Zucchiatti, P. Galán, *Phys. Rev B* 410 (2017) 102.
- [43] L. Sarkadi and T. Mukoyama, *Phys. Nucl. Instr. and Meth. B* 61 (1991) 167.
- [44] B. Singh, S. Shehla, J. Puri, *Phys. Chem. Ref. Data* 50 (2021) 043106.