



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MEXICO  
FACULTAD DE CIENCIAS  
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO

00382

6  
2ej

SECCIONES EFICACES DE IONIZACION Y  
PRODUCCION DE RAYOS X EN CAPAS  
ATOMICAS L POR INCIDENCIA DE PROTONES

T E S I S  
QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE  
DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)  
P R E S E N T A:  
LUIS RODRIGUEZ FERNANDEZ

DIRECTORA DE TESIS: DRA. ALICIA MARIA OLIVER GUTIERREZ

MEXICO, D.F.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

1994

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



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

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

Todo el material contenido en esta tesis está 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 mi asesora, la Dra. Alicia Oliver Gutiérrez por la dirección de este trabajo.

Al Dr. Javier Miranda Martín del Campo por todo su apoyo, sin el cual no hubiera sido posible la realización de este trabajo.

A mis sinodales:

Dr. Angel Dacal Alonso,  
Dr. Eugenio Ley Koo,  
Dr. Salvador Cruz Jiménez,  
Dr. José Ignacio Jiménez Mier y Terán,  
Dr. Jorge Rickards Campbell,  
Dr. Federico García Santibáñez Sánchez,

por la revisión de este trabajo y todas sus sugerencias.

Al Sr. Karim López Guzmán, por su gran ayuda en todo el trabajo experimental desarrollado en el Laboratorio del Acelerador Van de Graaff de 0.7 MV.

Al Fis. Juan Carlos Pineda y al Sr. Eustacio Zavala, por su ayuda en el trabajo experimental desarrollado en el Laboratorio del Acelerador Van de Graaff de 5.5 MV.

Al Instituto de Física de la UNAM, donde se desarrolló todo este trabajo de investigación.

A la DGAPA por la beca otorgada para la realización de la tesis.

Al PADEP por su apoyo económico.

Al CONACYT por su apoyo al posgrado de excelencia en el IFUNAM.

Quiero agradecer por su apoyo y amistad a:

Juán Carlos Cheang Wong, Rosa María García Castelán, Francisco Ruiz Sánchez, Cecilia Noguez Garrido, José Luis Ruvalcaba Sil, Victor Macías Medrano, Sergio Fuentes López, Alicia Lara, Ruben Alfaro Molina, Brosveli Domínguez, Alejandro Crespo, Jesús Rodríguez Castro, Porfirio Castellanos Abrego, Antonio González Castillo, Fernando Cruz y Javier Ricardo Pegueros.

Finalmente, quiero agradecer a todas las demás personas, profesores, amigos y compañeros, que me han ayudado de alguna manera a lo largo de estos años y a los cuales me es imposible nombrar debido a que sería necesario otro capítulo más en este trabajo.

A todos, muchas gracias.

## INDICE

Introducción . . . . .	1
Capítulo I, Secciones Eficaces de producción de Rayos X y Ionización; justificación del trabajo . . . . .	3
Capítulo II, Teorías de Ionización de Capas Internas . . . . .	7
2.1 Conceptos Generales . . . . .	7
2.2 Aproximación de Born de Onda Plana (PWBA) . . . . .	9
2.3 Aproximación Semiclásica (SCA) . . . . .	17
2.4 Aproximación de Encuentro Binario (BEA) . . . . .	20
2.5 Aproximación ECPSSR . . . . .	23
2.5.1 Efectos de Ligadura y de Polarización . . . . .	23
2.5.2 Efecto de Deflexión Coulombiana . . . . .	26
2.5.3 Efectos Electrónicos Relativistas . . . . .	28
2.5.4 Efecto por Pérdida de Energía . . . . .	29
2.5.5 Cálculos a partir de la ECPSSR . . . . .	31
2.5.6 Correcciones a la ECPSSR . . . . .	32
Capítulo III, Desarrollo Experimental . . . . .	37
3.1 Dispositivo Experimental . . . . .	37
3.1.1 Cámara de Análisis . . . . .	37
3.1.2 Calibración en Energía del Electroimán Selector . . . . .	39
3.1.3 Calibración del Sistema de Detección . . . . .	39
3.1.3.1 Caracterización del Detector de Si(Li) . . . . .	39
3.1.3.2 Eficiencia Experimental del Detector de Si(Li) . . . . .	42
3.1.3.3 Determinación de Tiempos Muertos . . . . .	48
3.2 Secciones de Producción de Rayos X L . . . . .	50
3.2.1 Método para Medir Secciones de Producción de Rayos X . . . . .	50
3.2.2 Medición de las Secciones de Producción de Rayos X L . . . . .	51
3.3 Secciones de Ionización de Capas L . . . . .	54
3.3.1 Métodos para Determinar Secciones de Ionización de Capas L . . . . .	54
3.3.2 Determinación de las Secciones de Ionización de Capas L . . . . .	56
3.3.2.1 Parámetros Atómicos de las Capas L . . . . .	54
3.3.2.2 Cálculos de las Secciones de Ionización de Capas L . . . . .	58

Capítulo IV, Comparaciones y Ajustes Semiempíricos . . . . .	59
4.1 Comparación de las Secciones de Producción de Rayos X L . . . . .	59
4.2 Comparación de los Resultados de las Secciones de Ionización . . . . .	72
4.3 Compilación de Secciones de Ionización y de Producción de Rayos X L para Capas L . . . . .	77
4.4 Ajustes Semiempíricos . . . . .	103
Capítulo V, Conclusiones . . . . .	115
Apéndice A . . . . .	119
Apéndice B . . . . .	121
Apéndice C . . . . .	122
Apéndice D . . . . .	130
Referencias . . . . .	138

## INTRODUCCION

El estudio de la ionización atómica en las capas internas y la producción de rayos X por incidencia de protones tienen importancia tanto para comprobar la validez de modelos teóricos, así como también en aplicaciones de microanálisis elemental por PIXE. Para el caso de las capas atómicas L no se cuenta con una descripción completa de estos procesos en forma teórica o semiempírica, especialmente a bajas energías. En este trabajo se presenta el estudio experimental realizado en la medición de secciones de producción de rayos X y de ionización en capas atómicas L, que son inducidos por la incidencia de protones con energías entre 400 y 700 keV, en los elementos Te, Cs, Ba La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Ho, Er, Tm, Yb y Lu. De esta manera se contribuye a aumentar el número existente de estas medidas, que actualmente es escaso para poder sacar conclusiones definitivas sobre el comportamiento de estas secciones eficaces. Además, este estudio contempla el ajuste de curvas semiempíricas para las secciones eficaces de producción de rayos X  $L_{\alpha}$  y las de ionización de las subcapas  $L_1$ ,  $L_2$  y  $L_3$  por incidencia de protones, siguiendo ideas análogas a las propuestas por Paul y Muhr [PAUH86]. Estos ajustes semiempíricos se hacen con la finalidad de poder contar con expresiones sencillas del comportamiento de estas secciones, que además se puedan aplicar fácilmente. Para llevar al cabo este ajuste, se procedió a efectuar una compilación de los valores experimentales de estas secciones que han sido reportadas por otros autores en la literatura. Las curvas semiempíricas se obtuvieron a partir de ajustes a los valores experimentales normalizados con respecto al modelo teórico ECPSSR [BRAN81]. Se empleó este modelo teórico para normalizar porque es el que se presenta como el más ventajoso de utilizar, pues en general es el más exacto en la ionización de capas atómicas internas, además de que considera varios fenómenos involucrados en el proceso de ionización y es sencillo de calcular. Los ajustes obtenidos resultan adecuados para las regiones de alta energía y elementos no muy pesados. A menores energías la dispersión en las medidas reportadas no permite obtener un buen ajuste de estas funciones. Se concluye entre otras cosas, que el estudio de estas secciones debe de continuar especialmente a bajas energías y en elementos pesados.

La estructura de este trabajo es de la siguiente manera: En el capítulo primero se

dan las ideas generales sobre las secciones de ionización y de producción de rayos X por incidencia de iones, así como también las principales razones que motivaron la realización de este estudio. En el segundo se muestran los principales modelos teóricos existentes sobre secciones de ionización en capas atómicas internas. En el tercero se describe el dispositivo experimental empleado para la medición de secciones de producción de rayos X y los métodos seguidos para obtener las secciones de ionización. En el capítulo cuarto se efectúa la comparación con respecto a la teoría ECPSSR de los resultados obtenidos para estas secciones. Además se comparan las secciones eficaces de ionización obtenidas utilizando diferentes métodos para su determinación. También se muestra en este capítulo la compilación de medidas de estas secciones reportadas por otros autores y los ajustes semiempíricos realizados a éstas. Finalmente en el capítulo quinto, se muestran las conclusiones más importantes, con base en los resultados precedentes.

## CAPITULO I

### SECCIONES EFICACES DE PRODUCCION DE RAYOS X Y IONIZACION; JUSTIFICACION DEL TRABAJO

El proceso de producción de rayos X inducidos por la incidencia de iones puede entenderse de una manera simplificada:

Inicialmente, consideraremos la descripción de un átomo en la aproximación de partícula independiente, donde se supone que cada electrón se mueve en el potencial coulombiano del núcleo y en el campo electrostático promedio de los demás electrones. Además se supone que este campo promedio es esféricamente simétrico. En esta aproximación es entonces posible asignar a cada electrón un orbital o nivel, caracterizado por un número cuántico principal  $n$  y números cuánticos  $j$  y  $m$ , en analogía con los estados hidrogenoides. Los niveles con números cuánticos principales  $n = 1, 2, 3, \dots$  suelen expresarse respectivamente por las letras K, L, M, etc.

Dentro de esta aproximación se considerará un átomo neutro, donde sus electrones se encuentran distribuidos entre los diferentes niveles o capas, de tal forma que el átomo se encuentre en el estado de mínima energía. En la colisión de un ion con este átomo, uno de los procesos posibles es el de la creación de una vacancia en una de las capas internas del átomo por la expulsión de uno de sus electrones. Esta vacancia en el átomo ionizado ocasiona que se encuentre en un estado de equilibrio inestable. La forma en que el átomo ionizado alcanza un estado de mínima energía es por medio de la transición de un electrón de alguna capa superior a la capa en la que se encuentra la vacancia. La probabilidad de que ocurra alguna de las diferentes transiciones posibles está determinada por las reglas de selección atómicas. Además, estas transiciones estarán acompañadas por la emisión de un fotón de rayos X o por un electrón Auger, siendo la energía de éstos característica del elemento atómico y de los niveles entre los cuales ocurra esta transición. De esta manera los rayos X o electrones Auger producidos se denotarán en términos de las capas K, L, M, ... dependiendo del nivel donde se haya originado la vacancia.

La relación entre la probabilidad de producir rayos X y la de ionizar a la capa K es:

$$\sigma_K^X = \omega_K \sigma_K, \quad (1.1)$$

donde  $\sigma_K^X$  y  $\sigma_K$  son respectivamente la secciones eficaces de producción de rayos X y de ionización de la capa K, las cuales nos indican la probabilidad de que ocurran estos eventos. La  $\omega_K$  es la fluorescencia de la capa K, que indica la probabilidad de que durante la transición electrónica en el átomo ionizado se produzca la emisión de un fotón de rayos X.

Para la producción de rayos X K esta descripción es suficiente, pero para las capas L y superiores la descripción se complica debido a que cada capa al estar dividida en varios subniveles se presentan transiciones no radiativas entre estos subniveles. Esto ocasiona la necesidad de introducir en los modelos de producción de rayos X procesos atómicos más finos y difíciles de determinar experimentalmente. Las transiciones no radiativas juegan un papel muy importante en la asociación de las secciones de ionización con las de producción de rayos X. Esta asociación se logra por medio de los coeficientes de Coster-Krönig [BAMW72], que indican la probabilidad de que ocurra cada una de estas transiciones no radiativas. Tawara *et al.* [TAWH74] dan la relación existente entre las secciones de ionización y las de producción de rayos X de las diferentes líneas L, a través de las fluorescencias y los coeficientes Coster-Krönig, (ver la sección 3.3.1).

Además, durante la colisión los fenómenos se complican aun más cuando el ion incidente captura un electrón dando como resultado una interacción todavía más compleja.

El conocimiento experimental de las secciones de ionización y de producción de rayos X tiene importancia fundamental en cuestiones teóricas, para poder determinar los mejores modelos que describen estos fenómenos, así como sus mejores intervalos de validez. Los principales modelos teóricos que explican la ionización de capas internas son: la Aproximación de Born de Onda Plana [BETH30, MERE58], (Plane Wave Born Approximation, PWBA); la Aproximación Semiclásica [BANG59], (Semiclasical Approximation, SCA); Aproximación de Encuentro Binario [GARJ70], (Binary Encounter Approximation, BEA); y el modelo ECPSSR [BRAN81], (Perturbed Stationary States, PSS, with increase atomic binding, Coulomb deflection, C, Energy loss, E, and Relativistic corrections, R). Además,

existen variantes de estos modelos, que incorporan correcciones u otros efectos no considerados en un principio. La descripción de estos modelos se efectúa en el siguiente capítulo.

Todos estos modelos describen bien el fenómeno para iones incidentes ligeros de alta energía (1.5 a 3.5 MeV), pero presentan fallas a bajas energías. De todos ellos, el que presenta en general los mejores resultados es el ECPSSR, pues da los intervalos más grandes dentro de los cuales el modelo concuerda en forma razonable con los resultados experimentales para las capa K y L, así como también tiene la ventaja de que es simple de calcular.

Las secciones de producción de rayos X son fundamentales en las aplicaciones de microanálisis elemental por PIXE [JOHS76, JOHS88]. Esta técnica por su sensibilidad para registrar pequeñas concentraciones de elementos es ampliamente utilizada en análisis de contaminantes, además de muestras en general. Para poder determinar cuantitativamente la concentración de elementos en forma exacta y precisa es necesario conocer muy bien las secciones de producción de rayos X a diferentes energías de incidencia. Las secciones de producción de rayos X K son utilizadas principalmente en la medición de concentraciones de elementos con  $11 < Z < 40$ , en tanto que las secciones L lo son para elementos con  $Z > 40$  y finalmente las M para  $Z > 70$ . De esta forma se tiene que las secciones de rayos X L son importantes en el análisis de muestras que contengan tierras raras, las cuales se encuentran presentes en algunos tipos de muestras geológicas, o en cerámicas superconductoras, entre otros, por mencionar sólo algunos ejemplos.

Por otro lado, a energías de incidencia menores de un 1 MeV, la sección eficaz de ionización tiene fuertes variaciones con cambios en la energía del proyectil. Aprovechando esta propiedad de las secciones eficaces de ionización se ha mostrado que PIXE a bajas energías, utilizado apropiadamente, puede ser un método confiable en la medición de espesores de películas delgadas [OLIA87, MIRJ88, RICJ90]. Estos estudios pueden llegar a permitir en algunos casos, conocer perfiles de concentración en muestras utilizando PIXE. El inconveniente que presenta el uso de PIXE a bajas energías es la carencia de una expresión confiable para las secciones de ionización de capas L [RICJ90].

El Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México, cuenta con un acelerador Van de Graaff de 0.7 MV, de baja energía, con el cual se efectúan estudios de análisis por PIXE. Con este acelerador se pueden aprovechar las propiedades mencionadas

de la sección de ionización a bajas energías, pero para lograr esto, se requiere de estudios sobre las secciones de producción de rayos X y de ionización, especialmente para las capas L, como se indica a continuación.

Las secciones eficaces correspondientes a la capa K han sido las más estudiadas experimentalmente. De esta manera se cuenta con un conjunto grande de medidas de estas secciones, lo cual ha permitido comprender su comportamiento claramente para iones ligeros, como protones o helio, aunque a bajas energías de incidencia se presentan algunos problemas de inconsistencia [PAUH82, PAUH86]. El modelo ECPSSR predice bien estas secciones de la capa K para iones ligeros, aunque a muy bajas energías se presentan discrepancias, que requieren de más estudios. Todo este conocimiento ha permitido poder determinar secciones eficaces de ionización de referencia para la capa K [PAUH89].

Por otra parte, las secciones de ionización y producción de las capas L han sido menos estudiadas debido a su naturaleza más complicada. Pero a su vez, actualmente revisten mayor interés en cuestiones teóricas, que la capa K, porque involucran fenómenos atómicos finos, los cuales también es necesario estudiar más y que pueden ser determinantes en la descripción de los fenómenos en las subcapas internas del átomo y en la comprensión de las colisiones ion-átomo.

Debido a la pequeña estadística en el conjunto de medidas de secciones L reportadas con las que se cuenta y a la dispersión de los resultados, no ha permitido poder establecer perfectamente el comportamiento de estas secciones, especialmente a bajas energías donde se presenta una dispersión muy grande e inconsistente. Así pues, se requiere todavía de muchas medidas de las secciones L, para poder llegar a presentar secciones de referencia.

Es por todos los motivos anteriormente expuestos de donde surgió la motivación principal del presente estudio sobre las secciones eficaces de ionización y de producción de rayos X L por incidencia de protones, que se expone en los siguientes capítulos. Todo este estudio con la finalidad de contribuir en el número de medidas realizadas de estas secciones a bajas energías y con la idea de intentar dar una expresión semiempírica confiable de éstas, que pueda ser aplicada en estudios de análisis por PIXE.

## CAPITULO II

### TEORIAS DE IONIZACION DE CAPAS INTERNAS

#### 2.1 CONCEPTOS GENERALES.

En este capítulo se muestran las teorías más importantes en torno a las colisiones ion-átomo que involucran la ionización por la creación de vacancias en las capas atómicas internas. Consideraremos la colisión donde el ion es un proyectil que choca contra un átomo en reposo. Las propiedades características del proyectil serán denotadas con el subíndice 1 y las del átomo con el subíndice 2. Las colisiones ion-átomo dependen de muchos factores que pueden dividirse principalmente en el tipo de proyectil y en la velocidad de la colisión. Cuando los proyectiles son partículas elementales cargadas con masas mucho mayores que la del electrón y cuando  $Z_1 \ll Z_2$ , donde las  $Z_i$  son los números atómicos del ion y del átomo, en la colisión domina la interacción coulombiana a través de la ionización directa, o por la captura de un electrón a un estado no ocupado del ion. Cuando la colisión es con un ion que no tiene electrones orbitándolo la interacción coulombiana domina, en tanto que cuando tiene electrones orbitándolo el potencial de interacción es más complicado. De la velocidad de la colisión dependen mucho estos procesos de ionización. A velocidades pequeñas y  $Z_1$  grandes, es muy probable que el ion capture electrones, por lo que ahora la colisión no es con un proyectil que se pueda considerar puntual, sino que tiene una estructura. Los modelos teóricos que se muestran corresponden a procesos por ionización directa, que son los que dominan principalmente en las colisiones con protones.

Antes de comenzar la descripción de los modelos teóricos es conveniente introducir la notación y definir las variables fundamentales que se utilizan en ellos. Las diferentes subcapas del átomo se denotaran por  $s = K, L_i$  donde  $i = 1, 2, \text{ o } 3$ . Alternativamente, estas capas internas se pueden describir por medio del conjunto de números cuánticos  $(n, l, j)$ , como  $(1, 0, \frac{1}{2})$ ,  $(2, 0, \frac{1}{2})$ ,  $(2, 1, \frac{1}{2})$  o  $(2, 1, \frac{3}{2})$ . La energía del proyectil es  $E_1 = \frac{1}{2}m_1v_1^2$ , donde  $m_1$  y  $v_1$  es la masa y la velocidad inicial del proyectil. La energía de ionización experimental de la subcapa  $s$  del átomo se denota por  $\hbar\omega_{2s}$ , donde  $\omega_{2s}$  se puede considerar

como una frecuencia equivalente del electrón en la subcapa s. La consideración de los efectos de apantallamiento del núcleo del átomo por los electrones, suele determinarse a través de una carga nuclear efectiva. Es costumbre y aparentemente adecuado determinar el efecto de apantallamiento de las capas K y L restando al número atómico 0.3 y 4.15 para obtener así las cargas nucleares efectivas de estas capas respectivamente. Así, el número atómico efectivo  $Z_{2s}$  de las subcapa s, se define como  $Z_{2K} = Z_2 - 0.3$  y  $Z_{2L} = Z_2 - 4.15$ . Para generalidad de los modelos teóricos de ionización suele ser conveniente trabajar con variables adimensionales, normalizadas con el átomo hidrogenoide. Se define el radio hidrogenoide efectivo como  $a_{2s} = n^2 a_0 / Z_{2s}$ , donde  $a_0$  es el radio de Bohr y n es el número cuántico principal de la subcapa s. La velocidad hidrogenoide del electrón en el átomo es  $v_{2s} = Z_{2s} v_0 / n$ , donde  $v_0$  es la velocidad de Bohr. Se define la energía reducida  $\theta_s$  de la subcapa s como:

$$\theta_s = \frac{n^2 \hbar \omega_{2s}}{Z_{2s} R_\infty} \quad (2.1)$$

donde  $R_\infty$  es la constante de Rydberg, dada en términos atómicos como  $R_\infty = m_e e^4 / 2 \hbar^2 = 1/2 \text{ u.a.} = 13.6 \text{ eV}$ , donde  $m_e$  es la masa del electrón y  $e$  la carga elemental. Para la capa K se tiene que  $\theta_K$  crece con el número atómico, desde 0.6 en elementos ligeros a 1.0 en los pesados. Para la capa L los valores de  $\theta_L$  varían de 0.4 a 0.8. Las secciones de ionización dependen del mínimo momento transferido por el proyectil durante la colisión,  $\hbar q_{0s}$ . Este momento se puede determinar utilizando la Ec. (2.21), que se muestra en la siguiente sección. Considerando que  $E_1 \gg \hbar \omega_{2s}$ , se tiene que  $\hbar q_{0s} \approx \hbar \omega_{2s} / v_1$ . Se define también la velocidad reducida entre la del proyectil y la del electrón del átomo como:

$$\xi_s = \frac{v_1}{\frac{1}{2} \theta_s v_{2s}} = \frac{n}{q_{0s} a_{2s}} \quad (2.2)$$

Esta variable es importante porque nos permite relacionar el tiempo atómico característico del átomo  $n/\omega_{2s}$  y el tiempo característico de la colisión  $a_{2s}/v_1$ . De esta manera, puede distinguirse entre colisiones rápidas si  $\xi_s > 1$  y las lentas cuando  $\xi_s < 1$ . Por último, en muchas ocasiones se encuentra que la ionización de capas internas se describe en términos de la variable reducida:

$$\eta_s = \frac{v_1^2}{Z_{2s}^2 v_0^2} = \left( \frac{\theta_s \xi_s}{2n} \right)^2, \quad (2.3)$$

la cual es proporcional a la energía del proyectil  $E_1$ .

## 2.2 APROXIMACION DE BORN DE ONDA PLANA (PWBA).

La descripción de este modelo se puede efectuar por medio de la teoría de perturbaciones. Suponiendo que se tiene un sistema cuántico sometido a la interacción con un potencial  $V$ , el hamiltoniano  $H$  del sistema queda determinado por:

$$H = H_0 + V. \quad (2.4)$$

donde  $H_0$  es el hamiltoniano no perturbado del sistema. Entonces, a partir de la teoría de perturbaciones a primer orden, se tiene que la probabilidad por unidad de tiempo de que el sistema sufra una transición del estado inicial  $\nu_0$  a los estados en el continuo entre  $\nu$  y  $\nu + d\nu$  esta dada por [LANDAU3]:

$$dP_{\nu_0\nu} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\nu\nu_0}|^2 \delta(E_\nu - E_{\nu_0}) d\nu \quad (2.5)$$

donde  $V_{\nu\nu_0} = \langle \nu | V | \nu_0 \rangle$  y las  $E$  son las energías de cada uno de los estados del sistema.

La aproximación anterior se puede aplicar al estudio de la colisión de una partícula que incide con un momento inicial  $\mathbf{p}_0$  contra un átomo y que es dispersada con un momento final  $\mathbf{p}$ . Este estudio por simplicidad, se efectúa con respecto a un sistema de referencia en el centro de masa. Si la colisión es inelástica habrá un cambio en la energía del proyectil y del átomo, de tal manera que las energías inicial y final del sistema en conjunto serán  $E_0 = p_0^2/2m + E_0$  y  $E = p^2/2m + E_n$ , donde  $E_0$  y  $E_n$  son las energías electrónicas inicial y final del átomo, y  $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  es la masa reducida del sistema. Aplicando en este caso la Ec. (2.5) en el espacio de momentos y sustituyendo  $E_\nu - E_{\nu_0}$  por la diferencia  $E - E_0 = (p^2 - p_0^2)/2m + E_n - E_0$  de las energías del sistema antes y después de la interacción, la probabilidad por unidad de tiempo de que esta transición tenga lugar es:

$$dP_{\mathbf{p}E_n\mathbf{p}_0E_0} = \frac{4\pi m}{\hbar} |V_{\mathbf{p}E_n\mathbf{p}_0E_0}|^2 \delta(p - p_0 + 2m(E - E_0)) dp_x dp_y dp_z \quad (2.6)$$

donde ahora:

$$V_{\mathbf{p}E_n\mathbf{p}_0E_0} = \int \int \varphi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{R}) \Psi_n^*(\mathbf{r}) V \varphi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{R}) \Psi_0(\mathbf{r}) d^3 r d^3 R \quad (2.7)$$

donde las  $\varphi$ 's son las funciones de onda del proyectil y las  $\Psi$ 's son de los electrones del átomo, de los estados iniciales y finales, junto con sus respectivos elementos de volumen  $d^3 R$  y  $d^3 r$  en los espacios de configuración del proyectil y de los electrones.

Para determinar la sección eficaz de dispersión,  $d\sigma_n$ , del proyectil cuando el átomo pasa al estado  $n$ , es conveniente pasar a coordenadas esféricas en el espacio de momentos,  $dp_x dp_y dp_z = p^2 \sin\vartheta dp d\vartheta d\phi = p^2 dp d\Omega$ , e integrar con respecto a la magnitud del momento. Aquí,  $\vartheta$  es el ángulo de dispersión del proyectil. Las funciones de estado inicial y final de la partícula se pueden expresar como ondas planas:

$$\varphi_{\mathbf{p}_0} = \sqrt{\frac{m}{p_0}} e^{i\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{R}/\hbar}, \quad \varphi_{\mathbf{p}} = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}/\hbar} \quad (2.8)$$

donde se ha normalizado la función inicial de tal manera que la densidad de flujo incidente  $\mathbf{j}$  sea igual a la unidad y la final utilizando la normalización de Dirac. De esta manera tenemos que  $dP_{\mathbf{p}E_n \mathbf{p}_0 E_0} = d\sigma_n$ , con lo cual la sección eficaz de dispersión queda como:

$$d\sigma_n = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{p}{p_0} \left| \int \int e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} V \Psi_n^* \Psi_0 d^3 r d^3 R \right|^2 d\Omega \quad (2.9)$$

donde  $p^2 = p_0^2 - 2mE_n + 2mE_0$  y  $\mathbf{q} = (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)/\hbar$ .

La utilización de ondas planas para describir una colisión en la aproximación a primer orden se deben a M. Born (1926), de donde viene el nombre de la aproximación que estamos utilizando.

En el caso de que el proyectil sea un ion con carga  $Z_1 e$  y suponiendo que la interacción eléctrica sea la dominante durante la colisión, de tal manera que podamos despreciar otros tipos de interacción, el potencial  $V$  que describe esta colisión es:

$$V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} - \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{Z_1 e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_j|}. \quad (2.10)$$

Al sustituir este potencial en la Ec. (2.9), el término que contiene la interacción entre el núcleo y el proyectil, no interviene porque se anula al integrar con respecto a las  $r$ 's, debido a la ortogonalidad de las funciones de onda de los electrones del átomo. De esta manera:

$$d\sigma_n = \frac{Z_1^2 m^2 e^4}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{p}{p_0} \left| \sum_{j=1}^{Z_2} \int \int \frac{e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_j|} \Psi_n^* \Psi_0 d^3 r d^3 R \right|^2 d\Omega. \quad (2.11)$$

La integración con respecto a  $d^3R$  se realiza sobre todo el espacio, donde considerando que esta integral es igual a la transformada de Fourier del potencial electrostático y haciendo uso de la ecuación de Poisson, la sección eficaz queda como:

$$d\sigma_n = \frac{4m^2 e^4 Z_1^2}{\hbar^4 q^4} \frac{p}{p_0} \left| \sum_{j=1}^{Z_2} \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \Psi_n^*(\mathbf{r}) \Psi_0(\mathbf{r}) d^3r \right|^2 d\Omega. \quad (2.12)$$

Para el estudio de la ionización es más conveniente trabajar con la magnitud del momento transferido en la colisión. Tomando en cuenta que  $\mathbf{q}$  tiene simetría azimutal,  $\hbar q dq = pp_0 \sin\vartheta d\vartheta$  y  $v_1 = p_0/m$ , entonces al integrar con respecto a  $dq$  y  $d\phi$ , tendremos la probabilidad de que la partícula incidente en la colisión con un átomo sufra un cambio en el momento entre  $q$  y  $q + dq$  y que el átomo pase del estado  $E_0$  al  $E_n$ , está dada por:

$$d\sigma_n = 8\pi \left( \frac{Z_1 e^2}{\hbar v_0} \right)^2 \frac{dq}{q^3} |F_{n0}(q)|^2. \quad (2.13)$$

donde

$$F_{n0}(q) = \sum_{j=1}^{Z_2} \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \Psi_n^* \Psi_0 d^3r. \quad (2.14)$$

es el factor de forma atómico inelástico para el potencial Ec. (2.10).

El cálculo del factor de forma se puede efectuar utilizando funciones de estado de los electrones del átomo en la aproximación de partícula independiente y potencial central, de tal manera que

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\dots\psi_{Z_2}(r_{Z_2}). \quad (2.15)$$

Si suponemos que durante la colisión sólo va a cambiar el estado  $\psi_s$  de uno de los electrones de la subcapa  $s$ , en tanto que los demás permanecen invariantes, entonces el factor de forma se reduce a:

$$F_{ns}(q) = \int \psi_n^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \psi_s(\mathbf{r}) d^3r, \quad (2.16)$$

donde ahora la  $\mathbf{r}$  corresponde a las coordenadas del electrón expulsado.

Continuando con el cálculo de la sección de ionización de un átomo por la colisión con un ion, es conveniente definir una sección eficaz de transferencia de energía para el electrón

de la subcapa  $s$ , entre  $\epsilon$  y  $\epsilon + d\epsilon$ , como:

$$d\sigma_{\epsilon s} = 8\pi(2j_2 + 1) \left( \frac{Z_1 e^2}{\hbar v_1} \right)^2 \frac{dq}{q^3} |F_{\epsilon s}(q)|^2 d\epsilon, \quad (2.17)$$

donde  $j_2$  es el momento angular total de la subcapa  $s$ . El término  $2j_2 + 1$  se agrega para tomar en cuenta la degeneración debida a todos los electrones que se encuentran en la subcapa  $s$ . La energía del electrón expulsado será entonces:  $p_e^2/2m_e + \hbar\omega_{2s}$ , donde  $p_e$  es el momento final del electrón.

Con la finalidad de generalizar el cálculo de las secciones de ionización sin importar el elemento que se esté utilizando como blanco, se introducen las cantidades adimensionales  $W$ ,  $k$  y  $Q$ , dadas por:

$$\epsilon = Z_s^2 R_\infty W, \quad Q = a_{2s}^2 q^2 \quad \text{y} \quad k = a_{2s} p_e / \hbar. \quad (2.18)$$

La sección se transforma a estas nuevas variables, tomando la definición de  $|F_{\epsilon s}(q)|^2 d\epsilon = |F_{W s}(Q)|^2 dW$ . Luego la sección de ionización total de la subcapa  $s$  se obtiene integrando sobre todos los posibles momentos y energías transferidas por el proyectil en la colisión. Así, la sección de ionización se expresa como:

$$\sigma_s = (2j_2 + 1) \frac{4\pi Z_1^2 a_{2s}^2}{Z_{2s}^2 \eta_s} f_s, \quad (2.19)$$

donde

$$f_s = \int_{W_{min}}^{W_{max}} dW \int_{Q_{min}}^{Q_{max}} \frac{dQ}{Q^2} |F_{W s}(Q)|^2. \quad (2.20)$$

Los límites de integración de  $Q$  se obtienen a partir de:

$$\hbar q_{min} = \sqrt{2mE_1} - \sqrt{2m(E_1 - \epsilon)}, \quad (2.21a)$$

$$\hbar q_{max} = \sqrt{2mE_1} + \sqrt{2m(E_1 - \epsilon)}. \quad (2.21b)$$

Los límites para  $W$  se obtienen a partir de  $\epsilon_{min} = \hbar\omega_{2s}$  y  $\epsilon_{max} = E_1$  si se considera el caso en el cual el proyectil le cede toda su energía al electrón. De esta manera los valores máximos y mínimos de  $Q$  y  $W$  son:

$$Q_{min} = \frac{m^2}{m_e} \eta_s \left[ 1 - \left( 1 - \left( \frac{W m_e}{m \eta_s} \right)^{1/2} \right)^2 \right], \quad (2.22a)$$

$$Q_{max} = \frac{m^2}{m_e} \eta_s \left[ 1 + \left( 1 - \left( \frac{W m_e}{m \eta_s} \right)^{1/2} \right)^2 \right], \quad (2.22b)$$

$$W_{min} = \frac{\hbar \omega_{2s}}{Z_{2s}^2 R_\infty} = \frac{\theta_s}{n^2} \quad (2.22c)$$

y

$$W_{max} = \frac{\epsilon_{max}}{Z_{2s}^2 R_\infty} = \frac{m}{m_e} \eta_s \quad (2.22d)$$

Para fines prácticos generalmente puede considerarse  $W_{max} = \infty$ .

De esta manera se obtiene que la función  $f_s$  depende de las variables  $\theta_s$  y  $\eta_s$ , de tal manera que la sección de ionización suele expresarse como:

$$\sigma_s = \sigma_{0s} f_s(\eta_s, \theta_s) / \eta_s = \sigma_{0s} F(\xi_s, \theta_s), \quad (2.23)$$

donde

$$\sigma_{0s} = 4\pi(2j_2 + 1) \frac{Z_1^2 a_{2s}^2}{Z_{2s}^2}.$$

El factor de forma  $F_{W_s}(Q)$ , puede calcularse analíticamente utilizando funciones de onda hidrogenoides para el electrón inicialmente en una capa interna del átomo y para el electrón expulsado utilizando la función de onda de una partícula libre bajo un potencial Coulombiano dado por [LANDAU3, MCDO70]:

$$\psi^- = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{\pi/2k} \Gamma(1 + \frac{i}{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} {}_1F_1(-i/k, 1, -i(kr + \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})), \quad (2.24)$$

donde  ${}_1F_1$  es la función hipergeométrica confluyente. De esta manera Bethe [BETH30] calcula el factor de forma para la capa K:

$$|F_{WK}(Q)|^2 = \frac{2^7}{1 - e^{-2\pi/k}} Q \left( \frac{Q + \frac{1}{3}k^2 + \frac{1}{3}}{[(Q - k^2 + 1)^2 + 4k^2]^3} \right) \exp\left[-\frac{2}{k} \arctan \frac{2k}{Q - k^2 + 1}\right], \quad (2.25)$$

donde  $W = k^2 + 1$ . Walske [WALM56] lo determina para la capa L total:

$$|F_{WL}(Q)|^2 = \frac{2^4}{1 - e^{-2\pi/k}} \cdot \frac{Q[Q^3 - (\frac{5}{3}k^2 + \frac{11}{12})Q^2 + (\frac{1}{3}k^4 + \frac{3}{2}k^2 + \frac{65}{48})Q + (\frac{1}{3}k^6 + \frac{3}{4}k^4 + \frac{23}{48}k^2 + \frac{5}{64})]}{[(Q - k^2 + \frac{1}{4})^2 + k^2]^4} \exp\left(-\frac{2}{k} \arctan \frac{k}{Q - k^2 + \frac{1}{4}}\right), \quad (2.26)$$

donde  $W = k^2 + \frac{1}{4}$ . Finalmente, Choi [CHOI73] presenta el factor de forma para cada una de las subcapas  $L_i$ :

$$|F_{WL_1}(Q)|^2 = A(Q, k) \left[ Q^5 - \left( \frac{11}{3}k^2 + \frac{8}{3} \right) Q^4 + \left( \frac{14}{3}k^4 + 6k^2 + \frac{41}{24} \right) Q^3 - \right. \\ \left. - \left( 2k^6 + \frac{10}{3}k^4 + \frac{31}{34}k^2 - \frac{5}{48} \right) Q^2 - \left( \frac{1}{3}k^8 + \frac{2}{3}k^6 + \frac{41}{120}k^4 - \frac{47}{3840} \right) Q + \right. \\ \left. + \left( \frac{1}{3}k^{10} + \frac{2}{3}k^8 + \frac{11}{24}k^6 + \frac{7}{48}k^4 + \frac{17}{768}k^2 + \frac{1}{768} \right) \right], \quad (2.27)$$

$$|F_{WL_2}(Q)|^2 + |F_{WL_3}(Q)|^2 = A(Q, k) \left[ \frac{9}{4}Q^4 - \left( 3k^2 + \frac{3}{4} \right) Q^3 - \right. \\ \left. - \left( \frac{1}{2}k^4 + \frac{3}{4}k^2 - \frac{19}{32} \right) Q^2 + \left( k^6 + \frac{113}{60}k^4 + \frac{41}{48}k^2 + \frac{107}{960} \right) Q + \right. \\ \left. + \left( \frac{1}{4}k^8 + \frac{5}{12}k^6 + \frac{7}{32}k^4 + \frac{3}{64}k^2 + \frac{11}{3072} \right) \right], \quad (2.28)$$

y donde

$$A(Q, k) = \frac{2^4 Q}{(1 - e^{-2\pi/k})} \frac{1}{\left[ \left( Q - k^2 + \frac{1}{4} \right)^2 + k^2 \right]^5} \exp \left[ -\frac{2}{k} \arctan \frac{k}{\left( Q - k^2 + \frac{1}{4} \right)} \right], \quad (2.29)$$

donde  $W = k^2 + \frac{1}{4}$ . También Choi [CHOI73] presenta expresiones del factor de forma para la capa M y cada una de sus respectivas subcapas.

Tablas de valores para las secciones de ionización utilizando la PWBA con los factores de forma anteriores para las capas K y L han sido dadas por: Khandelwal *et al.* [KHAG69], Choi *et al.* [CHOI73b] y por Benka y Kropf [BENO78] utilizando este último los límites exactos de integración en W. Cálculos para las secciones de la capas M son reportados por Johnson *et al.* [JOHD79]. Choi [CHOI71] muestra el cálculo de las secciones de ionización utilizando funciones relativistas de Dirac para el átomo de hidrógeno, pero sólo da resultados numéricos y gráficos para unos pocos elementos. También, se han efectuado cálculos empleando el método de Hartree-Fock-Slater [CHOI75, MANS73] y el relativista de Hartree-Fock-Slater [JAKA84] para algunos elementos solamente. En estos casos se encuentra que los resultados se desvían de los hidrogenoides cuando la velocidad del proyectil se aproxima a la velocidad orbital del electrón.

La PWBA resulta adecuada para describir la ionización a grandes energías, pero sus predicciones son mayores que las secciones medidas a bajas energías. Una de las causas

por la cual se de esta desviación de los resultados experimentales es debida a que en este modelo no se toma en cuenta la deflexión del proyectil debido a la interacción con el núcleo del átomo, (obsérvese que al obtener la Ec. (2.11) se eliminó la dependencia en el potencial debido al núcleo). A grandes velocidades del ion su trayectoria al chocar con un átomo es prácticamente una línea recta y entonces la PWBA describe bien el proceso. A bajas velocidades hay una deflexión Coulombiana en la trayectoria del proyectil, que a su vez produce una disminución en su velocidad al pasar cerca del núcleo. Otra causa es el hecho de que el ion se considera como una partícula puntual, lo cual no es cierto, especialmente a bajas energías.

Existen correcciones directas sobre la PWBA que tienen la finalidad de considerar efectos que no fueron tomados en cuenta inicialmente. Ishii *et al.* [ISHK74], discuten el hecho de que definir la variable  $\theta_s$ , Ec. (2.1), dividiendo la energía de ionización real entre la energía hidrogenoide no relativista del electrón de la subcapa  $s$ , sólo se está considerando el efecto de apantallamiento del núcleo debido a las capas internas y no toma en cuenta el apantallamiento debido a las capas externas, el cual debe de producir una disminución en la energía de ligadura del electrón. Entonces, tomando la energía de ligadura hidrogenoide relativista:

$$I_s = \frac{Z_{2s}}{n^2} \left( 1 + \frac{\alpha^2 Z_{2s}}{n} \left( \frac{1}{j_2 + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right), \quad (2.30)$$

y el efecto de los electrones de las capas externas, define el nuevo parámetro  $\theta_s^R$  como:

$$\theta_s^R = \theta_s - \frac{n^2}{Z_{2s} R_\infty} \left( \frac{Z_{2s}}{n^2} \left( 1 + \frac{\alpha^2 Z_{2s}}{n} \left( \frac{1}{j_2 + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right) - \frac{Z_{2s} R_\infty}{n^2} \right). \quad (2.31)$$

De esta manera, la corrección por efecto de ligadura del electrón (B) y la consideración relativista (R), se obtienen cambiando en la PWBA el valor de  $\theta_s$  por el de  $\theta_s^R$ . Esta aproximación se le conoce como PWBABR. Debido a que esta corrección resulta ser muy pequeña, su efecto no es determinante en la descripción del fenómeno.

Lapicki y Losonsky [LAPG79] efectúan la corrección en la PWBA debido a la deflexión del proyectil por el núcleo. Este efecto puede considerarse en la sección de ionización tomando funciones de onda coulombianas para el proyectil,  $\sigma^{\text{CWBA}}$ , en lugar de ondas planas,  $\sigma^{\text{PWBA}}$ . Suponen que la relación entre las dos secciones se da a través de un factor

$C$ , definido como:

$$C = \frac{\sigma^{\text{CWBA}}}{\sigma^{\text{PWBA}}}, \quad (2.32)$$

donde este factor debe de ser tal que a altas velocidades del proyectil la sección sea parecida a la PWBA y a bajas velocidades sea igual a la CWBA.

Para determinar el factor  $C$ , se supone que las ondas planas están relacionadas con las coulombianas por medio de una constante multiplicativa como:

$$\varphi_{i,f}^{\text{C}} = N_{i,f} \varphi_{i,f}^{\text{P}}, \quad (2.33)$$

donde  $N$  es la constante, los superíndices C y P se refieren a la ondas coulombianas y planas, y los subíndices  $i, f$  se refieren al estado inicial y final del proyectil. El valor de  $N_{i,f}$  se obtiene de la Ec. (2.33) al evaluar las funciones en  $\mathbf{R}$  donde la probabilidad de excitación alcance su máximo. Con estas funciones se determina el flujo de partículas para los casos de ondas coulombianas y planas,  $j_{i,f}^{\text{C}} = v_{i,f} |N_{i,f}|^2$  y  $j_{i,f}^{\text{P}} = v_{i,f}$ , respectivamente. Como las secciones son proporcionales a los cocientes del flujo final entre el inicial, se determina el valor de  $C$  como:

$$C = \frac{j_f^{\text{C}}/j_i^{\text{C}}}{j_f^{\text{P}}/j_i^{\text{P}}} = \frac{|N_f|^2}{|N_i|^2}. \quad (2.34)$$

Los valores de  $N_{i,j}$  se obtienen a partir de la Referencia [LANDAU3], cuando las dos funciones de onda son evaluadas en el origen, de tal manera que [LAPG79]:

$$N_{i,f} = e^{-\pi\eta_{i,f}/2} \Gamma(1 + i\eta_{i,f}), \quad (2.35)$$

donde  $\eta_{i,f} = p_{i,f}d/\hbar$ , en la que  $d = Z_1Z_2/mv_1^2$  es la mitad de la distancia de mínimo acercamiento del proyectil. Luego como  $|\Gamma(1 + i\eta_{i,f})|^2 = \pi\eta_{i,f}/\sinh(\pi\eta_{i,f})$ , y si se tienen colisiones lentas, i.e.  $\eta_{i,f} \gg 1$ , se puede aproximar:

$$\frac{1 - e^{-2\pi\eta_i}}{1 - e^{-2\pi\eta_f}} \approx 1. \quad (3.36)$$

y además  $\Delta\eta \approx dq_0$ . Entonces, la constante  $C$  queda como:

$$C \approx e^{-2\pi\Delta\eta} \approx e^{-2\pi dq_0}. \quad (3.37)$$

De esta forma, queda definida la aproximación CPWBA, que toma en cuenta la corrección por deflexión coulombiana del proyectil (C). Los resultados de esta aproximación resultan ser un poco mejores que los de la PWBA, pero aun así la corrección resulta ser muy pequeña. También pueden combinarse esta aproximación con la PWBABR, para obtener la aproximación CPWBABR.

### 2.3 APROXIMACION SEMICLASICA (SCA).

Este modelo fue propuesto por Bang y Hansteen [BANG59] y pretende explicar la ionización de capas internas tomando en cuenta la deflexión coulombiana del proyectil por el núcleo. Para esto, recurren a la solución del problema por medio de la colisión entre el ion y el núcleo en términos del parámetro de impacto, y la interacción del proyectil con los electrones por medio de perturbaciones.

De la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo [LANDAU3], se tiene que la probabilidad de que un ion que se mueve en la trayectoria  $\mathbf{R}(t)$  interaccione con un electrón en la subcapa  $s$  y lo expulse del átomo es:

$$P = \frac{1}{\hbar} \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle p_e | V(r, t) | s \rangle dt \right|^2, \quad (2.38)$$

donde

$$V(r, t) = \frac{Z_1 e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)|}, \quad (2.39)$$

en la cual  $|s\rangle$  representa el estado inicial del electrón en el átomo y  $|p_e\rangle$  el estado final con momento  $p_e$  en el continuo,  $\mathbf{r}$  es el vector de posición del electrón y por último  $\omega = \Delta E/\hbar$ , donde  $\Delta E$  es el cambio en energía del electrón. Por otro lado, clásicamente se tiene que la sección eficaz diferencial de dispersión por un potencial central [LANDAU1] está dada por  $d\sigma_d = \pi b db$ , en donde  $b$  es el parámetro de impacto. Entonces haciendo uso de esta descripción clásica de la colisión, podemos determinar la probabilidad de expulsar un electrón de la capa  $s$  de un átomo con una energía  $E_f$  como:

$$\frac{d\sigma_s}{dE_f} = \frac{2\pi}{\hbar} \int_0^{\infty} b db \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle p_e | V(r, t) | s \rangle dt \right|^2, \quad (2.40)$$

Es por este motivo que la presente aproximación se le conoce como aproximación semiclásica, (Semi-classical Approximation, SCA). La sección eficaz total de ionización de la capa  $s$ , se obtiene integrando la Ec. (2.40) sobre todas las energías posibles de transferencia.

La solución más sencilla para la Ec. (2.40) es cuando la trayectoria del proyectil es una línea recta. Por simplicidad se escoge la trayectoria en el plano yz, como  $\mathbf{R}(t) = b\hat{y} + v_1 t\hat{z}$ , donde  $b$  es el parámetro de impacto. Entonces la integral en la Ec. (2.38) queda como:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \psi_f^*(r)\psi_i(r)d^3r \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega t} dt}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)|} \right\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_f^*(r)\psi_i(r)d^3r \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega t} dt}{\sqrt{x^2 + (b-y)^2 + (v_1 t - z)^2}} \right\} \\ &= \frac{2}{v_1} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_f^*(r)\psi_i(r)e^{i\omega z/v_1} K_0\left(\frac{\omega\rho}{v_1}\right)d^3r. \end{aligned} \quad (2.41)$$

donde  $K_0(x)$  es la función modificada de Bessel de tercera especie y de orden cero y  $\rho = x^2 + (b-y)^2$ . El cálculo de esta integral se efectúa considerando funciones de onda hidrogenoides para el electrón en el estado ligado y en el continuo, de la forma:  $\psi_{klm}(\mathbf{r}) = R_{kl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$  y con energía final  $E_f = \hbar^2 k^2 / 2m_e$ , donde  $Y_{lm}$  son las funciones armónicas esféricas y la función radial  $R_{kl}(r)$  para el estado en el continuo está dada por Bethe [BETH57]. Los números  $l$  y  $m$  corresponden al momento angular orbital del electrón y a sus proyecciones en el eje  $z$ . De esta manera, la sección de transferencia de energía  $E_f$ , Ec. (2.40), se expresa en forma general como [KOCL76, ANDJ82]:

$$\left(\frac{d\sigma_s}{dE_f}\right)^{sl} = 4\pi Z_1 \frac{m_1 e^4}{E_1 \hbar^2} \int_0^\infty b db \sum_{lm} |M_b|^2, \quad (2.42)$$

donde los elementos de matriz  $M_b$  están dados por:

$$\begin{aligned} M_b(k, l, m) &= (4\pi)^{-1/2} \int r^2 dr d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) e^{iqz} K_0(q\rho) R_f^*(r) R_i(r) \\ &= \int_0^\infty w dw A_m^l(q, w, b) F_{fi}^l(s), \end{aligned} \quad (2.43)$$

donde  $q = \omega/v_1$ ,  $s^2 = q^2 + w^2$ ,

$$A_m^l(q, w, b) = \frac{1}{s^2} \left( (2l+1) \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right)^{1/2} P_l^m(q/s) J_m(bw), \quad (2.44)$$

y

$$F_{fi}^l(s) = \int_0^\infty r^2 dr j_l(sr) R_f^*(r) R_i(r). \quad (2.45)$$

Aquí,  $P_l^m(x)$  son los polinomios asociados de Legendre,  $J_m(x)$  son las funciones de Bessel y  $j_l(x)$  son las funciones esféricas de Bessel.

A partir de las ecuaciones anteriores, Bang y Hansteen [BANG59] muestran el cálculo de los elementos de matriz para la capa K, en tanto que Kocbach [KOCL76, KOCL76b] y Hansteen y Mosebekk [HANS70] lo hacen para las capas L y M. Hansteen *et al.* [HANJ75] presentan tablas de las secciones de ionización utilizando la SCA cuando la trayectoria del proyectil es una línea recta.

Cuando la energía del proyectil es grande, la sección de ionización total calculada con la SCA suponiendo trayectoria recta del proyectil, coincide con la PWBA [BANG59, MADD75]. En el apéndice A se muestra la equivalencia entre la PWBA y la SCA en este caso.

Un resultado importante, es cuando la velocidad del proyectil es pequeña, ( $\xi_s \ll 1$ ), la sección de transferencia de energía  $E_f$  para una trayectoria en línea recta es proporcional a potencias de  $q_s \approx (\hbar\omega_{2s} + E_f)/(\hbar v_1)$ , como [BANG59, AMUP77, BRAN74]:

$$\left(\frac{d\sigma_s}{dE_f}\right)^{sl} \propto \begin{cases} q_s^{-10} & \text{para K, L}_1 \\ q_s^{-12} & \text{para L}_2, \text{L}_3. \end{cases} \quad (2.46)$$

El cálculo de las secciones de transferencia de energía  $E_f$  utilizando trayectorias hiperbólicas, más reales que el caso de la línea recta, es mucho más complicado. Por este motivo, Bang y Hansteen [BANG59] se restringen al caso en el que  $a_{2s}^{-1} \ll q_s$ , de tal manera que se puede suponer que el término monopolar del potencial es el dominante, es decir:

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)|} \approx \begin{cases} \frac{1}{R(t)} & \text{si } r < R; \\ \frac{1}{r} & \text{si } r > R. \end{cases} \quad (2.47)$$

La trayectoria hiperbólica la describe en forma paramétrica:

$$\begin{aligned} x &= d(\cosh w + \varepsilon), & y &= d\sqrt{\varepsilon^2 - 1} \sinh w, & z &= 0, \\ R &= d(\varepsilon \cosh w + 1) & y & \quad t = \frac{d}{v_1}(\varepsilon \sinh w + w), \end{aligned} \quad (2.48)$$

donde  $\varepsilon$  es la excentricidad de la hipérbola y  $d$  es la mitad de la distancia de mínimo acercamiento del proyectil. De esta forma, cuando se tienen colisiones lentas,  $\xi_s \ll 1$ , las secciones utilizando trayectoria recta e hiperbólica se relacionan como [BANG59, BRAN74]:

$$\left(\frac{d\sigma_s}{dE_f}\right)^{hyp} = e^{-\pi d q_s} \left(\frac{d\sigma_s}{dE_f}\right)^{sl}. \quad (2.49)$$

Cálculos utilizando la aproximación monopolar para la sección de ionización de la capa K son dados por Hansteen [BANG59, HANS73], en tanto que para las capas L lo son por Amundsen [AMUP77]. Cálculos exactos a partir de la SCA para la capa K utilizando funciones relativistas para los electrones y sin aproximar el potencial se muestran en las referencias [AASO76, PAUM78, PAUM78b]. Estudios utilizando la SCA empleando trayectorias hiperbólicas [HANS85, AASK88, HANS89] muestran que esta aproximación produce los mejores resultados para las secciones de ionización de la capa K a bajas energías. Pero por otro lado, se requieren programas de cálculo largos y complicados. Por este motivo, cuando la aproximación ECPSSR (ver siguiente sección) se encuentra en la región donde da buenos ajustes con los experimentos, se prefiere su uso al de la SCA. En el caso de las capas L todavía la SCA presenta grandes discrepancias con los datos experimentales a bajas energías.

#### 2.4 APROXIMACION DE ENCUENTRO BINARIO (BEA)

Este modelo fue propuesto por Garcia [GARJ70], para explicar la ionización de capas atómicas internas, a partir de los conceptos clásicos elementales de la teoría de colisiones. La aplicación de estos conceptos se efectúa suponiendo que la interacción es sólo entre el ion y el electrón. Como la sección de dispersión clásica coincide con la cuántica obtenida utilizando la aproximación PWBA, en el sistema del centro de masa, entonces se transforma clásicamente al sistema de laboratorio. De esta manera, la ionización se ve como una colisión entre una partícula incidente contra un electrón libre con momento  $p_2$ . En este modelo el papel del núcleo consiste en que nos va a establecer la distribución de momentos del electrón antes de la colisión. Debido a esto, es por lo que esta aproximación se le conoce como de Encuentro Binario (Binary Encounter Approximation, BEA). La idea general de la aproximación de encuentro binario fue propuesta inicialmente por Gryzinski [GRYM65] y luego aplicada para describir la ionización por impacto de protones por Garcia *et al.* [GARJ68].

La sección eficaz para la expulsión de un electrón con velocidad  $v_2$  en la capa s por la colisión con un ion es:

$$\sigma_s^{\Delta E}(v_2, E_1) = \int_{h\omega_2}^{E_1} \frac{d\sigma}{d\Delta E} \Delta E, \quad (2.50)$$

donde  $d\sigma/d\Delta E$  es la sección eficaz clásica para una transferencia de energía  $\Delta E$  a un electrón con velocidad  $v_2$  en el sistema de referencia del laboratorio. Para obtener la sección eficaz total de ionización de la capa  $s$ , se integra sobre todas las posibles velocidades  $v_2$  y se multiplica por el número de electrones que se encuentran en la capa  $s$ . Esto es:

$$\sigma_s = N_s \int_0^\infty \sigma_s^{\Delta E}(v_2, E_1) f(v_2) dv_2, \quad (2.51)$$

donde  $N_s$  es el número de electrones de la capa  $s$  y  $f(v_2)$  es la función de distribución de velocidades de estos electrones. La distribución de velocidades  $f(v_2)$  puede calcularse clásicamente de la manera más sencilla, para electrones en el estado con energía  $-\hbar\omega_{2s}$ , a partir del conjunto microcanónico, suponiendo átomo hidrogenoide [GARJ70], dando como resultando:

$$f(v_2) = \frac{32v_0^5 v_2^2}{(v_2^2 + v_0^2)^4}, \quad (2.52)$$

donde ahora  $v_0 = (2\hbar\omega_{2s}/m_e)^{1/2}$ . Este resultado es igual al que se obtiene cuánticamente suponiendo estados hidrogenoides.

La sección  $d\sigma/d\Delta E$  para un ion con velocidad de incidencia  $v_1$  y un electrón cuya velocidad  $v_2$ , promediada sobre una distribución esféricamente simétrica de direcciones para  $v_2$ , fue determinada por Gerjuoy [GERE66]. A partir de esta, se determina en forma directa la sección  $\sigma_s^{\Delta E}(v_2, E_1)$  integrando sobre todas las posibles transferencias de energía  $\Delta E$ . Los resultados para los diferentes casos son:

$$\begin{aligned} \sigma_s^{\Delta E}(v_2, E_1) &= \frac{\pi Z_1^2 e^4}{3 v_1^2 v_2} \left( -\frac{2v_2^3}{(\Delta E)^2} - \frac{6v_2}{m_e \Delta E} \right), & \text{si } 0 < \Delta E < b; \\ &= \frac{\pi Z_1^2 e^4}{3 v_1^2 v_2} \left( 3 \frac{(v_1/m_1) - (v_2/m_2)}{\Delta E} + \frac{(v_2^3 - v_1^3) - (v_1^3 + v_2^3)}{(\Delta E)^2} \right), & \text{si } b < \Delta E < a; \\ &= \frac{\pi Z_1^2 e^4}{3 v_1^2 v_2} \left( -\frac{2v_1^3}{(\Delta E)^2} \right), & \text{si } \Delta E > a \text{ y } 2m_e v_2 > (m_1 - m_e)v_1; \\ &= 0 & \text{si } \Delta E > a \text{ y } 2m_e v_2 < (m_1 - m_e)v_1. \end{aligned} \quad (2.53)$$

donde

$$a = \frac{4m_1 m_e}{(m_1 + m_e)^2} \left( E_1 - E_2 + \frac{v_1 v_2}{2} (m_1 - m_e) \right),$$

$$b = \frac{4m_1m_e}{(m_1 + m_e)^2} \left( E_1 - E_2 - \frac{v_1v_2}{2}(m_1 - m_e) \right),$$

$$v_1' = \left( v_1^2 - \frac{2\Delta E}{m_1} \right)^{1/2} \quad v_2' = \left( v_2^2 - \frac{2\Delta E}{m_e} \right)^{1/2}, \quad y \quad \Delta E = E_1 - \hbar\omega_{2s}.$$

Para tomar en cuenta el efecto de la repulsión coulombiana en el movimiento del proyectil, se incorpora un factor de corrección de acuerdo a las ideas de Thomas y Garcia [THOB69], como:

$$\sigma_s(E_1) = \sigma_s(E_1') \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{2Z_{2s}E^2}{E_1\sigma_s(E_1')} \left[ \varrho - \left( \varrho^2 - \frac{\sigma_s(E_1')}{\pi} \right)^{1/2} \right] \right\}^{1/2} \right)^2, \quad (2.54)$$

donde  $\sigma_s(E_1')$  es la sección  $\sigma_s$  dada por la Ec. (2.51) evaluada en la energía  $E_1' = E_1 - (Z_{2s}e^2/\varrho)$  y con  $\varrho = Z_2e^2/2\hbar\omega_{2s}$ . Esta corrección es muy pequeña para protones, excepto cuando tienen muy bajas energías.

La ventaja de la BEA, es que cuando se utilizan funciones hidrogenoides para la distribución de velocidades  $f(v_2)$  de la capa s, en la Ec. (2.51), se obtiene una ley de escalamiento [GARJ73, GARJ68], que se expresa como:

$$u_s^2\sigma_s = Z_1^2 f[E_1/\lambda u_s, \lambda], \quad (2.55)$$

donde  $\lambda = m_1/m_e$  y la  $u_s$  es la energía de ligadura del electrón correspondiente la capa atómica s. Esta función de la BEA es análoga a la función  $f_s(\eta_s, \theta_s)$  de la PWBA, dada en la Ec. (2.23). Esta aproximación es buena a altas velocidades y coincide con la PWBA. El inconveniente de la BEA es que a bajas velocidades del proyectil, donde los efectos cuánticos comienzan a ser importantes, no son considerados en la aproximación por lo cual las predicciones difieren de los datos experimentales. Además, la BEA no es correcta al aplicarse a subcapas atómicas.

Tablas de las secciones de ionización utilizando la BEA para la capa K son presentadas por Rutledge y Watson [RUTC73] y para las capas K y L por Hansen [HANS73].

## 2.5 APROXIMACION ECPSSR

Este modelo ha sido el que mejores resultados ha dado en la predicción de las secciones eficaces de ionización de capas internas, sin recurrir a los cálculos complicados y largos de la SCA. Este método se debe a Brandt y Lapicki [BRAW81], el cual consiste en la incorporación de correcciones en la PWBA, debidos a los efectos de deflexión coulombiana del proyectil, de ligadura y polarización de los electrones en el átomo por la presencia del proyectil, a la pérdida de energía del proyectil durante la colisión debido a la interacción con el núcleo atómico, y por último a efectos relativistas de los electrones. Una revisión completa de esta aproximación junto con una comparación con respecto a otros modelos es presentada por Mukoyama [MUKT91]. A continuación vamos a ir indicando cómo se van incorporando estos efectos en la PWBA.

### 2.5.1 Efectos de ligadura y de polarización.

En la colisión ion-átomo, cuando la velocidad del ion es pequeña, los efectos de su presencia son más notorios en los electrones del átomo, pues el tiempo de interacción es mayor y se modifican sus estados iniciales. También, cuando la velocidad del ion es pequeña, para expulsar un electrón de alguna capa interna requiere de una penetración grande dentro de la capa atómica. De esta manera, al encontrarse el ion cerca del núcleo aumenta la energía de ligadura de los electrones y consecuentemente hay una disminución en la sección de ionización. Este *efecto de ligadura* fue considerado por Basbas *et al.* [BASG73] para la capa K y por Brandt y Lapicki [BRAW74] para la capas L, utilizando la aproximación de estados estacionarios perturbados (PSS) [MADD75, SCHI68]. La forma en como consideran este efecto de ligadura es cambiando la energía reducida de enlace  $\theta_s$  por otra que tome en cuenta este efecto. Esto lo consiguen introduciendo un factor de corrección por ligadura  $\epsilon_s^B$  que al multiplicarlo por  $\theta_s$  nos da la energía de enlace reducida corregida  $\epsilon_s^B \theta_s$ . Este factor de ligadura está dado por:

$$\epsilon_s^B = 1 + \frac{\langle \Delta E_s \rangle}{\hbar \omega_{2s}}, \quad (2.56)$$

donde  $\langle \Delta E_s \rangle$  es el cambio promedio en la energía de enlace de la subcapa s durante la colisión. Para el cálculo de este factor de corrección primero partimos del cambio en la energía de ligadura del electrón  $\Delta E_s$  debido a un ion que incide con un parámetro de

impacto b. Este cambio se puede determinar usando perturbaciones a primer orden, de tal modo que:

$$\Delta E_s(R) = \int \psi_s^*(\mathbf{r}) \frac{Z_1 e^2}{|\mathbf{R}(t) - \mathbf{r}|} \psi_s(\mathbf{r}) d^3 r, \quad (2.57)$$

donde  $\mathbf{R}(t)$  es el vector de posición del proyectil y  $\psi_s(\mathbf{r})$  es la función de onda no perturbada del electrón de la subcapa s. Suponiendo que el ion se mueve en una trayectoria en línea recta, análoga a la utilizada en la Ec. (2.41), junto con funciones de onda hidrogenoides para  $\psi_s$ , el valor de  $\Delta E_s$  puede expresarse como una función de la variable  $\lambda = R(t)/a_{2s}$  para las capas K y L. El valor de  $\langle \Delta E_s \rangle$  se determina primero evaluando  $\Delta E_s$  en el punto de máximo acercamiento (es decir, en  $\lambda = b/a_{2s}$ ) y después promediando sobre todos los parámetros de impacto posibles, como:

$$\langle \Delta E_s \rangle = \frac{\int_0^\infty \Delta E_s \left( \frac{d\sigma_s}{dE_f} \right)_b^{sl} \lambda d\lambda}{\int_0^\infty \left( \frac{d\sigma_s}{dE_f} \right)_b^{sl} \lambda d\lambda}, \quad (2.58)$$

donde  $(d\sigma_s/dE_f)_b^{sl}$  son las secciones de transferencia de energía final al electrón  $E_f$  dado un parámetro de impacto b. Estas secciones se expresan en términos de la SCA (ver sección 2.3). Finalmente, el factor  $\epsilon_s^B$  se puede expresar en función de las velocidades reducidas  $\xi_s$  como [BASG78]:

$$\epsilon_s^B(\xi_s) = 1 + \frac{2Z_1}{\theta_s Z_{2s}} g_s(\xi_s), \quad (2.59)$$

donde las funciones  $g_s$  están dadas por:

$$g_K(\xi) = (1 + 9\xi + 31\xi^2 + 98\xi^3 + 12\xi^4 + 25\xi^5 + 4.2\xi^6 + 0.515\xi^7)/(1 + \xi)^9, \quad (2.60)$$

$$g_{L_1}(\xi) = (1 + 9\xi + 31\xi^2 + 49\xi^3 + 162\xi^4 + 63\xi^5 + 18\xi^6 + 1.97\xi^7)/(1 + \xi)^9, \quad (2.61)$$

$$g_{L_{2,3}}(\xi) = (1 + 10\xi + 45\xi^2 + 102\xi^3 + 331\xi^4 + 6.7\xi^5 + 58\xi^6 + 7.8\xi^7 + 0.888\xi^8)/(1 + \xi)^{10}. \quad (2.62)$$

Otro cambio en los estados iniciales de un átomo en la colisión con un ion, es el de la atracción de la nube electrónica hacia el ion cuando este pasa por afuera de las capas internas. Esto produce una polarización en los estados de los electrones del átomo que aumenta la sección eficaz de ionización. Este efecto es entonces importante a velocidades medias o grandes, donde para expulsar electrones de las capas internas no necesita penetrar

mucho en las capas del átomo. Basbas *et al.* [BASG78] y Brandt y Lapicki [BRAW79] consideran también este *efecto de polarización* utilizando la aproximación PSS y definiendo un factor de corrección  $\epsilon_s^P$  para  $\theta_s$  debido a la polarización, en forma análoga a como se procedió con el de ligadura. Para esto, primero desarrollan el potencial de interacción entre el ion y el electrón del átomo hasta el orden cuadrupolar,

$$\frac{Z_1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} = \frac{1}{R} + \frac{\mathbf{R} \cdot \mathbf{r}}{R^3} + \frac{1}{2} \left( \frac{3(\mathbf{R} \cdot \mathbf{r})^2}{R^5} - \frac{r^3}{R^3} \right) + \dots \quad (2.63)$$

y expresan a los estados iniciales no perturbados del electrón por medio de osciladores armónicos isotrópicos. De esta forma, se considera el efecto de la polarización de estos osciladores armónicos por el paso de iones cargados [ASHL72, HILK74]. El cambio promedio en la frecuencia de oscilación generado por la interacción con el ion, sobre todos los parámetros de impacto  $b$  mayores que  $a_{2s}$ , se expresa como:

$$\Delta\omega(\omega) = \frac{4\pi Z_1}{v_1} \left( x K_0(x) K_1(x) + \frac{Z_1 \omega}{v_1^3} I(x) \right), \quad (2.64)$$

donde  $x = b\omega/v_1$ ,  $K_0$  y  $K_1$  son las funciones de Bessel de segunda especie y la función  $I(x)$  se detalla más adelante. El primer término de la Ec. (2.64) corresponde al elemento de orden dipolar del potencial de interacción entre el ion y el electrón, pero el segundo término, es el resultado del elemento cuadrupolar del potencial el cual involucra la polarización del movimiento del electrón. Con base en estas ideas, el factor de polarización se expresa [BASG78, BRAN79] como:

$$\epsilon_s^P(\xi_s, \theta_s; c_s) = 1 - \frac{2Z_1}{Z_2 \theta_s} h_s(\xi_s; c_s), \quad (2.65)$$

donde

$$h_s(\xi_s; c_s) = \frac{2n}{\theta_s \xi_s^3} I(c_s n / \xi_s), \quad (2.66)$$

en donde  $c_s$  es una constante que depende de la subcapa que se esté considerando en la ionización. Los valores para esta constante son:  $c_K = c_{L_1} = \frac{3}{2}$  y  $c_{L_2} = c_{L_3} = \frac{5}{4}$ . La función  $I(x)$  está dada con 1% de error para valores con  $0 < x \leq 0.035$ , por:

$$I(x) = \frac{3}{4} \pi \left( \ln \frac{1}{x^2} - 1 \right), \quad (2.67)$$

para  $0.035 < x \leq 3.1$  es:

$$I(x) = e^{-2x} (0.031 + 0.210x^{1/2} + 0.005x - 0.069x^{3/2} + 0.324x^2)^{-1}, \quad (2.68)$$

para  $3.1 < x \leq 11$ , es:

$$I(x) = \frac{e^{-2x}}{x^{1.6}} \quad (2.69)$$

y por último para  $x > 11$  se toma  $I(x) = 0$ .

Los efectos de ligadura y polarización se combinan para dar un factor de corrección  $\zeta_s$ , definido por:

$$\zeta_s(\xi_s) = 1 + \frac{2Z_1}{Z_2\theta_s} [g_s(\xi_s) - h_s(\xi_s; c_s)]. \quad (2.70)$$

Así, finalmente el efecto de ligadura y polarización es tomado en cuenta en la PWBA cambiando  $\theta_s$  por  $\zeta_s\theta_s$ , y dividiendo  $\xi_s$  entre  $\zeta_s$ , de tal manera que la nueva sección de ionización obtenida por la corrección es:

$$\sigma_s^{PSS} = \sigma_s^{PWBA}(\xi_s/\zeta_s, \zeta_s\theta_s), \quad (2.71)$$

donde  $\sigma_s^{PWBA}(\xi_s/\zeta_s, \theta_s)$  es la sección de ionización de la subcapa  $s$  dada por la PWBA, Ec. (2.23).

### 2.5.2 Efecto de Deflexión Coulombiana.

Cuando un ion incide a altas velocidades sobre un átomo, la interacción con el núcleo no altera sensiblemente su trayectoria, pero cuando la velocidad del ion es pequeña esta interacción empieza a ser más notoria, produciendo una deflexión en la trayectoria del ion. Además, esta interacción del ion con el núcleo durante la colisión provoca una disminución en la velocidad del proyectil cuando este se aproxima al núcleo. Al utilizar la PWBA o la SCA suponiendo una trayectoria rectilínea del proyectil, como se sabe, no están considerando la interacción con el núcleo atómico. Esto ocasiona, que a velocidades bajas del ion las aproximaciones anteriores, al no considerar la disminución en la velocidad del proyectil y la deflexión en la trayectoria, den como resultado una sobrestimación del valor de las secciones de ionización, pues estos efectos reducen la penetración del ion dentro de las capas internas del átomo. Para tomar en cuenta estos efectos a bajas energías, el proyectil no debe de considerarse como una onda plana, sino por medio de una función de onda Coulombiana, o bien, considerar una trayectoria hiperbólica en lugar de una trayectoria recta.

Basbas *et al.* [BASG73b] y Brandt y Lapicki [BRAN74, BRAN79], derivan un factor de corrección multiplicativo para considerar el efecto de la deflexión coulombiana. Este

factor se obtiene, partiendo de la Ec. (2.49), que a continuación reescribimos como:

$$\left(\frac{d\sigma_s}{dE_f}\right)^{\text{hyp}} = e^{-\pi dq_0\tau} \left(\frac{d\sigma_s}{dE_f}\right)^{\text{sl}}, \quad (2.72)$$

donde los superíndices hyp y sl en las secciones de ionización se refieren a las trayectorias hiperbólica y rectilínea respectivamente,  $d = Z_1 Z_2 e^2 / (2E_1)$ , es la mitad de la distancia de máximo acercamiento del ion en una colisión de frente,  $\hbar q_0 = \hbar \omega_{2s} / v_1$ , es el mínimo momento que puede ser transferido y  $\tau = 1 + E_f / \hbar \omega_{2s}$ . Considerando la sección diferencial de ionización sobre una trayectoria recta en el límite de colisiones lentas, Ec. (2.46), en términos de  $q_0$ , tal que:

$$\left(\frac{d\sigma_s}{dE_f}\right)^{\text{sl}} \propto (q_0 \tau)^{-(10+2l_2)}, \quad (2.73)$$

e integrando sobre los valores posibles de  $\tau$  desde 1 hasta  $\infty$ , se obtiene la sección de ionización corregida por la deflexión coulombiana, como:

$$\sigma_s^C = C_s(\pi dq_0) \sigma_s^{\text{PWBA}}. \quad (2.74)$$

En esta ecuación, el factor de deflexión coulombiana se define como:

$$C_s(\pi dq_0) = (9 + 2l_2) E_{10+2l_2}(\pi dq_0), \quad (2.75)$$

donde  $l_2$  es el momento angular orbital del electrón en la subcapa  $s$ , ( $l_2 = 0$  para las capas K y L<sub>1</sub> y  $l_2 = 1$  para L<sub>2</sub> y L<sub>3</sub>), y  $E_l(x)$  es la integral exponencial de orden  $l$ , dada por [ABRM65]:

$$E_l(x) = \int_x^\infty e^{-u} u^{-l} du. \quad (2.76)$$

Los efectos de ligadura y polarización se pueden combinar con la corrección por deflexión coulombiana, para considerar estos efectos en forma conjunta, de tal manera que la sección de ionización se expresa como:

$$\sigma_s^{\text{CPSS}} = C_s(\pi dq_0 \zeta_s) \sigma_s^{\text{PWBA}}(\xi_s / \zeta_s, \zeta_s \theta_s), \quad (2.77)$$

donde se corrige  $q_0$  por  $\zeta_s q_0$ .

### 2.5.3 Efectos electrónicos relativistas.

Los efectos relativistas en los electrones del átomo comienzan a ser importantes cuando se tienen elementos pesados y cuando la velocidad del proyectil es lenta. Cuando  $Z_2 > 50$  es necesario utilizar funciones de onda relativistas para los electrones del átomo. La densidad de electrones utilizando funciones de onda relativistas resulta ser mayor cerca del núcleo en comparación cuando se utilizan funciones no relativistas, dando como consecuencia que las velocidades de los electrones en las capas internas sean mayores. Así, cuando la energía del proyectil es baja entonces la colisión deberá tener lugar cerca del núcleo para poder expulsar algún electrón y como estos tienen velocidades mayores a las estimadas, tendremos que el mínimo momento posible de transferir será mayor. El resultado de estos efectos electrónicos relativistas será un aumento en las secciones de ionización de capas internas.

Como el cálculo de las secciones utilizando la PWBA es complicado y tedioso al utilizar funciones relativistas, Brandt y Lapicki [BRAN79] desarrollan una corrección relativista para la PWBA en forma similar al método empleado para los efectos de ligadura y polarización. Así, primero establecen una distribución local para la masa relativista del electrón en un potencial central en función de  $r$ . Es decir, establecen la masa relativista del electrón  $m^R(r)$ , en unidades atómicas, como una función que depende de la distancia con respecto al núcleo. Esto lo hacen a partir del teorema de Virial [ROSM52], de tal manera que la masa relativista de un electrón en un potencial central queda en términos de potencias de  $Z_{2s}/r$ , como\*:

$$m^R(r) = \left[ 1 + \left( \frac{Z_{2s}}{2rc^2} \right)^2 \right]^{1/2} + \frac{Z_{2s}}{2rc^2}. \quad (2.78)$$

Esta función se evalúa en el valor promedio de  $\langle R(t)^{-1} \rangle = \alpha b$  para una trayectoria recta con parámetro de impacto  $b$  y donde  $\alpha = \sinh 1 = 1.1752$ . Promediando  $m^R(\alpha b)$  sobre todos los parámetros de impacto, en forma análoga a la Ec. (2.58), se obtiene el factor de

---

\* Hay que notar que si la masa del electrón no está en unidades atómicas, tendremos que la masa relativista del electrón será  $m_e^R(r) = m^R(r) \cdot m_e$ , donde entonces  $m^R(r)$  se convierte en un factor de corrección para  $m_e$  en función de  $r$ .

corrección relativista dado como:

$$m_s^R(\xi_s) = (1 + 1.1y_s^2)^{1/2} + y_s, \quad (2.79)$$

donde

$$y_s = 0.40(Z_{2s}/137)^2/(n\xi_s),$$

para las capas K y L<sub>1</sub> y

$$y_s = 0.15(Z_{2s}/137)^2/\xi_s,$$

para L<sub>2</sub> y L<sub>3</sub>.

Con lo anterior, la corrección relativista se lleva a cabo reemplazando  $\eta_s$  por  $m_s^R\eta_s$  o también cambiando  $\xi_s$  por  $[m_s^R(\xi)]^{1/2}\xi_s$  en la sección PWBA no relativista. Definimos entonces la velocidad reducida relativista como:

$$\xi_s^R = [m_s^R(\xi)]^{1/2}\xi_s. \quad (2.80)$$

Este efecto electrónico relativista se puede juntar con el de deflexión coulombiana y el de ligadura y polarización, para obtener la sección de ionización corregida por todos estos efectos, dada como:

$$\sigma_s^{CPSSR} = C_s(\pi dq_0 \zeta_s) \sigma_s^{PWBA}(\xi_s^R/\zeta_s, \zeta_s \theta_s). \quad (2.81)$$

#### 2.5.4 Efecto por pérdida de energía.

La PWBA generalmente se calcula a partir de las ecuaciones (2.20) y (2.23), considerando los límites de integración con  $Q_{max} \rightarrow \infty$  en lugar del límite exacto, Ec. (2.22b). Esta aproximación se basa en las condiciones  $m \ll m_2$  y  $\epsilon = \hbar\omega_{2s} + E_f \ll E_1$ . Cuando la energía de incidencia es pequeña, esto es,  $\epsilon \approx E_1$ , entonces la consideración sobre  $Q_{max}$  no es la adecuada y por lo tanto deben de utilizarse los límites exactos. Brandt y Lapicki [BRANS1] proponen una corrección para tomar en cuenta este hecho. A partir de la Ec. (2.73), escriben la sección diferencial con los límites de integración exactos, como:

$$\left(\frac{d\sigma_s}{dE_f}\right)^{EPWBA} = \left(\frac{d\sigma_s}{dE_f}\right)^{PWBA} \left[ \left(\frac{q_0}{q_{min}}\right)^{\nu+1} - \left(\frac{q_0}{q_{max}}\right)^{\nu+1} \right], \quad (2.82)$$

donde  $\nu = 9 + l_2$ , y  $q_{min}$  y  $q_{max}$  son las transferencias de momento mínima y máxima, que están dadas por las Ecs. (2.21). Integrando la Ec. (2.82) sobre todos los estados finales  $E_f$  posibles, se expresa la sección de ionización como:

$$\left(\frac{d\sigma_s}{dE_f}\right)^{EPWBA} = f_s(z_s) \left(\frac{d\sigma_s}{dE_f}\right)^{PWBA}, \quad (2.83)$$

donde aquí

$$f_s(z_s) = \frac{1}{2\nu(\nu-1)} [(\nu z - 1)(1+z)^\nu + (\nu z + 1)(1-z)^\nu], \quad (2.84)$$

y

$$z_s = \left(1 - \frac{m_1 \hbar \omega_{2s}}{m E_1}\right)^{1/2}. \quad (2.85)$$

Por otra parte, también cuando la energía del ion incidente es muy pequeña ya no es conveniente tomar la aproximación  $q_{min} = q_{0s} \approx \hbar \omega_{2s}/v_1$ . En este caso habrá que tomar la  $q_{min}$  exacta a partir de la Ec. (2.21a), de tal forma que:

$$q_{min} = (p_0 - p)/\hbar = K_i - K_f = 2q_0[1 + (1 - \Delta)^{1/2}]^{-1}, \quad (2.86)$$

donde  $\Delta = (E_1 - E_{1f})/E_1$  y  $E_{1f}$  es la energía final del ion después de la colisión. Lapicki y Losonsky [LAPG79] muestran que cuando se toma en cuenta la pérdida de energía del ion entonces en el factor de corrección por deflexión coulombiana, Ecs (2.74) y (2.75), debe cambiarse el argumento  $dq_{0s}$  por:

$$Z_1 Z_2 m (K_f^{-1} - K_i^{-1}) = \frac{Z_1 Z_2}{m v_i v_f} (K_i - K_f). \quad (2.87)$$

A partir de las Ecs. (2.85), (2.86) y (2.87), se encuentra que para tomar en cuenta el efecto de pérdida en la corrección por deflexión coulombiana Ec. (2.74), basta con multiplicar  $dq_{0s}$  por  $2/[z_s(1+z_s)]$ . De esta manera la sección de ionización considerando pérdida de energía y deflexión coulombiana queda como:

$$\sigma_s^{EC} = C_s \left(\frac{2\pi dq_{0s}}{z_s(1+z_s)}\right) f(z_s) \sigma_s^{PWBA}. \quad (2.88)$$

La unión de la sección eficaz anterior con las correcciones por los efectos electrónicos relativistas y los de ligadura y polarización, se efectúa tomando en cuenta esta corrección

que hay que hacer en todos los parámetros que contengan a  $q_{0s}$ , por pérdida de energía. Tendremos entonces que la sección de ionización que considera todos estos efectos puede escribirse como:

$$\sigma_s^{ECPSSR} = C_s \left( \frac{2\pi dq_{0s}\zeta_s}{z_s(1+z_s)} \right) f_s(z_s) \sigma_s^{PWBA}(\xi_s^R/\zeta, \zeta_s\theta_s), \quad (2.89)$$

donde ahora

$$z_s = \left( 1 - \frac{\zeta_s \hbar \omega_{2s} m_1}{mE_1} \right)^{1/2}. \quad (2.90)$$

Esta expresión es la sección de ionización en la aproximación ECPSSR, que como se observa, puede calcularse fácilmente a partir de la PWBA introduciendo los factores de corrección y parámetros modificados adecuados.

Cuando la sección de ionización se determina con la ECPSSR a partir de valores de la PWBA calculados con los límites correctos de integración, Ecs. (2.22), simplemente el factor  $f_s(z_s)$  se omite, pero si se deberán de considerar las demás correcciones por pérdida de energía en la deflexión coulombiana. De esta forma la sección se determina a partir de:

$$\sigma_s^{ECPSSR} = C_s \left( \frac{2\pi dq_{0s}\zeta_s}{z_s(1+z_s)} \right) \sigma_s^{PWBA}(\xi_s^R/\zeta, \zeta_s\theta_s). \quad (2.91)$$

### 2.5.5 Cálculos a partir de la ECPSSR.

Una vez que se toman en cuenta todas las correcciones anteriores (secciones 2.5.1 a 2.5.4), se obtiene la aproximación ECPSSR. Usando esta aproximación, las secciones de ionización son fáciles de calcular a partir de las tablas de secciones de la PWBA y de las ecuaciones (2.89) o (2.91) dependiendo de si en las tablas se utilizan los límites de integración aproximados o exactos. En el Apéndice B mostramos un ejemplo del cálculo de una de estas secciones con la ECPSSR.

También, existen tablas de las secciones de ionización calculadas directamente a partir de la ECPSSR. Cohen y Harrigan presentan tablas de estas secciones para las capas K y L utilizando protones y helio [COHD85] y utilizando deuterio [COHD89], en elementos desde C hasta Am en el intervalo de energías de 100 keV hasta 10 MeV. Estas secciones están calculadas a partir de funciones de onda hidrogenoides no relativistas, utilizando los factores de forma dados en las Ecs. (2.25) a (2.29). Además las calculan integrando sobre

los límites exactos de la Ec. (2.20), por lo cual la ECPSSR la determinan de la Ec. (2.91). Chen y Crasemann [CHEM85, CHEM89] calculan las secciones de ionización de capas K y L por protones utilizando funciones de onda relativistas por medio del método de Dirac-Hartree-Slater (DHS). Estas tablas dan las secciones para 27 elementos solamente, en el intervalo de 150 keV a 3 MeV [CHEM85]. Luego extienden las tablas hasta 5 MeV para las capas K y L [CHEM89] y además determinan las secciones de capas M para 15 elementos en el intervalo de 60 keV a 2 MeV [CHEM89]. También se han diseñado algoritmos que por medio de programas de cómputo permiten determinar las secciones de ionización con la ECPSSR [SMIT89].

Los cálculos de la ECPSSR usando protones y helio, muestran que para la capa K en la región de  $\xi_K^R > 0.25$  las secciones presentan un ajuste dentro del 10-20% con datos experimentales. Pero para  $\xi_K^R < 0.25$  las predicciones sobrestiman a los resultados experimentales. Discrepancias mayores se observan cuando se utilizan iones más pesados. Para el caso de las capas L, el ajuste es peor que con respecto a la capa K. Los valores experimentales difieren en general dentro del 50-60% para  $\xi_L^R < 1$ , (ver el capítulo 4). Estas discrepancias aumentan a medida que  $Z_1$  aumenta.

### 2.5.6 Correcciones a la ECPSSR.

Se han propuesto algunas correcciones aplicadas a la ECPSSR con la finalidad de mejorar los resultados del modelo. Estas correcciones todavía no se encuentran en un estado final que les permita ser aplicadas directamente en el cálculo de secciones de ionización, en una forma similar a la PWBA o la ECPSSR. En esta sección mencionaremos sólo las que presentan mayor consistencia y se encuentran más frecuentemente en la literatura. Estas correcciones están enfocadas principalmente al cambio en la energía de ligadura del electrón debido a la presencia del proyectil. Estudios realizados en las capas L [PERES7, PERES7b], muestran que en los cálculos de los cocientes  $\sigma_{L1}/\sigma_{L2}$  y  $\sigma_{L1}/\sigma_{L3}$  existen discrepancias significativas dependiendo del tipo de corrección por efecto de ligadura que se utilice. Esta fuerte dependencia con el tipo de corrección por ligadura depende por una parte en la dificultad de reproducir el efecto del nodo en la función de onda del nivel  $2S_{1/2}$  [VIGM90] y por otra parte, en la forma en cómo es considerada la interacción entre el proyectil y el electrón.

La determinación del efecto de ligadura efectuada por medio de la PSS, (ver sección 2.5.1.), se hizo considerando la perturbación del proyectil sobre un electrón ligado al átomo. En este caso el electrón se consideró independiente del proyectil, pues durante la interacción, el electrón no forma parte de ningún tipo de estado ligado al proyectil. A este tipo de consideración se suele llamar aproximación de átomo separado (separated atom approximation, SA).

Andersen *et al.* [ANDJ76, ANDJ82] comentan que cuando  $\xi_s \leq 1$ , (es decir, la velocidad de la interacción sea menor que la del electrón en el átomo), es posible la modificación de la función de onda del electrón, de tal manera que cambian entonces su energía de ligadura y velocidad. Por ejemplo, en el caso de la capa K, el cambio en la energía de ligadura del electrón calculada a partir de la Ec. (2.57), para una distancia R dada y con funciones de onda hidrogenoides no perturbadas de radio  $r_K \approx a_{2K}$  es:

$$\Delta E_K(R, r_K) = \frac{Z_1 e^2}{R} \left[ 1 - \left( 1 + \frac{R}{r_K} \right) \exp \frac{-2R}{r_K} \right]. \quad (2.92)$$

Si la colisión es lenta, la función de onda del electrón podrá "relajarse" y cambiar de tal manera que corresponda a un estado en el cual la energía de ligadura del electrón con el átomo y el ion sea mínima. Esta función de onda la podemos estimar por medio de variaciones del radio de la capa K, de manera que se obtenga un  $r'_K$ , minimice la energía de ligadura del electrón:

$$E_B(r'_K) = \frac{e^2 a_0}{2r'^2_K} - \frac{Z_{2K} e^2}{r'_K} + \Delta E_K(R, r'_K). \quad (2.93)$$

Aquí, el primer término de la derecha corresponde a la energía cinética del electrón y el segundo al potencial de atracción por el núcleo apantallado. El tercer término está dado por la Ec. (2.92), evaluada en  $r'_K$  en lugar de  $r_K$ . La aproximación anterior en su caso más extremo se le conoce como de átomo unido, (United Atom, UA), pues el electrón se puede suponer moviéndose en el potencial de un átomo con número atómico  $Z_{2s} + Z_1$ . La distancia R depende del parámetro de impacto del ion y para la de mínima separación al núcleo está dada por:

$$R_{min} = \frac{b_0}{2} + \sqrt{\frac{b_0^2}{4} + b^2}, \quad (2.94)$$

donde  $b_0 = 2d$  es la distancia de máximo acercamiento en una colisión de frente. Pero debido a que el cálculo de la sección de transferencia de energía al electrón Ec. (2.46),

está aproximadamente dado en términos de potencias de  $q_{2s}^{-1} = r_{ad} = \hbar\omega_{2s}/\hbar v_1$ , se sugiere evaluar el cambio en la de energía de ligadura en [ANDJ82]:

$$R' = [R_{min}^2 + r_{ad}^2]^{1/2}. \quad (2.95)$$

Aquí a  $r_{ad}$  se le conoce como distancia adiabática de la colisión. De esta forma, puede determinarse el factor de corrección análogamente al de la Ec. (2.56), a partir de la Ec. (2.93) evaluando  $R$  en la distancia  $R'$ , Ec. (2.95), e integrando con respecto a los parámetros de impacto  $b$  posibles. La ventaja que presenta evaluar en  $R'$  es que el efecto de esta corrección por ligadura desaparece cuando tenemos  $\xi_s \gg 1$ . Además, para  $\xi_s \ll 1$  se encuentra que los resultados no difieren mucho si se utiliza la Ec. (2.94) o la Ec. (2.95). Estudios de la capa K considerando esta corrección en elementos con  $22 \leq Z_2 \leq 30$  muestran mejores ajustes que la ECPSSR. En general se ha observado que lo anterior es útil aun para  $\xi_K < 0.25$  en la capa K y para  $\xi_{L_i} < 0.5$  en las capas L.

El inconveniente que presenta la corrección calculada de este modo es que el radio  $r'_K$  se tiene que determinar de la Ec. (2.93) por medio de iteraciones y depende del elemento blanco, lo cual es más complicado que la simple corrección a partir de la Ec. (2.92). Todo lo anterior también se puede aplicar en forma similar al caso de las capas L.

Por otro lado, se han presentado varios modelos que involucran diferentes procesos de tipo molecular que pueden influir en la ionización a bajas energías [WILU86]. Pero estudios de M. Geretschläger y Benka [GERM86] muestran que muy probablemente las desviaciones en las secciones de ionización no se deben ni a la captura electrónica, ni al movimiento del electrón en órbitas cuasimoleculares y ni a la excitación por átomos del blanco en retroceso. Por estos motivos, Benka *et al.* [BENO87] proponen que estas desviaciones son debidas a la formación de orbitales moleculares (MO) en la colisión a bajas energías. Para esto primero consideran que si  $\xi < 1$  debe de dominar la aproximación de átomo unido y si  $\xi > 1$  debe de dominar la de átomos separados. De esta manera, introducen una función  $\alpha(\xi)$  tal que sólo pueda tomar valores en  $0 \leq \alpha(\xi) \leq 1$  y que tenga las propiedades de que  $\alpha = 0$  si se considera la aproximación SA ( $\xi \gg 1$ ) y  $\alpha = 1$  si considera la UA ( $\xi \ll 1$ ). Una función que cumple con estas propiedades y que definen por conveniencia es [BENO87]:

$$\alpha(\xi) = f(\xi)\alpha_s(\xi_D), \quad (2.96)$$

donde

$$f(\xi) = \exp\left(-\frac{(\xi - \xi_D)^2}{\xi^2}\right), \quad (2.97)$$

y

$$\alpha_s(\xi) = \frac{1 + e^{-\xi_0/a}}{1 + e^{(\xi - \xi_0)/a}}. \quad (2.98)$$

Los parámetros  $\xi_D$ ,  $\xi_0$  y  $a$  se definen como:

$$\xi_D = \frac{2d}{a_{2s}} + \sqrt{\frac{(2d)^2}{a_{2s}^2} + \xi^2}, \quad (2.99)$$

$$\xi_0 = C_M \xi_M \quad \text{y} \quad a = C_A \xi_M, \quad (2.100)$$

donde

$$\xi_M = \frac{Z_1(Z_{2s} + Z_1)}{Z_{2s}^2}, \quad (2.101)$$

y  $C_M$  y  $C_A$  son parámetros que se determinan a partir del mejor ajuste a datos experimentales. A través de esta función  $\alpha$  se dan las correcciones en la ECPSSR por medio de los siguientes pasos:

1.- La  $Z_{2s}$  se cambia por  $Z_{2s}^\alpha = Z_{2s} + \alpha Z_1$ , y consecuentemente todo lo que dependa de ésta, como es el caso de  $\xi_s$  que cambia por  $\xi_s^\alpha$ .

2.- Se cambia  $\theta_{2s}$  por  $\theta_s^\alpha$  donde:

$$\theta_s^\alpha = \frac{\hbar\omega_{2k}}{(Z_{2s} + \alpha Z_1)^2 R_\infty}. \quad (2.102)$$

Obsérvese que si  $\alpha = 1$  tenemos la aproximación UA,  $\theta_s^\alpha = \theta_s^{UA}$  y si  $\alpha = 0$  se tiene la SA,  $\theta_s^\alpha = \theta_s$ .

3.- El factor de corrección por ligadura y polarización  $\zeta_s$ , Ec. (2.70), se cambia por:

$$\zeta_s^\alpha = 1 + 2(1 - \alpha)Z_1 [g(\xi^\alpha) - h(\xi^\alpha)] / Z_{2s}^\alpha \theta_s^\alpha. \quad (103)$$

Entonces se tiene que cuando  $\alpha = 0$  no cambia la ECPSSR y cuando  $\alpha = 1$  se tiene la aproximación UA-ECPSSR. Todo este modelo en conjunto de Benka *et al.* [BENO87] se denota por MECPSSR. El efecto de MO se traduce en este caso como en un aumento en la energía de ligadura del electrón, pero también aumenta su velocidad orbital, que resulta

en un aumento en la sección de ionización. En este modelo cuando  $Z_1 = 1, 2$  y  $Z_{2a} > 20$ , se tiene que  $\xi_M$  es muy pequeña y entonces  $\alpha(\xi) \approx 0$ , por lo que entonces no se espera la presencia de la formación de orbitales moleculares. Sólo para  $Z_1$  grande y pequeños valores de  $\xi$  se espera que el MO sea importante e incrementa la sección de ionización. Comparaciones de la MECPSSR con datos experimentales muestran muy buenos ajustes [GERM88, GERM90]. El inconveniente de este modelo es que hay que recurrir al ajuste de los parámetros  $C_M$  y  $C_A$  con datos experimentales, lo cual es bastante complicado y además de que no es totalmente teórico el ajuste.

Vigilante *et al.* [VIGM90] han propuesto una simplificación en la aplicación de la aproximación de átomo unido, UA-ECPSSR. Esta consiste en determinar los valores de  $\xi_s = \xi_s(UA)$  a partir de los cuales la formación de MO comienza a ser importante y puede ser tratada por medio de la aproximación de UA. Una vez determinado este valor, el estudio de la ionización se efectúa utilizando directamente la ECPSSR sin ninguna otra corrección si  $\xi_s > \xi_s(UA)$ , pero por otra parte, cuando se tiene  $\xi_s < \xi_s(UA)$  se toma la aproximación UA en la corrección por ligadura de la ECPSSR. Esto lo hacen a partir del factor de corrección por ligadura,  $\epsilon_s^B(\xi_s)$  de la Ec. (2.59), dándole el valor que toma en  $\xi_s(UA)$ , para todas las  $\xi_s < \xi_s(UA)$ . La aproximación de UA para  $\xi_s(UA)$  puede tomarse a partir de las ecuaciones análogas a las Ecs. (2.92) y (2.93), dependiendo de la capa atómica. Aunque también, otra forma es suponiendo totalmente el átomo unido y simplemente se reemplaza en la  $\epsilon_s^B$  todo lo que dependa de  $Z_{2s}$  por  $Z_{2s} + Z_1$ .

Con este modelo UA-ECPSSR se observan muy buenos resultados para las secciones de ionización de capas L usando protone y helio [VIGM90, PERE90]. El inconveniente que presenta este modelo es que requiere de la comparación con datos experimentales para determinar las  $\xi_s(UA)$  de cada elemento, (no como un modelo de tipo universal como la ECPSSR), así como también algunos de los inconvenientes de la UA.

## CAPITULO III

### DESARROLLO EXPERIMENTAL

En este capítulo se explica cómo se efectuó la medición de las secciones de producción de rayos X L por incidencia de protones. Se describe el dispositivo experimental empleado, así como también la obtención de de las secciones de ionización de capas L a partir de las secciones de rayos X L medidas en este trabajo.

#### 3.1 DISPOSITIVO EXPERIMENTAL.

##### 3.1.1 Acelerador y Cámara de Análisis.

Los experimentos fueron llevados a cabo utilizando el acelerador Van de Graaff de 700 kV del instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México. Los blancos se colocaron en una cámara de análisis, como se indica en la Figura 3.1 . Vacíos menores de  $1.5 \times 10^{-5}$  torr fueron registrados durante los experimentos. El haz de protones fue definido por medio de un colimador de 1 mm de diámetro e incide a  $45^\circ$  de la normal al blanco. Las marcas del haz observadas en los blancos coincidían con el tamaño del colimador.

Los rayos X inducidos en los blancos fueron registrados por medio de un detector de silicio con litio difundido, Si(Li), marca Canberra, modelo SL30165. El detector de Si(Li) se encuentra perpendicular al haz y a  $45^\circ$  de la normal del blanco, (ver Figura 3.1). Las señales producidas en este detector fueron amplificadas por medio de un amplificador Canberra modelo 2020. Los pulsos fueron acumulados por medio de una tarjeta multicanal (MCA) Ortec, para microcomputadora. La resolución del sistema de detección fue de 180 eV para la línea de Mn  $K_\alpha$  de 5.9 keV. Los rayos X producidos en el blanco antes de llegar a la ventana de Be del detector de Si(Li) deben de atravesar la ventana de mylar de la cámara de  $60 \pm 5 \mu\text{m}$  de espesor y una capa de aire de  $1.6 \pm 0.05$  cm. Un colimador de plomo de 4 mm de diámetro y 5 mm de espesor, se colocó enfrente de la ventana de Be del detector para mejorar la resolución de éste.

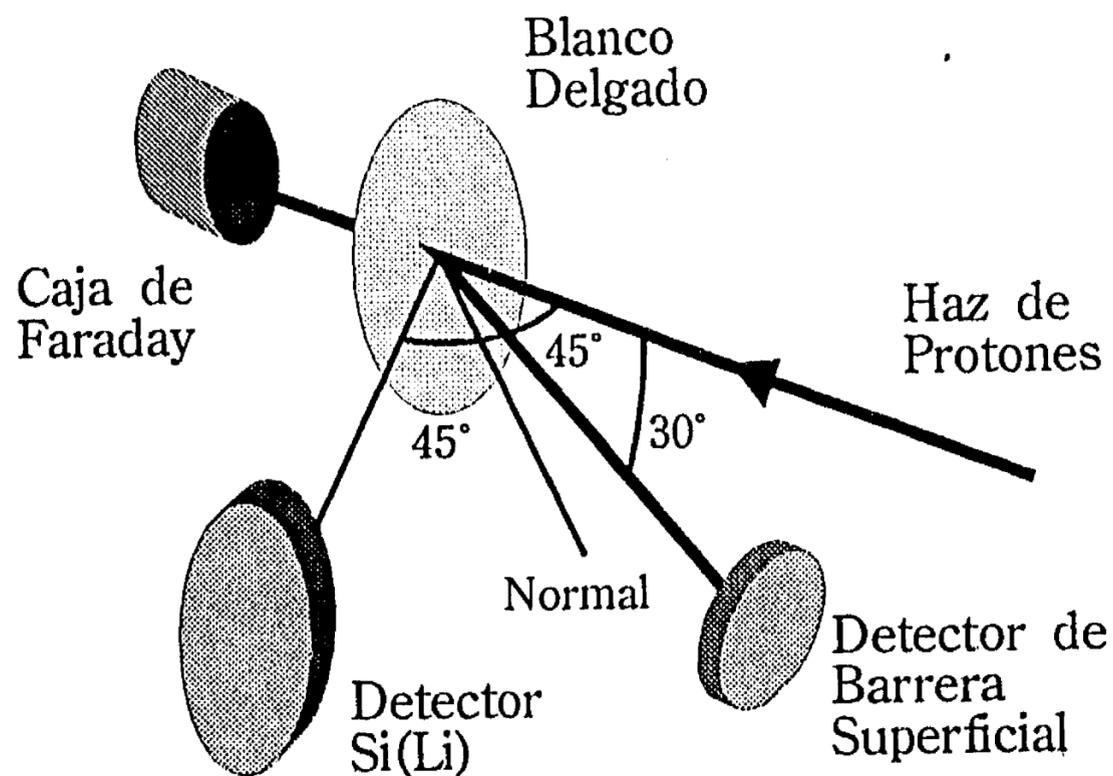


Figura 3.1 Representación del dispositivo experimental empleado en la cámara de análisis.

Un detector de barrera superficial se colocó a  $150^\circ$  del haz incidente, siguiendo una geometría de "Cornell," (ver Figura 3.1). Un colimador de 1 mm de diámetro fue colocado enfrente del detector de barrera superficial, para definir el ángulo sólido que subtiende este detector con respecto al punto donde los protones chocan con el blanco. Este ángulo sólido se midió directamente y fue de  $\Omega_R = (1.93 \pm 0.14) \times 10^{-4}$  sterr. Los espectros de retrodispersión de iones, RBS, fueron acumulados también por medio de otra tarjeta multicanal.

La corriente de haz fue monitoreada, en principio, por medio de la carga colectada en el blanco a través de un integrador de corriente de carga Ortec, modelo 771.

### 3.1.2 Calibración en Energía del electroimán Selector.

La energía de los protones con la que se bombardea el blanco se selecciona por medio de un electroimán deflector. Esta selección se efectúa variando la intensidad del campo magnético, el cual se monitorea a través de la resonancia magnética nuclear, RMN, de hidrógeno.

La calibración en energía del electroimán se efectuó determinando las frecuencias de la RMN para las cuales la reacción nuclear  $^{19}\text{F}(p, \alpha\gamma)^{16}\text{O}$  presenta las resonancias a 483.6, 596.8 y 671.6 keV [MAYJ77]. Para esto, se bombardeó con protones un blanco constituido por una lámina de aluminio sometida a un ataque químico con ácido fluorhídrico. Los rayos  $\gamma$  producidos en la reacción fueron detectados con un detector centellador de NaI(Ta), colocado a cero grados de la dirección del haz.

### 3.1.3 Calibración del Sistema de Detección.

La eficiencia absoluta del sistema de detección del Si(Li) es un factor fundamental para la exacta cuantificación de los rayos X producidos en el blanco. Gran atención se dió a este factor durante el desarrollo de los experimentos para la medición de secciones de producción de rayos X L.

#### 3.1.3.1 Caracterización del detector de Si(Li).

Para obtener las mejores condiciones del sistema de detección de rayos X, se procedió a hacer un estudio de los parámetros fundamentales del detector de Si(Li). Estos parámetros también son muy importantes en los programas de cómputo de análisis de espectros, pues se toman como valores iniciales en los ajustes.

Antes de colocar el detector en la cámara de análisis se determinó el área activa y la distancia de la ventana de Be al detector. El tamaño del área activa se determinó efectuando un barrido de la ventana del detector con un haz de rayos X y  $\gamma$  finamente colimado [CAMJ84], obtenido a partir de una fuente radiactiva de  $^{57}\text{Co}$  y un colimador de plomo de  $0.6 \pm 0.1$  mm de diámetro y 1 cm de espesor. Estas medidas se efectuaron considerando iguales intervalos de tiempo y con el barrido en pasos de  $0.5 \pm 0.1$  mm. Por otra parte, colocando una fuente radiactiva puntual de  $^{57}\text{Co}$  a diferentes distancias del

crystal de Si(Li), sobre su eje de simetría radial y observando el cambio en el número de cuentas registradas por el detector debido al cambio en el ángulo sólido, se determinó la distancia del detector a la ventana de Be.

Como el ángulo que subtiende el detector de Si(Li) con alguna fuente de radiación depende de la energía de los fotones que le incidan [HANJ73], conociendo los dos parámetros anteriores se encontró que con un colimador de 4 mm de diámetro enfrente de la ventana de Be del detector permite eliminar en gran medida la dependencia en energía del ángulo sólido. También, con este colimador se mejora la resolución del detector, pues permite que los fotones interactúen principalmente en las partes centrales de la región activa del detector y se reduzcan los efectos de mala colección de carga en el cristal de Si(Li)

Una vez colocado el detector en la cámara de análisis se indujeron rayos X en diferentes blancos por medio de protones y se pudo comprobar la linealidad en la respuesta del detector con la energía de los fotones de rayos X. El factor de Fano  $F$  del detector y el ruido electrónico  $W_{elec}$  del sistema de detección, se determinó graficando el cuadrado del FWHM de los picos contra la energía de los fotones que los producen [KNOG89]. El ruido electrónico también se midió utilizando un generador de pulsos, obteniendo resultados similares.

La expresión más frecuente para la eficiencia absoluta de un detector de Si(Li),  $\varepsilon_0$ , está dada como [CAMJ90]:

$$\varepsilon_0(E) = \frac{\Omega}{4\pi} \exp\left(-\sum_j \mu_j x_j\right) f_{esc} (1 - \exp(-\mu_{Si} D)). \quad (3.1)$$

donde  $\Omega$  es el ángulo sólido del detector que depende de la energía de los rayos X; las  $x_j$  son los espesores de la ventana de Be ( $x_{Be}$ ), una posible capa de hielo ( $x_{ice}$ ), el contacto de Au ( $x_{Au}$ ) y la capa muerta de Si ( $x_0$ ); los  $\mu_j$  son sus respectivos coeficientes de atenuación;  $f_{esc}$  es el factor de corrección debido a los picos de escape de la región activa del detector; y  $D$  es el espesor activo del detector. Estos parámetros son característicos de cada detector y difieren de uno a otro.

Luego, la eficiencia absoluta del sistema de detección está dada como

$$\varepsilon(E) = T(E)\varepsilon_0(E), \quad (3.2)$$

donde  $T(E)$  es un factor que contiene la absorción de los rayos X en filtros externos al detector, como son la ventana de mylar de la cámara y una capa de aire. Para el detector utilizado, el espesor de la ventana de Be se consideró igual al indicado por el fabricante. La capa de Au se midió por medio de la fluorescencia por de fotones de energía poco mayor que la de la orilla de absorción del Au de 11.92 keV [SHIK80]. Para esto, se utilizaron como excitadores las líneas de emisión de Sr  $K_{\alpha}$ , a partir de una fuente radiactiva de  $^{88}\text{Y}$  y de Br  $K_{\alpha}$ , por medio de PIXE en un blanco de NaBr.

Para medir el espesor de la capa muerta también se empleó la fluorescencia de rayos X, empleando en este caso fotones de energía mayor que la orilla de absorción del Si de 1.84 keV. La excitación se llevó a cabo por medio de la línea de emisión S  $K_{\alpha}$  inducida bombardeando con Protones. En el espectro obtenido no se encontró la presencia de ningún pico de Si  $K_{\alpha}$ . Considerando que en PIXE el límite de detección está dado por:  $N_p \leq 3\sqrt{N_B}$  [ISHK90] donde  $N_p$  es el número de cuentas en el pico y  $N_B$  es el número de cuentas que hay de ruido en la región del FWHM del pico, se determinó un valor máximo posible para la capa muerta.

La presencia de una capa de hielo formada enfrente del cristal de Si(Li) ha sido sugerida por Cohen [COHDS2]. Se ha encontrado que esta capa aumenta con el tiempo. Para nuestro sistema experimental empleado se puede esperar una capa de hielo enfrente del detector y otra de contaminantes como polvo y aceite en las ventanas de Be del detector y en la ventana de mylar de la cámara de análisis respectivamente. Por conveniencia, estas tres capas se pueden considerar como una sola capa de "hielo equivalente". El espesor de esta capa de hielo se puede determinar a partir del ajuste de la forma paramétrica de la eficiencia  $E_c$ . (3.2) a valores experimentales de la eficiencia, utilizando mínimos cuadrados no lineales [BEVP69]. De esta manera considerando a la capa muerta y a la de "hielo equivalente", como parámetros a ajustar, se determinaron sus espesores. En un lapso de siete meses se encontró un aumento en el espesor de la capa de "hielo equivalente".

El ángulo sólido que subtiende el detector en la cámara junto con el colimador enfrente de la ventana de Be no depende ya en este caso de la energía de los fotones, como ya se ha mencionado. Pero por otro lado, la determinación de este ángulo sólido es difícil de medir directamente, por lo cual su determinación también se hizo por medio del ajuste por

TABLA 3.1 Parámetros del detector de Si(Li).

Parámetro	Procedimiento
$\Omega = (7.04 \pm 0.34) \times 10^{-3}$ ster	ajustado
$x_{Be} = 25$ $\mu\text{m}$	valor del fabricante
$x_0 = 0.021 \pm 0.0034$ $\mu\text{m}$	ajustado
$x_{Au} = 0.047 \pm 0.008$ $\mu\text{m}$	medido
$x_{ice} = 11 \pm 1.9$ $\mu\text{m}$ (inicial)	ajustado
$x_{ice} = 19 \pm 3.3$ $\mu\text{m}$ (siete meses después)	ajustado
$D = 3$ mm	valor del fabricante
resolución = 180 eV para Mn $K_{\alpha}$	medido
diámetro activo = $5.6 \pm 0.4$ mm	medido
distancia de la ventana de Be al detector = $5.8 \pm 1.0$ mm	medido
$F = 0.16 \pm 0.012$	medido
$W_{elec} = 135 \pm 15$ eV	medido

mínimos cuadrados no lineales a la Ec. (3.2). El espesor activo D es la región del cristal de Si(Li) donde la colección de carga es completa. Para este espesor se consideró el tamaño del cristal.

Las intensidades relativas de los picos de escape con su pico padre, obtenidos experimentalmente, coincidieron con las predichas por el modelo teórico de Reed and Ware [REES72], lo cual garantiza que los fotones inciden en dirección normal al detector [JOHG82] en el dispositivo experimental empleado. En la tabla 3.1 se indican los parámetros determinados para el detector utilizado.

### 3.1.3.2 Eficiencia experimental del detector de Si(Li).

En la determinación experimental de la eficiencia del detector de rayos X, se puso especial cuidado en la región de 3 a 14 keV, dentro de la cual se encuentran los fotones

inducidos en los presentes experimentos. La eficiencia del Si(Li) se determinó por medio de fuentes radioactivas puntuales calibradas y por medio de la inducción de rayos X en películas delgadas utilizando protones.

Las fuentes radioactivas empleadas fueron  $^{54}\text{Mn}$ ,  $^{57}\text{Co}$ ,  $^{88}\text{Y}$ ,  $^{133}\text{Ba}$ ,  $^{203}\text{Hg}$  y  $^{241}\text{Am}$ . Estas fuentes fueron adquiridas a la Compañía Amershan, Inglaterra, la cual expidió su certificado de calibración de cada una de ellas. Estas fuentes consistían en una pequeña cantidad de material radioactivo de aproximadamente 1 mm de diámetro, encapsuladas en polymethylmetacrilato de 0.5 mm de espesor. Al momento de calibrar el detector, cada fuente fue colocada en el portamuestras de la cámara de análisis justo en el mismo lugar y a la misma profundidad donde pegaba el haz de protones sobre las muestras. La eficiencia se determina en este caso a partir de:

$$\varepsilon(E_\gamma) = \frac{N_X f_c}{A \Gamma(E_\gamma)} \quad (3.3)$$

donde  $N_X$  es el número de rayos X o  $\gamma$  de energía  $E_\gamma$  detectados,  $A$  es la actividad de la fuente,  $\Gamma(E)$  es la proporción de rayos X o  $\gamma$  emitidos por decaimiento y  $f_c$  es un factor de corrección debido al encapsulado de la fuente.

Los valores de  $\Gamma(E)$  se tomaron de la revisión de éstos hecha por Campbell y McGhee [CAMJ86], excepto para la fuente de  $^{203}\text{Hg}$ , cuyos valores se obtuvieron de las tablas de Browne y Firestone [BROE86]. En la tabla 3.2 se indican las energías de las líneas de emisión de rayos X o  $\gamma$  de las fuentes radioactivas empleadas en la calibración.

La calibración utilizando PIXE se realizó de acuerdo al método propuesto por Lennar y Phillips [LENW79]. En éste, se hace uso del conocimiento más preciso y exacto que se tiene actualmente de las secciones de producción de rayos X K por incidencia de protones. La ventaja que presenta este método es que al bombardear películas delgadas permite el empleo de la retrodispersión de Rutherford, RBS, para no tener necesidad de considerar la carga acumulada y la densidad del blanco en el cálculo de la eficiencia. En este caso la eficiencia para fotones de rayos X de energía  $E_X$  está dada por:

$$\varepsilon(E_X) = \frac{N_X \sigma_R(E_0) \Omega_R F_R}{N_R f \omega_K \sigma_K(E_0) F_X} \quad (3.4)$$

donde  $N_X$  y  $N_R$  son respectivamente el número de rayos X de energía  $E_X$  detectados y el número de iones retrodispersados por los átomos del elemento que produce estos rayos X;

Tabla 3.2 Fuentes radiactivas y líneas de emisión utilizadas en la calibración.

Fuente	Línea de Emisión	Energía [keV]
$^{57}\text{Co}$	$\gamma_{14}$	14.41
$^{88}\text{Y}$	Sr $K\alpha$	14.142
	Sr $K\beta$	16.765
$^{133}\text{Ba}$	Cs $K\alpha$	30.85
	Cs $K\beta_1$	34.97
	Cs $K\beta_2$	36.006
	$\gamma_{53}$	53.148
	$\gamma_{79}$ y $\gamma_{80}$	80.87
$^{137}\text{Cs}$	Ba $K\alpha$	32.06
	Ba $K\beta_1$	36.357
	Ba $K\beta_2$	37.45
$^{203}\text{Hg}$	Tl $K\alpha$	72.11
	Tl $K\beta_1$	82.434
	Tl $K\beta_2$	85.185
$^{241}\text{Am}$	Np $L\alpha$	13.927
	Np $L\eta\beta$	17.611
	Np $L\gamma$	20.997
	$\gamma_{26}$	26.35
	$\gamma_{59}$	59.536

$\sigma_K(E_0)$  y  $\sigma_R(E_0)$  son respectivamente la sección de ionización de la capa K y la sección eficaz de retrodispersión, para iones de energía  $E_0$ ;  $\omega_K$  es la fluorescencia de la capa K;  $f$  es la proporción de rayos X  $K\alpha$  o  $K\beta$  emitidos por vacancias en la capa K;  $F_X$  y  $F_R$  son respectivamente factores de corrección debidos a los efectos del frenamiento del proyectil en  $\sigma_K$  y  $\sigma_R$ , junto con el atenuamiento de los rayos X al ser autoabsorvidos en la propia película.

Se define  $F_R = Y_R/Y_R^0$  donde  $Y_R$  es el número de iones retrodispersados cuando se considera el frenamiento en la película de espesor  $T$  y  $Y_R^0$  cuando no hay frenamiento, ( $T \rightarrow 0$ ). Análogamente,  $F_X = Y_X/Y_X^0$ , donde  $Y_X$  es el número de rayos X producidos cuando se considera el frenamiento del ion y el atenuamiento de los rayos X en el blanco, y  $Y_X^0$  cuando no hay frenamiento y atenuamiento, ( $T \rightarrow 0$ ). Considerando que la sección de ionización de la capa K y el poder de frenamiento, para pequeños intervalos de energía dependen como  $E^\alpha$  y  $E^\beta$  respectivamente, Pajek *et al.* [PAJM] deduce una expresión para estas correcciones cuando son pequeñas. Si el ángulo de incidencia de los iones es a  $45^\circ$  de la normal al blanco y el detector de Si(Li) se encuentra perpendicular al haz, la expresión es:

$$F(E_0, \Delta E) = \frac{F_R}{F_X} = \frac{1 + \frac{1}{2}(\beta + 2)\frac{\Delta E}{E_0}}{1 - \frac{1}{2}\left(\alpha - \beta + \frac{\mu E_0}{S(E_0)}\right)\frac{\Delta E}{E_0}} \quad (3.5)$$

donde  $S(E_0) = dE/dx$  el frenamiento evaluado en  $E_0$  y  $\Delta E = S(E_0)T$ ; finalmente  $\mu$  es el coeficiente de atenuación de los rayos X en el blanco.

La calibración del Si(Li) utilizando PIXE se efectuó bombardeando películas delgadas ( $\approx 50\mu\text{g}/\text{cm}^2$ ) de Al, SiO, GaP,  $\text{CuS}_x$ , NaCl, KI,  $\text{CaF}_2$ ,  $\text{ScF}_3$ , Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Ge, CsBr y RbI, evaporadas sobre mylar. Estas películas delgadas fueron adquiridas a la compañía Micromater, Estados Unidos. Las películas fueron bombardeadas con protones a energías alrededor de los 700 keV. Corrientes pequeñas, entre 2 y 6 nanoamperes, se emplearon para no tener apilamiento en los detectores y no dañar en poco tiempo las películas. Las razones de conteo del detector de Si(Li) se mantuvieron menores de 140 cuentas por segundo. La eficiencia se determinó a partir de las ecuaciones (3.4) y (3.5). Las áreas  $N_X$  de los picos de rayos X fueron determinadas utilizando el programa de cómputo AXIL [VANP79], para el análisis de espectros de rayos X por PIXE o XRF. Las áreas  $N_R$  fueron determinadas utilizando el programa de cómputo RUMP [DOOL86].

Las  $\sigma_K(E_0)$  se obtuvieron de las tablas de valores de secciones de "referencia" de Paul y Sacher [PAUH89]. Las  $\sigma_R(E_0)$  se determinaron a partir de la conocida fórmula de Rutherford [CHUW78] y utilizando la corrección para iones de baja energía de L'Ecuyere [LECJ79]. Los valores de  $\omega_K$  se tomaron de las tablas de Krause [KRAM79] y los de  $f$  se obtuvieron a partir de las razones de las intensidades  $K_\beta/K_\alpha$  de Khan y Karimi [KHARS0].

Para el factor de corrección, Ec. (3.5), el valor de  $\alpha$  se determinó a partir de un ajuste a valores de  $\sigma_K(E)$  de las tablas de Paul y Sacher [PAUH89]. Los valores de  $\beta$  y  $S(E_0)$  se obtuvieron a partir de los ajustes semiempíricos de Ziegler *et al* [ZIEJ85], para el poder de frenamiento. Los valores de  $\mu$  se obtuvieron a partir del programa de cómputo ATTENV4 de Orlic *et al.* [ORLI93], que utiliza la compilación de datos del programa de cómputo XCOM [BERM87] para fotones de alta energía y funciones semiempíricas para los de baja energía.

Los espesores de las películas se obtuvieron a partir de los valores en masa depositados e indicados por el fabricante. Se encontró consistencia con estos valores al comparar con los espesores medidos a partir de los espectros RBS [CHUW78]. Los factores de corrección obtenidos utilizando el modelo de Pajek *et al*, Ec. (3.5), fueron del orden de 3% o menos.

Otro método para tomar en cuenta los efectos de frenamiento del proyectil y del atenuamiento en la película, es suponer que los rayos X se van a producir a la mitad del espesor de la película. Entonces, tomando en cuenta el dispositivo experimental empleado, la eficiencia queda determinada por:

$$\varepsilon(E_X) = \frac{N_X \sigma_R(E_0 - \frac{1}{2}\Delta E) \Omega_R}{N_R f \omega_K \sigma_K(E_0 - \frac{1}{2}\Delta E)} \exp\left(\frac{1}{2} \frac{\mu T}{\cos 45^\circ}\right). \quad (3.6)$$

Las eficiencias obtenidas con las películas de  $\text{CaF}_3$ , Ti, Cr, Fe y Cu, utilizando la ecuación anterior mostraron una corrección del orden de 3% o menos, en acuerdo con el modelo de Pajek *et al*.

La comparación de los valores de la eficiencia medidos con fuentes radioactivas y con PIXE, muestra un enlazamiento continuo, lo que nos indica consistencia en los valores medidos usando PIXE.

Como la eficiencia absoluta del Si(Li) es fundamental para la exactitud en la determinación de las secciones de producción de rayos X y como ésta además cambia constantemente debido al crecimiento de las capas de hielo y de contaminantes enfrente del detector, la eficiencia se determinó en tres ocasiones, en el periodo durante el cual se efectuaron los experimentos. Estas mediciones se denotaran como eficiencia I, II y III. Por las bajas razones de conteo mantenidas durante los experimentos, solamente se tuvieron que hacer

Tabla 3.3 Parámetros ajustados de la eficiencia usando la función de Gallagher y Cippola para la región de baja energía

Calibración I $\chi_r^2 = 1.19$	Calibración II $\chi_r^2 = 1.21$	Calibración III $\chi_r^2 = 1.27$
$\Omega' = (4.68 \pm 0.15) \times 10^{-4}$	$\Omega' = (3.61 \pm 0.16) \times 10^{-4}$	$\Omega' = (4.56 \pm 0.18) \times 10^{-4}$
$\alpha' = 113 \pm 6.6$	$\alpha' = 96 \pm 6.4$	$\alpha' = 21 \pm 6.8$
$\beta' = 3.42 \pm 0.21$	$\beta' = 3.49 \pm 0.2$	$\beta' = 2.32 \pm 0.19$

muy pequeñas correcciones por tiempo muerto en la calibración I, para las áreas  $N_X$  de las películas de Mn y Co (ver sección 3.1.3.3).

Como las energías de los rayos X L medidos para los elementos con  $52 \leq Z \leq 71$ , van de 3.769 a 10.511 keV y se encuentran entre los bordes de absorción del oro, M1 (3.4249 keV) y L3 (11.9187 keV), nos permiten ignorar en la eficiencia del detector de Si(Li) los efectos del contacto de oro. Aprovechando esto, para describir la eficiencia del detector se prefirió utilizar la función analítica de Gallagher y Cippola [GALW74] ajustada a los valores experimentales de la eficiencia, en lugar de la expresión paramétrica, Ec. (3.2), que es más difícil de aplicar. Esta función analítica para la región de baja energía ( $E \leq 15$  keV) está dada como [MONE85]:

$$\varepsilon(E_X) = \frac{\Omega'}{4\pi} \exp(-\alpha' E_X^{-\beta'}) \quad (3.7)$$

donde los parámetros  $\Omega'$ ,  $\alpha'$  y  $\beta'$ , fueron determinados por medio de un ajuste por mínimos cuadrados no lineales, siguiendo el algoritmo de Mrquardt [BEVP69]. En la tabla 3.3 se muestran los valores de estos parámetros ajustados a los valores experimentales de las eficiencias I, II y III. En la Figura 3.2 se muestran los valores experimentales de la eficiencia I, en la región de mayor interés, junto con el ajuste de la función anterior, Ec. (3.7). La incertidumbre en la eficiencia del detector de Si(Li) fue de 8% para  $E_X \leq 4$  keV y de 5% para  $E_X > 4$  keV.

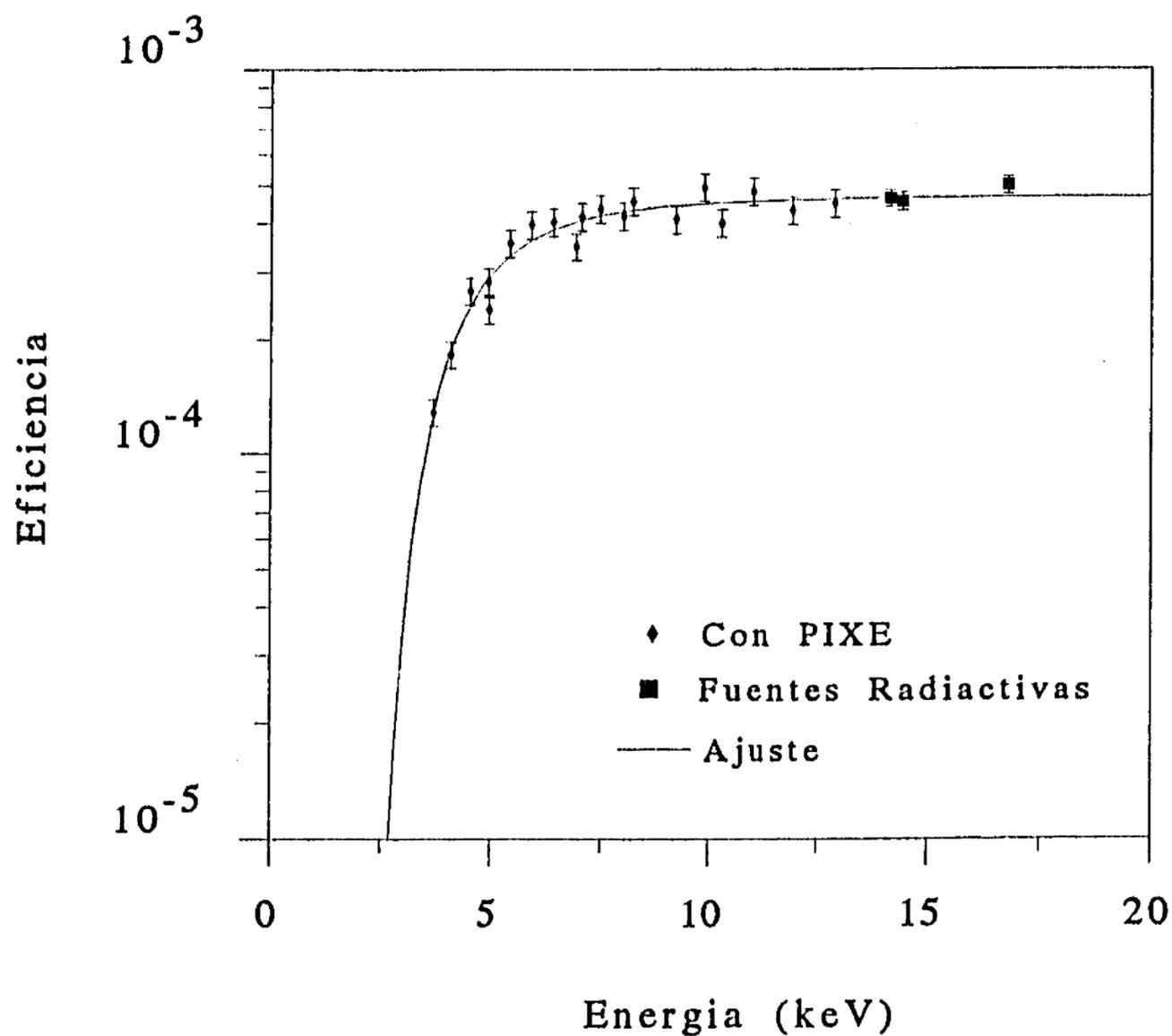


Figura 3.2 Gráfica de la eficiencia I del detector de Si(Li).

### 3.1.3.3 Determinación de Tiempos Muertos.

Para efectuar correcciones por tiempo muerto en los detectores de Si(Li) y de barrera superficial, se determinó un factor de corrección  $f_{tm}$ , en términos de la razones de conteo de los detectores y del tiempo muerto indicado por el MCA. El factor  $f_{tm}$  está dado como la fracción del número de fotones que llegan al detector entre el número de cuentas registradas.

Para determinar el  $f_{tm}$  del detector de Si(Li) se colocó una fuente radiactiva enfrente del detector, junto con un generador de pulsos conectado a la entrada del TEST del preamplificador. El generador produce 60 pulsos por segundo, de tal manera que después de un determinado intervalo de tiempo  $t$ , el valor de  $f_{tm}$ , se obtiene dividiendo el número de pulsos generados durante este tiempo entre el valor del área neta del pico debido al generador de pulsos, que aparece en el MCA. Este mismo procedimiento también se aplicó induciendo rayos X al bombardear con protones varios blancos, que previamente fueron utilizados para calibrar o medir secciones de rayos X. Se observó que para tiempos muertos indicados por el MCA menores de 2.8%,  $f_{tm}$  es prácticamente la unidad y por lo tanto no es necesario efectuar correcciones por tiempo muerto. Para tiempos muertos del MCA mayores del 2.8%, la corrección por tiempo muerto debe de ser tomada en cuenta, multiplicando las áreas de los picos de interés por  $f_{tm}$ .

Debido a las bajas corrientes de protones empleadas en los experimentos y a lo bajo de la sección de producción de rayos X en la mayoría de los casos, sólo en muy pocas ocasiones fue necesario efectuar correcciones de tiempo muerto a los espectros de rayos X.

Para determinar las correcciones por tiempo muerto en las áreas de los espectros de RBS, se repitió el mismo procedimiento anterior con el detector de barrera superficial, utilizando en este caso los protones retrodispersados al bombardear varios blancos con diferentes corrientes y energías. Finalmente se encontró que para todos los espectros RBS que se obtuvieron durante los experimentos, no fue necesario efectuar ninguna corrección por tiempo muerto.

## 3.2 SECCIONES DE PRODUCCION DE RAYOS X L

### 3.2.1 Método para medir secciones de producción de rayos X.

La determinación de las secciones de producción de rayos X por incidencia de iones, se puede obtener utilizando blancos gruesos y blancos delgados. Las primeras medidas de estas secciones se efectuaron utilizando blancos gruesos, [MERE58]. El inconveniente que presenta este método es la necesidad de un conocimiento muy exacto y preciso del frenamiento del ion en el blanco, los coeficientes másicos de atenuación, la densidad atómica del blanco y el valor de la carga acumulada en el blanco durante el experimento, la cual es difícil de medir en muchos casos cuando se tienen blancos gruesos. Además, para tener valores precisos con este método, es necesario bombardear a diferentes energías, con pequeños intervalos de separación.

El empleo de blancos delgados para medir estas secciones es el más utilizado, debido a que es más preciso, pues si se consideran los iones retrodispersados no es necesario conocer la densidad atómica del blanco y la carga acumulada. Además, utilizar blancos delgados es más sencillo, pues se requiere de menor tiempo para obtener las medidas.

Otro método análogo para medir secciones de rayos X de capas L, es normalizando con respecto a las secciones de producción de rayos X K, de tal manera que no se requiere tampoco de conocer la densidad del blanco y la carga acumulada [ROSE83a, ROSE83b].

Por otra parte, Cohen [COHD80, COHD81a, COHD81b] y Harrigan *et al.* [HARM84] al comparar los resultados obtenidos utilizando blancos gruesos y delgados, encuentran que éstos presentan consistencia entre sí, excepto a partir de energías menores de  $\sim 1$  MeV, donde la discrepancia comienza a aumentar. Esta desviación se debe a que las suposiciones en las que se basa la determinación de secciones de rayos X con blancos gruesos no son correctas a bajas energías [COHD81b, TAUK72]. Principalmente el "straggling" del proyectil a bajas energías es el responsable de lo anterior. En este trabajo se optó por el empleo del método de blancos delgados para medir estas secciones.

Cuando se bombardea un blanco delgado con iones de energía  $E_0$ , y se registran simultáneamente los rayos X inducidos, junto con los iones retrodispersados, la sección de

producción de rayos X,  $\sigma_j^X(E_0)$  ( $j = \alpha, \beta$ , etc), del blanco queda determinada por:

$$\sigma_j^X(E_0) = \frac{N_X \Omega_R \sigma_R(E_0)}{\epsilon N_R} \quad (3.8)$$

donde  $\epsilon$  y  $N_X$  son respectivamente la eficiencia y el número de fotones detectados para la línea de emisión  $j$ , en la cual tenemos interés, y  $N_R$  es el número de iones retrodispersados por los átomos del elemento que produce estos rayos X.

Para tomar en cuenta los efectos debidos al frenamiento del ion y al atenuamiento de los rayos X en el blanco delgado de espesor  $T$ , se puede hacer la suposición de que los rayos X se producen a la mitad del espesor del blanco. De esta manera la sección de rayos X se expresa como:

$$\sigma_j^X(E - \frac{1}{2}\Delta E) = \frac{N_X \Omega_R \sigma_R(E - \frac{1}{2}\Delta E)}{\epsilon N_R} \exp(\frac{1}{2} \frac{\mu T}{\cos 45^\circ}). \quad (3.9)$$

donde se ha tomado el caso en que los rayos X detectados son emitidos a  $45^\circ$  con respecto a la normal al blanco.

Otra manera de considerar también estos efectos, es propuesta por Braziewicz *et al.* [BRAJ92], que consiste en utilizar la corrección de Pajek *et al.*, Ec. (3.6), y ajustar en forma autoconsistente los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$ , a los datos experimentales obtenidos a partir de la Ec. (3.8).

### 3.2.2 Medición de las secciones de producción de rayos X L.

Se midieron las secciones eficaces de producción de rayos X L para los elementos Te, Cs, Ba, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Ho, Er, Tm, Yb y Lu, inducidos por protones en el intervalo de energías de 400 a 700 keV, en pasos de aproximadamente 50 keV. Algunos de estos elementos no fueron bombardeados a todas las energías. Los blancos fueron películas delgadas ( $\approx 50 \mu g/cm^2$ ) de fluoruros de los elementos señalados, excepto para el Te (metálico) y el Cs (CsBr), depositadas sobre mylar. Estas películas también se obtuvieron de MicroMatter.

Las secciones eficaces de producción de rayos X L fueron determinadas a partir de la ecuación (3.9), utilizando para los diversos parámetros las mismas condiciones que se detallan en la sección 3.1.3. Para la  $\sigma_R$  se utilizó la fórmula de Rutherford junto con la

corrección para iones de baja energía de L'Ecuyere [LECJ79]. Resultados muy parecidos también se obtienen utilizando la corrección de baja energía dada también por Huttel [HUTE85]. Estas correcciones en  $\sigma_R$  son menores del 4% para protones de 400 keV, sobre elementos con  $Z \leq 71$ . Las áreas  $N_X$  y  $N_R$  se determinaron utilizando los programas de cómputo AXIL\* y RUMP, respectivamente.

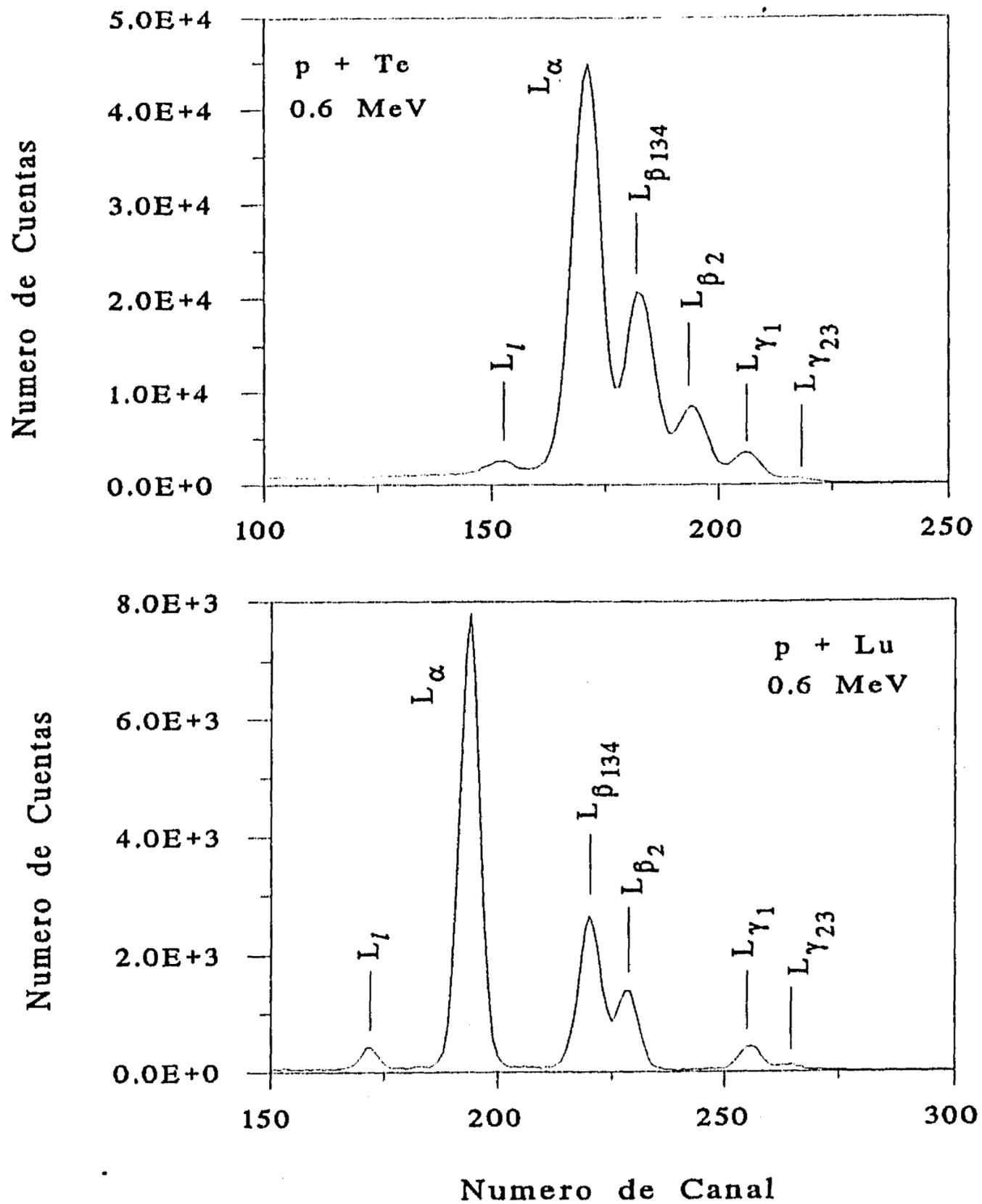
Corrientes entre 2 y 6 nA fueron utilizadas para evitar apilamiento en los detectores y daño en las películas. De esta manera se tuvieron razones de conteo menores de 80 y 140 cuentas/seg para los detectores de barrera superficial y Si(Li). Solo en los espectros de rayos X de Te a 435 keV y 621 keV, y Ce a 659 keV, fue necesario efectuar correcciones menores del 1.2%, por tiempo muerto. También, al bombardear las películas, éstas se iban moviendo a intervalos de tiempo regulares, para cambiar el punto de incidencia del haz y no deteriorar la película. Las películas de los fluoruros de Eu, Sm, Ce, Pr e Yb, presentaron contaminación por Ta. La concentración de Ta se determinó por medio de RBS, a partir de la estequiometría del fluoruro y el número de proyectiles retrodispersados por el flúor. Esto se efectuó bombardeando las películas con partículas  $\alpha$  de 2.2 MeV, obtenidas por medio del acelerador de 5.5 MV del IFUNAM. Una vez conocida la concentración de Ta en estas películas fue posible determinar el valor correcto de las  $N_R$ , en los espectros RBS. Las líneas de rayos X L que fueron resueltas por el detector de Si(Li) y para las cuales se midió su sección de producción fueron:  $L_I$  (10%),  $L_\alpha$  (8%),  $L_{\beta 1,3,4}$  (9%),  $L_{\beta 2,15}$  (9%),  $L_{\gamma 1,5}$  (10%) y  $L_{\gamma 2,3}$  (11%). La incertidumbre promedio de las medidas se indica entre paréntesis. Los valores medidos de estas secciones de producción se muestran listados en forma tabular en el Apéndice I. En la Figura 3.3 se muestran dos espectros típicos de rayos X, para Te y Lu. Comparaciones de las secciones de producción de rayos X con la teoría ECPSSR se muestran en el siguiente capítulo.

En el procedimiento anterior, se hizo la suposición de que la emisión de los rayos X L es isotrópica. Pero ocurre que cuando un blanco se bombardea con un haz colimado de

---

\* En este programa los picos que se resolvieron en el espectro de rayos X fueron considerados independientes y se indicaron simplemente por medio de las energías de sus respectivas líneas de emisión, sin hacer uso de la bibliotecas con información referente a las intensidades relativas entre las diversas líneas de cada uno de los elemento en estudio.

Figura 3.3 Dos espectros típicos de rayos X, correspondientes a Te (arriba) y a Lu (abajo), al ser bombardeados con protones de 600 keV y utilizando dos diferentes ampliificaciones.



iones, se provoca un alineamiento en las vacancias producidas en subcapas con momento angular total  $j > 1/2$ , [BERE78, SARL86]. Así pues, este alineamiento sólo afectará a la capa  $L_3$  y en consecuencia a las líneas,  $L_l$ ,  $L_\alpha$  y  $L_{\beta_{2,15}}$ . Braziewicz *et al.* [BRAJ92], efectúan una recopilación de estos efectos reportados por otros autores, en términos de las velocidades relativas  $v/v_3$ , donde  $v$  es la velocidad del proyectil y  $v_3$  es la velocidad promedio de los electrones en la capa  $L_3$ . Determinan que este efecto es sólo sensible para las secciones de  $L_l$ , cuando estas velocidades relativas son  $v/v_3 < 0.25$ , y el efecto es totalmente despreciable para el cálculo de las secciones de ionización de las capas L.

### 3.3 SECCIONES DE IONIZACION DE CAPAS L

#### 3.3.1 Métodos para determinar secciones de ionización de capas L.

Las secciones de ionización de capas L,  $\sigma_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ), están relacionadas con sus secciones de producción de rayos X,  $\sigma_j^X$  ( $j = \alpha, \beta$ , etc), por medio de las ecuaciones [TAWH74]:

$$\sigma_l^X = \{\sigma_1(f_{13} + f_{12}f_{23}) + \sigma_2 f_{23} + \sigma_3\} \omega_3 \frac{\Gamma_{3l}}{\Gamma_3}. \quad (3.10)$$

$$\sigma_{\alpha,2}^X = \{\sigma_1(f_{13} + f_{12}f_{23}) + \sigma_2 f_{23} + \sigma_3\} \omega_3 \frac{\Gamma_{3\alpha}}{\Gamma_3}. \quad (3.11)$$

$$\sigma_\beta^X = \sigma_1 \omega_1 \frac{\Gamma_{1\beta 3,4}}{\Gamma_1} + \{\sigma_1 f_{12} + \sigma_2\} \omega_2 \frac{\Gamma_{2\beta 1}}{\Gamma_2} + \{\sigma_1(f_{13} + f_{12}f_{23}) + \sigma_2 f_{23} + \sigma_3\} \omega_3 \frac{\Gamma_{3\beta 2,15}}{\Gamma_3}. \quad (3.12)$$

$$\sigma_\gamma^X = \sigma_1 \omega_1 \frac{\Gamma_{1\gamma 2,3}}{\Gamma_1} + \{\sigma_1 f_{12} + \sigma_2\} \omega_2 \frac{\Gamma_{2\gamma 1,5}}{\Gamma_2}. \quad (3.13)$$

$$\sigma_{\gamma 1,5}^X = \{\sigma_1 f_{12} + \sigma_2\} \omega_2 \frac{\Gamma_{2\gamma 1,5}}{\Gamma_2}. \quad (3.14)$$

$$\sigma_{\gamma 2,3}^X = \sigma_1 \omega_1 \frac{\Gamma_{1\gamma 2,3}}{\Gamma_1}. \quad (3.15)$$

$$\sigma_{TOT}^X = \{\omega_1 + f_{12}\omega_2 + (f_{13} + f_{12}f_{23})\omega_3\} \sigma_1 + (\omega_2 + f_{23}\omega_3) \sigma_2 + \omega_3 \sigma_3. \quad (3.16)$$

donde las  $\omega_i$  son las fluorescencias,  $f_{ij}$  son los coeficientes de Coster-Kronig, para las transiciones no radiativas entre las subcapas L  $i$  y  $j$ , y  $\Gamma_{ij}/\Gamma_i$  son las razones de emisión radiativa para la línea  $j$  debido a una transición electrónica a la subcapa  $i$ . De esta manera la seccion de ionización  $\sigma_j$  puede determinarse, en principio, resolviendo cualquier sistema de tres de las ecuaciones anteriores.

El sistema de ecuaciones más utilizado es el formado por las Ecs. (3.11), (3.14) y (3.15), debido a que es más fácil de resolver y el que contiene menos parámetros  $\omega_i$ ,  $f_{ij}$  y  $\Gamma_{ij}/\Gamma_i$ . Este método fue propuesto por Datz *et al.* [DATS74]. Cohen [COHD84], comenta que debido a las bajas razones de conteo en la línea  $L_{\gamma 2,3}$  se introducen errores grandes en el valor de la  $\sigma_1$  y sugiere utilizar otras líneas que tengan razones de conteo mayores. Entonces él propone utilizar el promedio de los resultados que se obtengan al resolver los sistemas de ecuaciones formados por las Ecs. (3.11), (3.12) y (3.13), y por las Ecs. (3.11), (3.14) y (3.16). Además propone un ajuste de las razones de emisión de  $L_l$ ,  $L_\eta$  y  $L_{\gamma 1}$ , a partir de los espectros obtenidos y su comparación con los valores obtenidos a partir del resultado promedio. Perillo *et al.* [PERE86], critican este método, pues si bien se consideran líneas de emisión intensas para el cálculo de la ionización, por otro lado se involucran muchos parámetros atómicos, que lo hacen muy sensitivo al conjunto de estos valores que se utilicen. También, el método de Cohen, requiere de un conocimiento muy bueno de las intensidades medidas para  $L_l$  y  $L_\eta$ , que en este caso para los elementos atómicos estudiados en este trabajo la  $L_\eta$  es difícil de determinar, pues se superpone con la  $L_\alpha$ .

Otro método, algo diferente del anterior, para calcular estas secciones de ionización ha sido propuesto por Rayburn y Metha [RAYL83, RAYL85]. Este consiste en determinar primero la sección de producción de rayos X para toda la capa L,  $\sigma_L^X$ , y para cada una de las subcapas  $\sigma_{L_i}^X$  ( $i = 1, 2, 3$ ). El valor de  $\sigma_L^X$  se determina directamente sumando todas las secciones de producción de rayos X para todas las líneas de emisión. El de  $\sigma_{L_3}^X$  también se determina directamente sumando las secciones de producción de  $\sigma_l^X$ ,  $\sigma_{\alpha 1,2}^X$  y  $\sigma_{\beta 2,15}^X$ . Luego los valores de  $\sigma_{L_2}^X$  y  $\sigma_{L_1}^X$  se encuentran dados por:

$$\sigma_{L_2}^X = (\sigma_L^X - \sigma_{L_3}^X) \frac{\sigma_{\gamma 1}^X (1 + \Gamma_{2\beta 1} / \Gamma_{2\gamma 1})}{\sigma_{\beta 1,3,4}^X + \sigma_{\gamma 1}^X + \sigma_{\gamma 2,3}^X}. \quad (3.17)$$

y

$$\sigma_{L_1}^X = \sigma_L^X - \sigma_{L_3}^X - \sigma_{L_2}^X. \quad (3.18)$$

Finalmente las secciones de ionización,  $\sigma_j$ , quedan dadas por:

$$\sigma_1 = \sigma_{L_1}^X / \omega_1. \quad (3.19)$$

$$\sigma_2 = (\sigma_{L_2}^X / \omega_2) - f_{12}(\sigma_{L_1}^X / \omega_1). \quad (3.20)$$

$$\sigma_3 = (\sigma_{L_3}^X/\omega_3) - f_{23}(\sigma_{L_2}^X/\omega_2) - f_{13}(\sigma_{L_1}^X/\omega_1). \quad (3.21)$$

Este método presenta el inconveniente de que se requieren más cálculos con las secciones de producción de rayos X, que con el método de Datz, pero en cambio, utiliza pocos parámetros atómicos. En el capítulo cuatro mostramos la comparación de estos dos métodos para las secciones medidas en este trabajo.

### 3.3.2. Determinación de las secciones de ionización de capas L.

#### 3.3.2.1 Parámetros atómicos de las capas L.

Como pudo verse en la sección anterior, la determinación de las secciones de ionización de las capas L, dependen en gran medida de los valores que se utilicen para los parámetros atómicos  $\omega_i$ ,  $f_{ij}$  y  $\Gamma_{ij}/\Gamma_i$ . Estos son en cierta forma responsables de discrepancias sistemáticas en las secciones de ionización. Además otros autores [COHD84, BRAE88], han encontrado diferencias notables en los valores obtenidos para las secciones de ionización al utilizar diferentes conjuntos de valores para estos parámetros. En esta sección se desea indicar los parámetros atómicos existentes para la determinación de estas secciones.

Los valores de  $\omega_i$  comúnmente son tomados a partir de los valores tabulados por Krause [KRAM79]. Estas fluorescencias son calculadas en forma semiempírica para una sola vacancia en átomos libres, sin considerar correcciones por efectos de estado sólido, enlace químico o ionización múltiple. Es de esperarse que estos efectos sean pequeños, excepto para elementos ligeros [PAUH84]. Las incertidumbres reportadas para estas fluorescencias en los elementos estudiados experimentalmente en este trabajo son de hasta el 15%, 10% y 5%, para  $\omega_1$ ,  $\omega_2$  y  $\omega_3$ , respectivamente. En elementos con  $Z < 50$ , incertidumbres de hasta un 30% son reportadas para la  $\omega_1$ . También existen cálculos teóricos de las fluorescencias calculados a partir del método de Dirac-Hartree-Slater [CHEM80].

Los valores de los  $f_{ij}$ , también son comúnmente tomados a partir de las tablas de Krause [KRAM79]. Estos coeficientes para las transiciones Coster-Kronig se determinaron también en forma semiempírica efectuando las mismas suposiciones que se hicieron para las fluorescencias. Las incertidumbres reportadas para estos factores de Coster-Kronig,  $f_{12}$ ,  $f_{13}$  y  $f_{23}$ , son respectivamente de hasta el 15%, 10% y 20%, para los elementos estudiados

en este trabajo. Es importante hacer notar que en este caso para la  $f_{23}$ , estos valores pueden diferir en moléculas o estado sólido en comparación con el valor para el átomo libre reportado. Así pues el coeficiente  $f_{23}$  se convierte en un factor muy importante para el error que se presenta en las secciones de ionización.

Se han efectuado medidas de estos coeficientes de Coster-Kronig utilizando radiación de sincrotrón [JITW85, WERUS8, JITW89] y se han encontrado desviaciones grandes con respecto a los valores tabulados por Krause, especialmente para los de  $f_{12}$ . Estas medidas solamente se han realizado en los elementos Y, Hf, Ta, W, Ir, Pt, Au y Pb. Al comparar las razones de las secciones de ionización de las capas L del oro [SARL88] se encuentra que los resultados cambian significativamente usando los valores de Krause y los medidos en los casos anteriores. Por estas razones, se encuentra la necesidad de continuar efectuando más medidas de estos coeficientes en otros elementos, para así poder corregir las tabulaciones semiempíricas que actualmente se utilizan.

Otros valores para los coeficientes de Coster-Kronig para algunos elementos son reportados por Chen *et al.* [CHEM81]. Estos valores se calculan teóricamente, utilizando funciones de onda relativistas, Dirac-Hartree-Slater. Braziewicz *et al.* [BRAJ92], encuentran que usando los coeficientes Coster-Kronig reportados por Chen *et al.* para determinar los valores de la sección total de ionización de la capa L medidos experimentalmente, se presenta un mejor acuerdo ( $\approx 12\%$ ) con el modelo teórico ECPSSR, que usando los de Krause, especialmente para las tierras raras. El problema al utilizar estos valores de Chen *et al.*, es que sólo son reportados para algunos elementos y además son difíciles de interpolar para los otros elementos no listados, sin cometer grandes errores.

Las probabilidades radiativas de emisión  $\Gamma_{ij}/\Gamma_i$ , se obtienen principalmente de los valores teóricos reportados por Scofield [SCOJ74, SCOJ74b, SCOJ74c]. Estos fueron calculados para casi todos los elementos utilizando funciones relativistas Dirac-Hartree-Slater. También, en algunas ocasiones para estos parámetros se utilizan los valores semiempíricos reportados por Salem *et al.* [SALS74, BERD78]. Estos se basan en medidas obtenidas utilizando fotones y electrones para excitar los átomos, en lugar de iones, pues estos alteran en forma considerable las razones de emisión. Las incertidumbres para estas probabilidades usando las dos tabulaciones van del 2 al 8% pero debido a que la cantidad de medidas de

estos parámetros es pequeña, se prefiere utilizar los valores teóricos.

### 3.3.2.2. Cálculos de las secciones de ionización de capas L.

Las secciones de ionización de capas L en este trabajo se obtuvieron a partir de las secciones de producción de rayos X L medidas, utilizando el método de Datz *et al.* y el de Rayburn y Metha. También, se utilizaron otros sistemas de las Ecs. (3.10) a (3.16), entre los cuales estuvo el propuesto por Cohen [COHD84]. Pero en todos estos últimos casos se obtuvieron resultados irreales o inconsistentes, por lo cual los resultados obtenidos no serán considerados en el trabajo.

Los valores para  $\omega_i$  y  $f_{ij}$ , se obtuvieron a partir de las tablas de Krause [KRAM79]. Para las probabilidades de emisión radiativa se utilizaron las tablas de Scofield y de Salem. Rayburn y Metha [RAYL85], proponen la medición directa de  $\Gamma_{2\beta_1}/\Gamma_{2\gamma_1}$ , a partir de las secciones de rayos X medidas para cada elemento. Pero debido al pequeño intervalo de energías empleado para los protones (400 a 700 keV), estas razones eran difíciles de determinar con un error menor al 15%, por lo cual no fueron consideradas en este trabajo.

En el apéndice II se muestran los valores obtenidos utilizando estos dos métodos con las dos tabulaciones para la emisión radiativa. Las incertidumbres experimentales promedio en el cálculo de las secciones de ionización\* son respectivamente para  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  y  $\sigma_3$  de 9%, 10% y 11%, usando el método de Datz *et al.* y de 9%, 14% y 17%, usando el de Rayburn y Metha. Como se aprecia, el segundo método presenta mayor incertidumbre en el cálculo de las secciones de ionización. Pero si se toma el hecho de que el método de Datz *et al.* tiene que hacer uso directo de la sección de rayos X  $\sigma_{\gamma_{2,3}}^X$  en el cálculo de la ionización, Ec. (3.15), que es la que tiene la mayor incertidumbre relativa, entonces el error total que se obtenga al final puede ser igual al del segundo método. Al utilizar el método de Rayburn y Metha, junto con los valores de  $\Gamma_{2\beta_1}/\Gamma_{2\gamma_1}$  obtenidos a partir de las emisiones de Salem *et al.*, se obtuvieron algunos valores negativos para la sección de ionización  $\sigma_1$ , en los elementos atómicos Ba, La y Ce.

En el siguiente capítulo se muestran la comparación de estos resultados obtenidos con el modelo teórico ECPSSR.

---

\* *i.e.* que sólo consideran la incertidumbre debida a los parámetros atómicos empleados y no a la incertidumbre en las secciones de producción de rayos X

## CAPITULO IV

### COMPARACIONES Y AJUSTES SEMIEMPIRICOS

#### 4.1 COMPARACIONES DE LAS SECCIONES DE PRODUCCION DE RAYOS X L

Los resultados obtenidos en este trabajo para las secciones de producción de rayos X  $L_{\alpha}$  se muestran en las figuras 4.1 a 4.8, en función de la energía de incidencia de los protones, para cada uno de los elementos estudiados. En estas figuras los resultados se comparan con los obtenidos por otros autores, así como con la teoría ECPSSR. Las medidas de cada autor se indican por medio de claves y la referencia correspondiente a cada clave se encuentra enlistada en la Tabla 4.3, correspondiente a la sección 4.3.

Se compara con el modelo teórico ECPSSR porque como ya se indicó en el capítulo 2, es consistente teóricamente y además presenta de las mejores predicciones con los resultados experimentales. Las secciones de ionización utilizando la ECPSSR fueron obtenidas a partir del algoritmo desarrollado por Smit [SMIT89].

De estas figuras pueden hacerse varias observaciones. Para el intervalo de energías utilizado se encuentra que no existían medidas previas para el Cs y muy pocas para el Lu. Todas las medidas efectuadas por Rayburn (RAYL81, RAYL83 y RAYL89), resultan ser siempre mucho mayores que el resto de las medidas indicadas. Quitando estas medidas de Rayburn se observa que para el Nd y Dy todas las medidas resultan ser muy semejantes entre si. Los valores reportados por Vigilante *et al.* (VIGM88, VIGM90 y VIGM91) resultan ser en general los más próximos a las predicciones de la ECPSSR. Las medidas efectuadas en este trabajo para Nd, Ho y Tm son de las que más proximan a la teoría.

También comparamos las secciones de producción de rayos X L de todas las líneas de emisión medidas en este trabajo con las predicciones del modelo teórico ECPSSR. Con la finalidad de observar mejor las diferencias que se presentan, la comparación se efectúa tomando en cuenta los cocientes de las secciones medidas experimentalmente entre las

Figura 4.1 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de producción de rayos X  $L_{\alpha}$  inducidos con protones en telurio y cesio a diferentes energías de incidencia. Los resultados se comparan con las medidas de otros autores y con las predicciones de la ECPSSR por medio de una línea continua. En la Tabla 4.3 se dan las referencias correspondientes a cada clave.

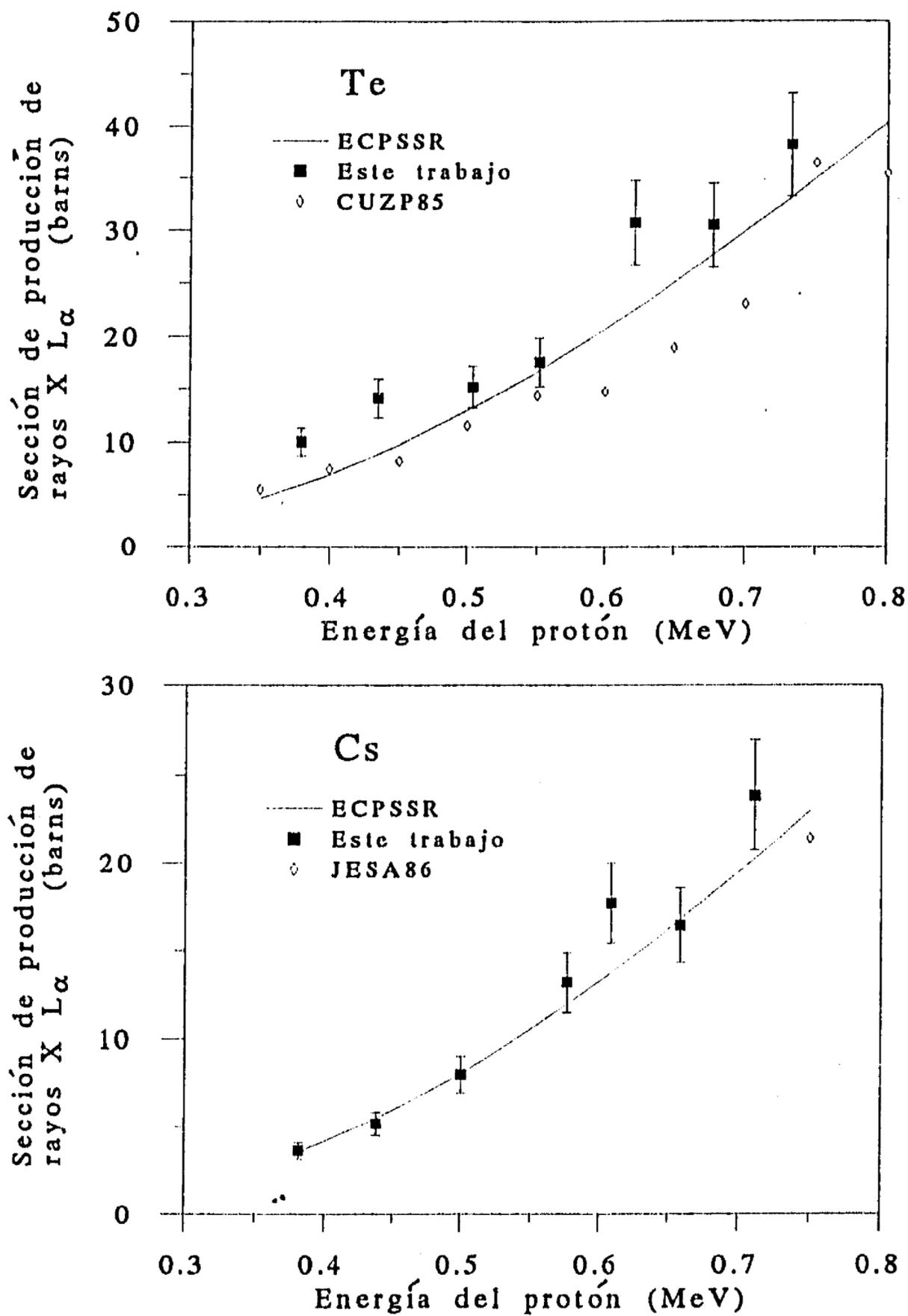


Figura 4.2 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de producción de rayos X  $L_{\alpha}$  inducidos con protones en bario y lantano a diferentes energías de incidencia. Los resultados se comparan con las medidas de otros autores y con las predicciones de la ECPSSR por medio de una línea continua. En la Tabla 4.3 se dan las referencias correspondientes a cada clave.

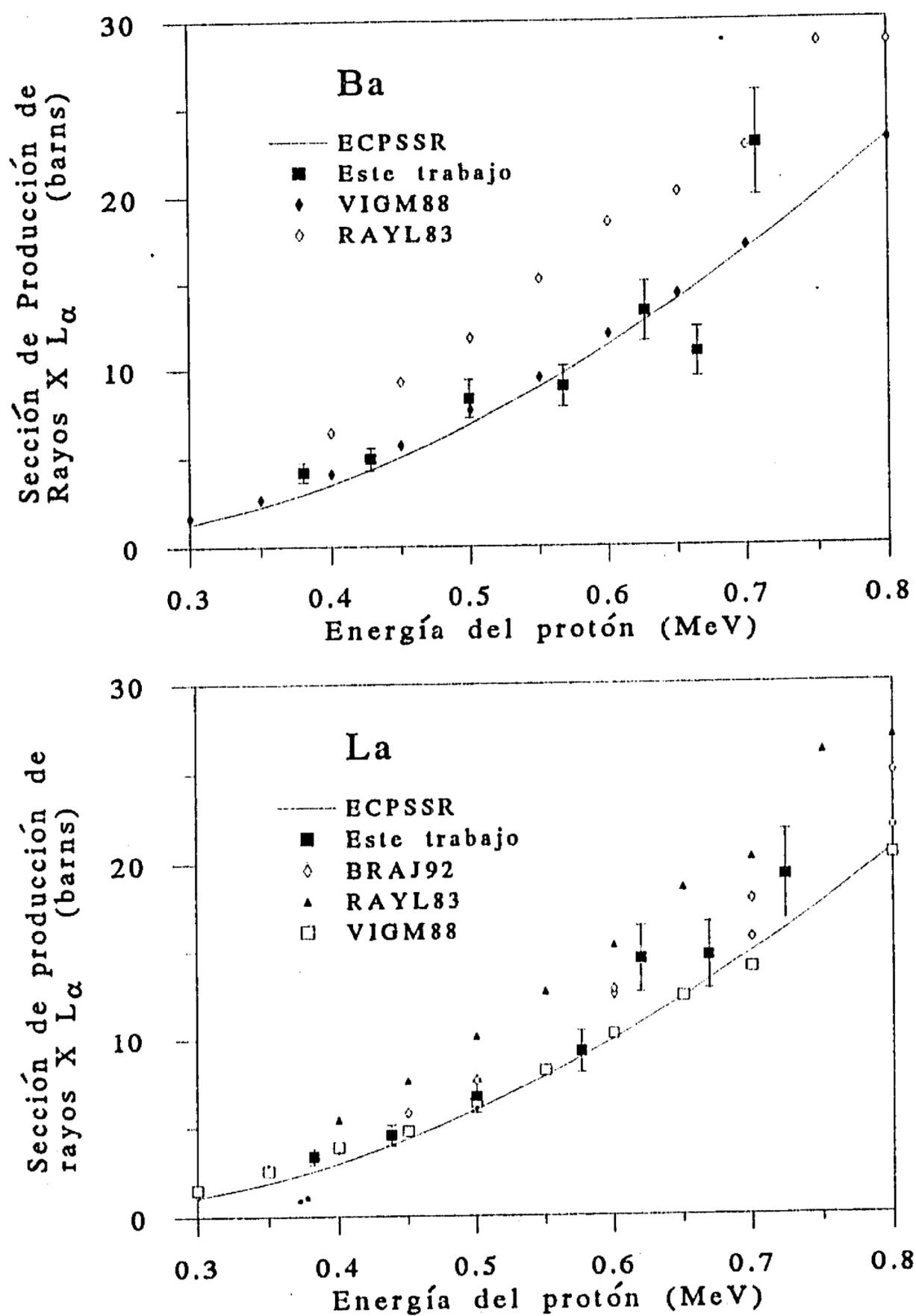


Figura 4.3 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de producción de rayos X  $L_{\alpha}$  inducidos con protones en cerio y praseodimio a diferentes energías de incidencia. Los resultados se comparan con las medidas de otros autores y con las predicciones de la ECPSSR por medio de una línea continua. En la Tabla 4.3 se dan las referencias correspondientes a cada clave.

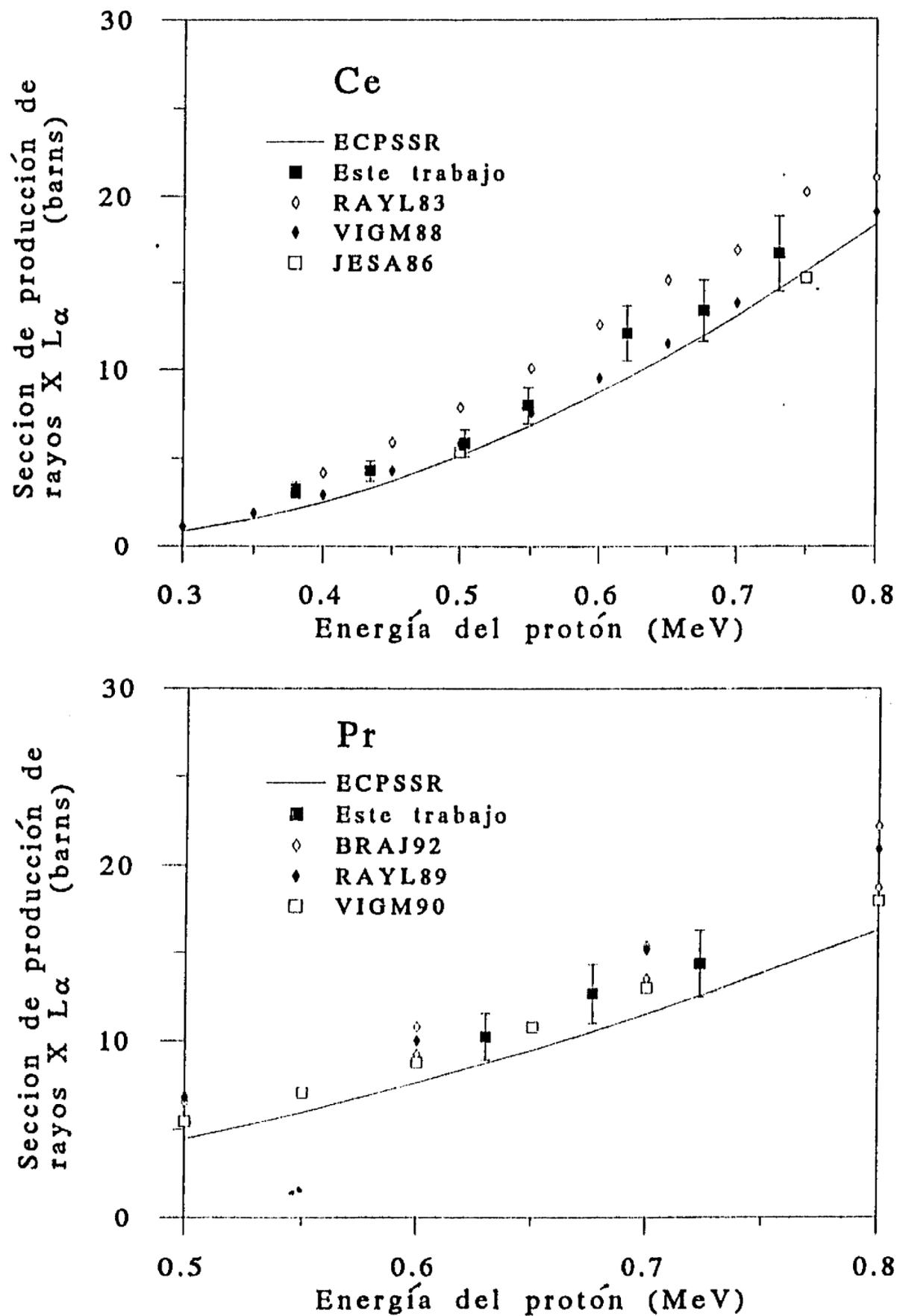


Figura 4.4 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de producción de rayos X  $L\alpha$  inducidos con protones en neodimio y samario a diferentes energías de incidencia. Los resultados se comparan con las medidas de otros autores y con las predicciones de la ECPSSR por medio de una línea continua. En la Tabla 4.3 se dan las referencias correspondientes a cada clave.

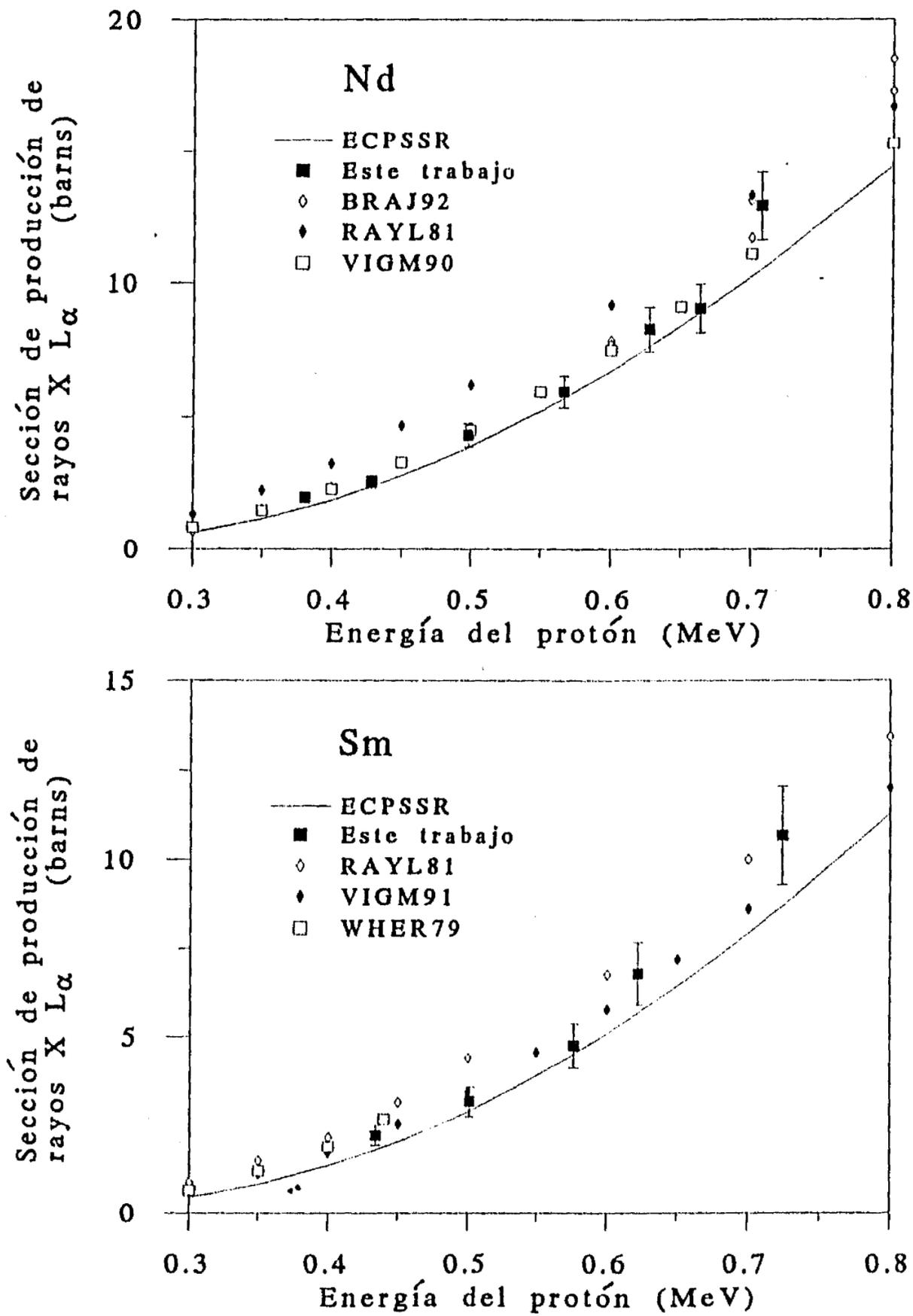


Figura 4.5 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de producción de rayos X  $L_{\alpha}$  inducidos con protones en gadolinio y dysprosio a diferentes energías de incidencia. Los resultados se comparan con las medidas de otros autores y con las predicciones de la ECPSSR por medio de una línea continua. En la Tabla 4.3 se dan las referencias correspondientes a cada clave.

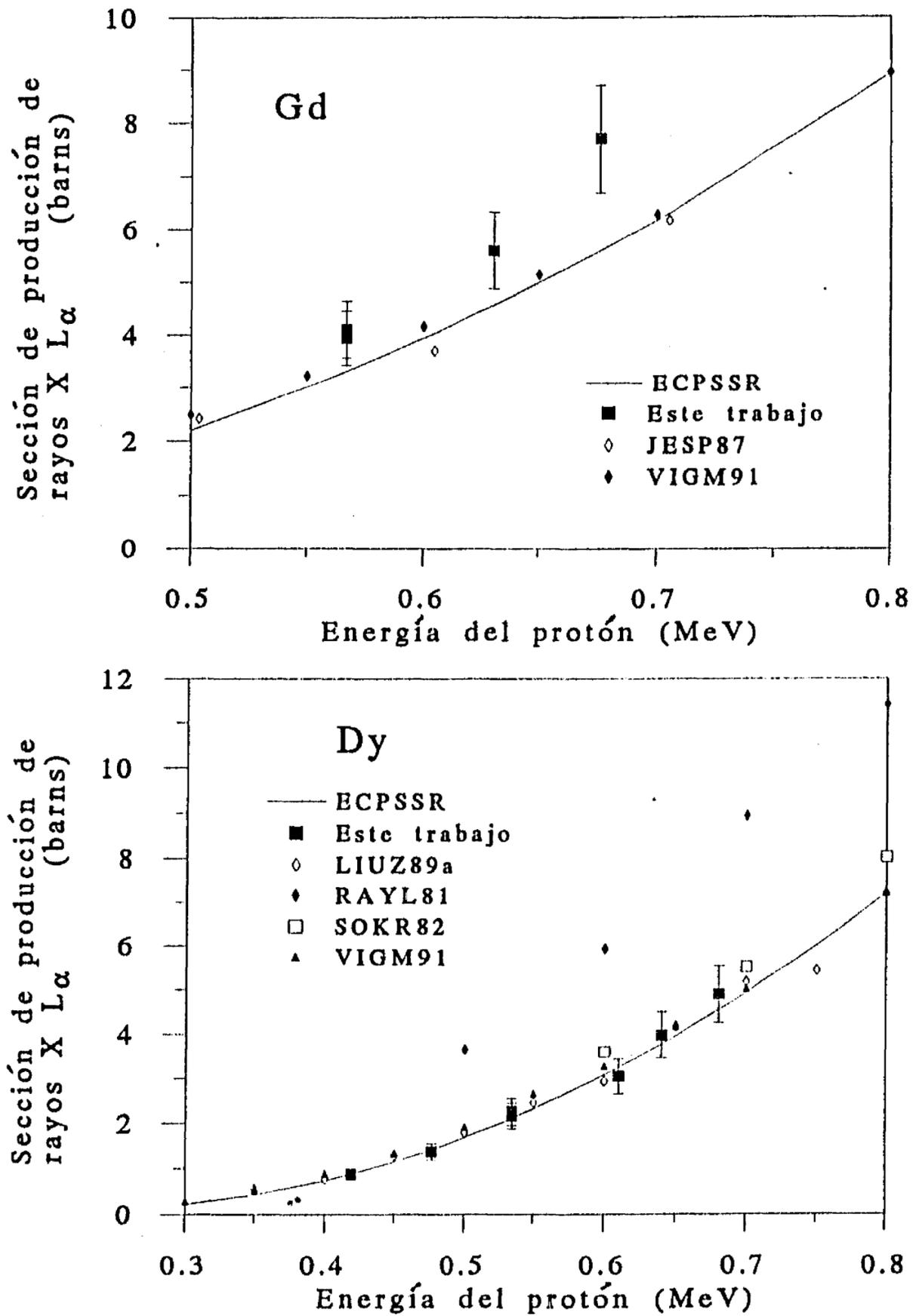


Figura 4.6 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de producción de rayos X  $L_{\alpha}$  inducidos con protones en holmio y erbio a diferentes energías de incidencia. Los resultados se comparan con las medidas de otros autores y con las predicciones de la ECPSSR por medio de una línea continua. En la Tabla 4.3 se dan las referencias correspondientes a cada clave.

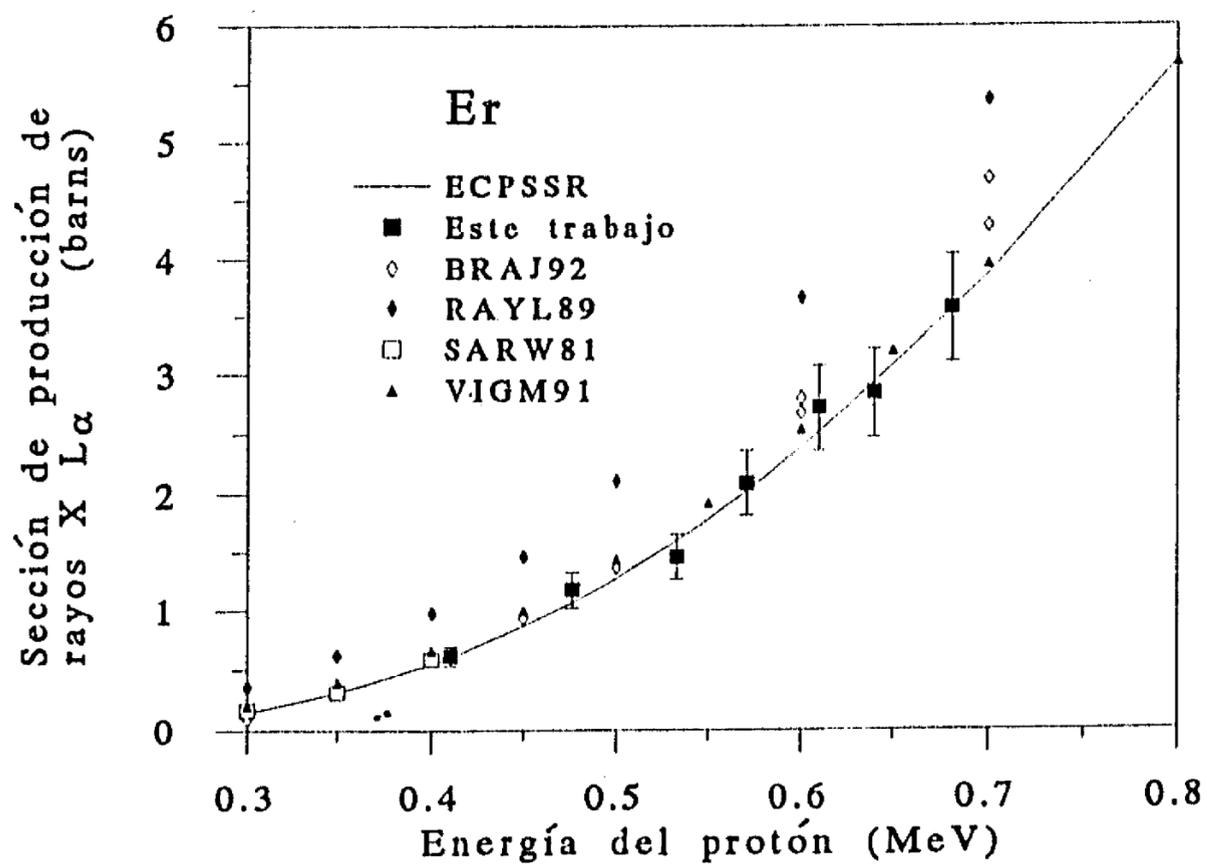
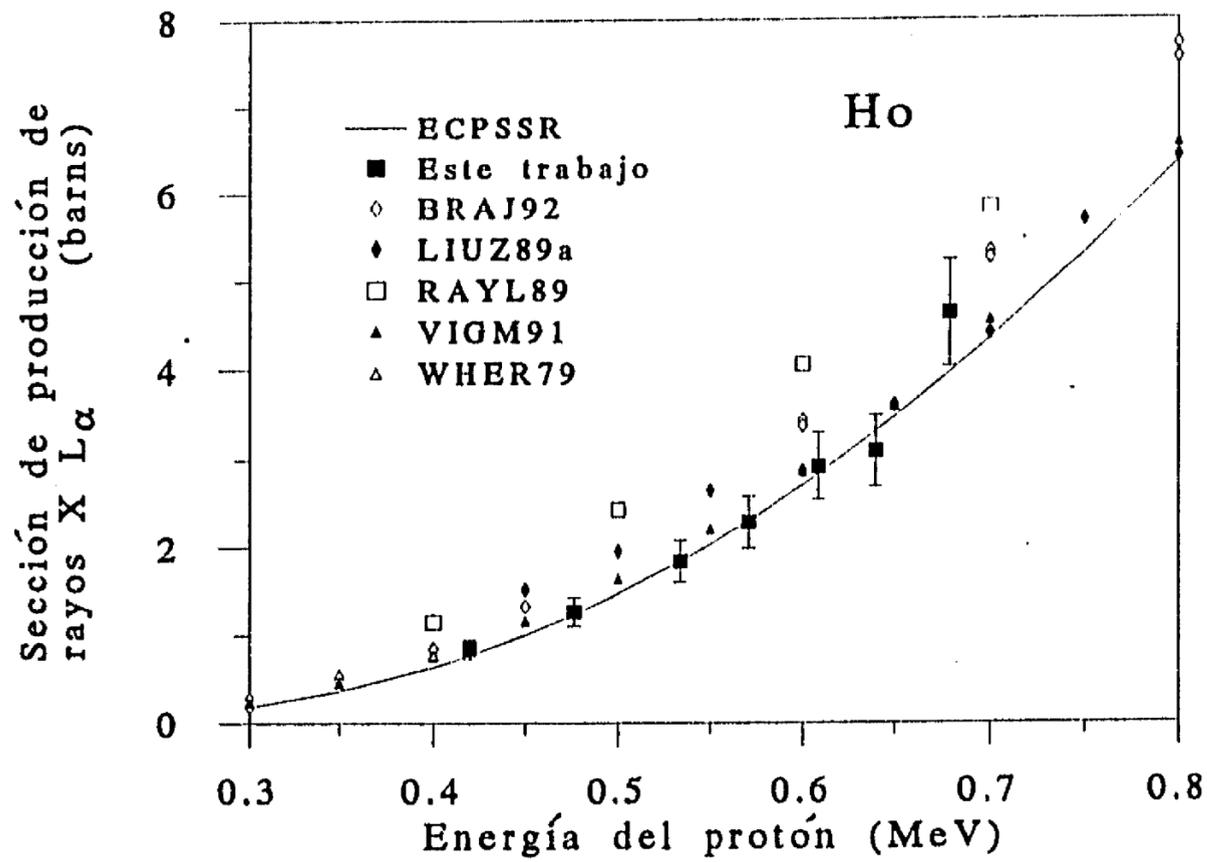
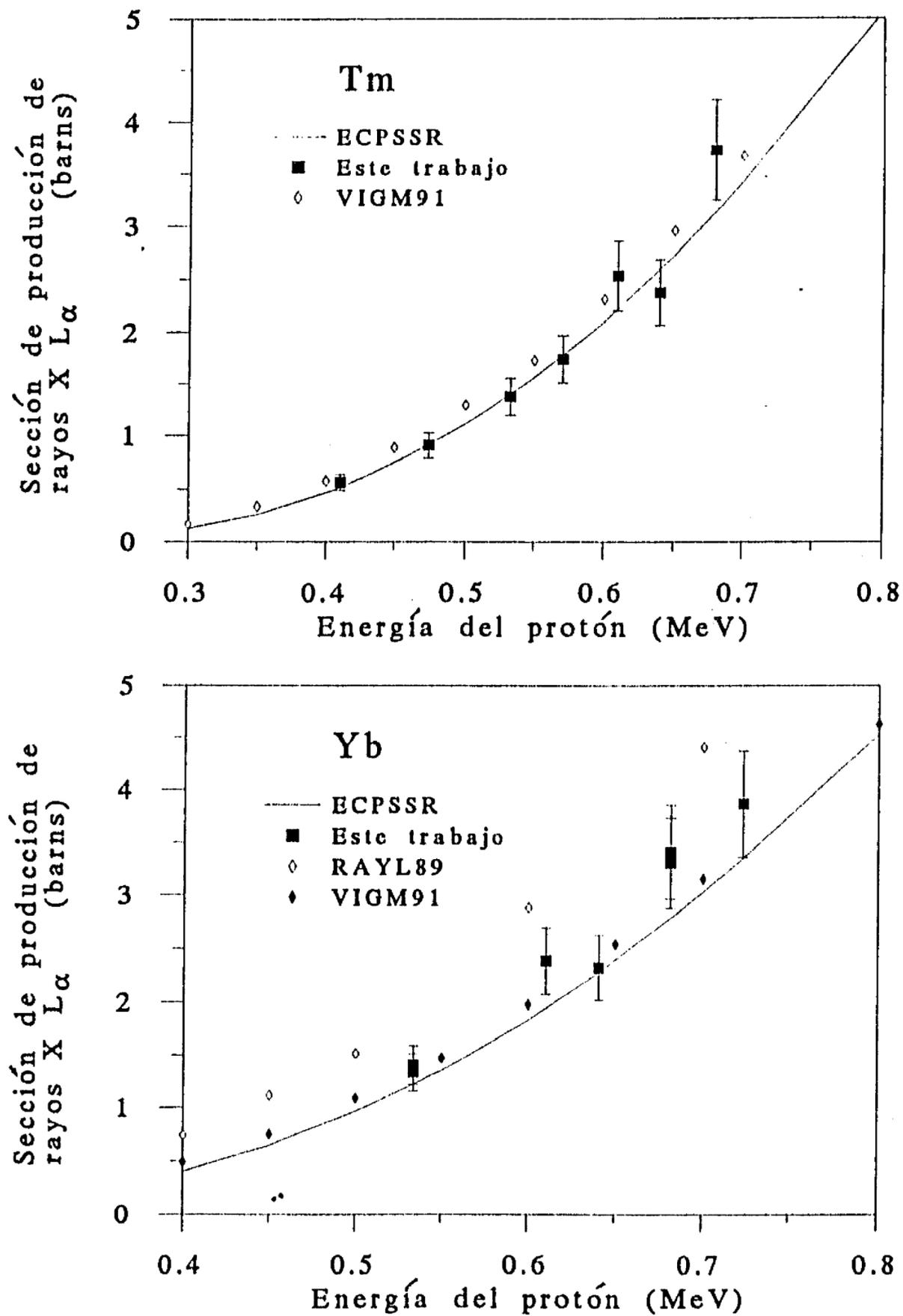


Figura 4.7 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de producción de rayos X  $L_{\alpha}$  inducidos con protones en tulio e yterbio a diferentes energías de incidencia. Los resultados se comparan con las medidas de otros autores y con las predicciones de la ECPSSR por medio de una línea continua. En la Tabla 4.3 se dan las referencias correspondientes a cada clave.



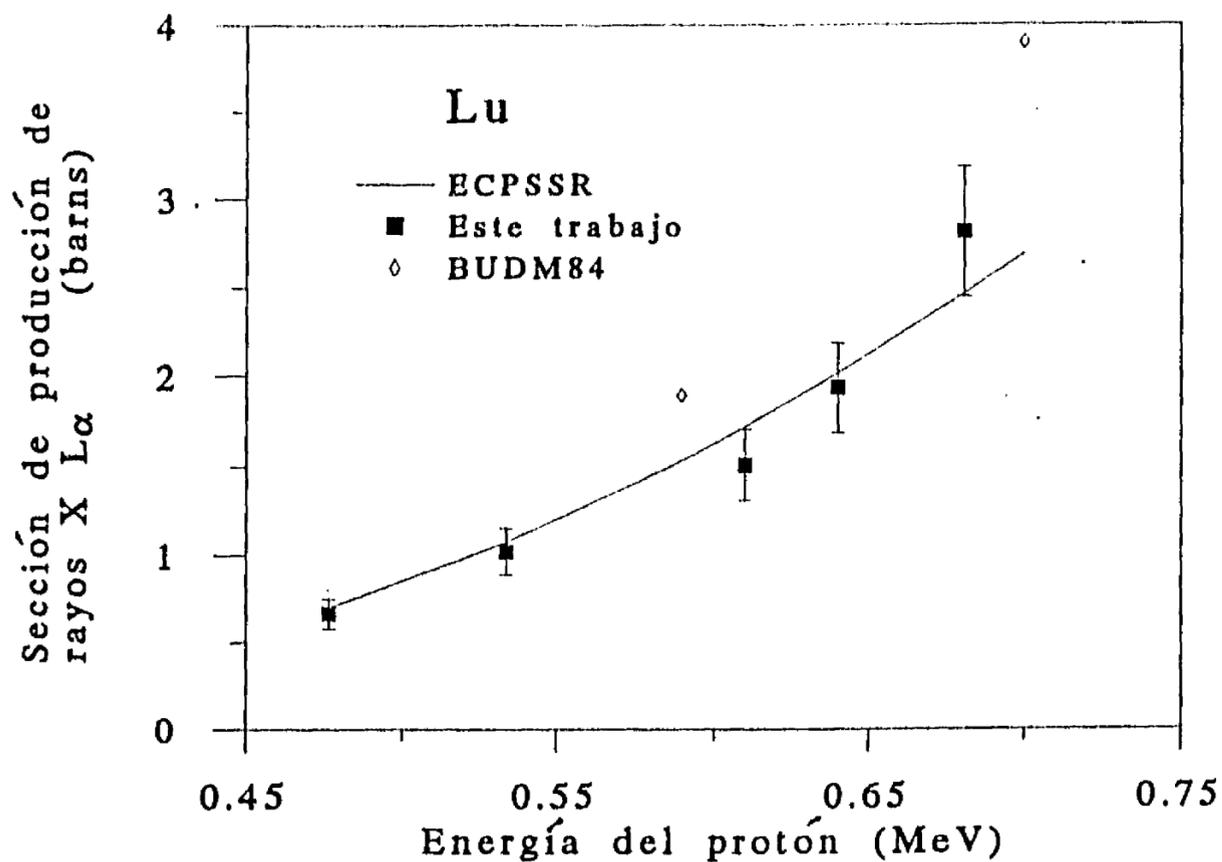


Figura 4.8 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de producción de rayos X L $\alpha$  inducidos con protones en lutecio a diferentes energías de incidencia. Los resultados se comparan con las medidas de otros autores y con las predicciones de la ECPSSR por medio de una línea continua. En la Tabla 4.3 se dan las referencias correspondientes a cada clave.

teóricas, como:

$$S_j = \frac{\sigma_j^{\text{exp}}}{\sigma_j^{\text{ECPSSR}}} \quad (4.1)$$

donde las  $\sigma_j^{\text{ECPSSR}}$  son las secciones de producción de rayos X correspondientes a la línea de emisión  $j$ , obtenidas a partir de las ecuaciones (3.10) a (3.15) utilizando las secciones de ionización predichas por la teoría ECPSSR, con los coeficientes de las transiciones Coster-Kronig y de las fluorescencias a partir de las tablas de Krause [KRAM79] y las emisiones radiativas de Scofield [SCOJ74].

Estos cocientes  $S_j$  se toman en función de las velocidades relativistas reducidas  $\xi_{L_j}^R$ , Ec. (2.80). Entonces para cada línea de emisión de rayos X se define una velocidad reducida promedio en términos de la de todos los electrones de las diferentes subcapas L que pueden ser expulsados y que contribuyen a la producción de cada una de las líneas de emisión. Así, para las líneas  $L_\alpha$ ,  $L_l$  y  $L_{\beta 2,15}$ , se define la velocidad reducida promedio,  $\xi_L^R$ , como:

$$\xi_L^R = \frac{\xi_{L_1}^R + \xi_{L_2}^R + 2\xi_{L_3}^R}{4} \quad (4.2)$$

donde estas líneas involucran a los electrones de las tres subcapas atómicas L. En forma análoga, para  $L_{\beta 1,3,4}$  y  $L_{\gamma 1}$  se define  $\xi_{L_{12}}^R$  como:

$$\xi_{L_{12}}^R = \frac{\xi_{L_1}^R + \xi_{L_2}^R}{2} \quad (4.3)$$

Finalmente, para la  $L_{\beta 2,15}$  sólo se emplea la  $\xi_{L_1}^R$ .

En la Figura 4.9a, se muestran los cocientes de las secciones  $\sigma_{L_\alpha}^{\text{exp}}$  medidas, entre las predicciones de la ECPSSR, en función de  $\xi_L^R$ . De aquí se observa que la teoría ECPSSR subestima la sección de rayos X,  $\sigma_{L_\alpha}^X$ . La desviación promedio de las secciones medidas con la ECPSSR fue de 12%.

En la Figura 4.10, se muestran los cocientes de las secciones  $\sigma_{L_l}^{\text{exp}}$  y  $\sigma_{L_{\beta 2,15}}^{\text{exp}}$  medidas, entre las predicciones de la ECPSSR, en función de  $\xi_L^R$ . Para estas líneas las predicciones teóricas fueron menores que las experimentales. La discrepancia promedio con la teoría fue de 14%, para los dos conjuntos de medidas.

En la Figura 4.11, se muestran los cocientes de las secciones  $\sigma_{L_{\beta 1,3,4}}^{\text{exp}}$  y  $\sigma_{L_{\gamma 1}}^{\text{exp}}$ , entre los valores teóricos de la ECPSSR, en función de  $\xi_{L_{12}}^R$ . Los valores experimentales también resultaron ser mayores que los predichos. La desviación promedio con la teoría fue de 19% para la  $\sigma_{L_{\beta 1,3,4}}^{\text{exp}}$  y de 22% para la  $\sigma_{L_{\gamma 1}}^{\text{exp}}$ .

En la Figura 4.12, se muestran estos cocientes para las secciones  $\sigma_{L_{\gamma 2,3}}^X$  entre las predicciones ECPSSR. En este caso, los resultados experimentales fueron en promedio menores que las predicciones teóricas para  $\xi_{L_1}^R > 0.5$ . En la región  $\xi_{L_1}^R \leq 0.5$ , estos cocientes están dispersos en torno a la unidad y se observan desviaciones máximas de hasta poco menos de un 40%.

Figura 4.9 (a) Cocientes de las secciones eficaces de producción de rayos X  $L_{\alpha}$  medidas en este trabajo entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_L^R$ . (b) Cocientes de estas secciones entre las predicciones obtenidas a partir del ajuste semiempírico efectuado en la sección 4.4.

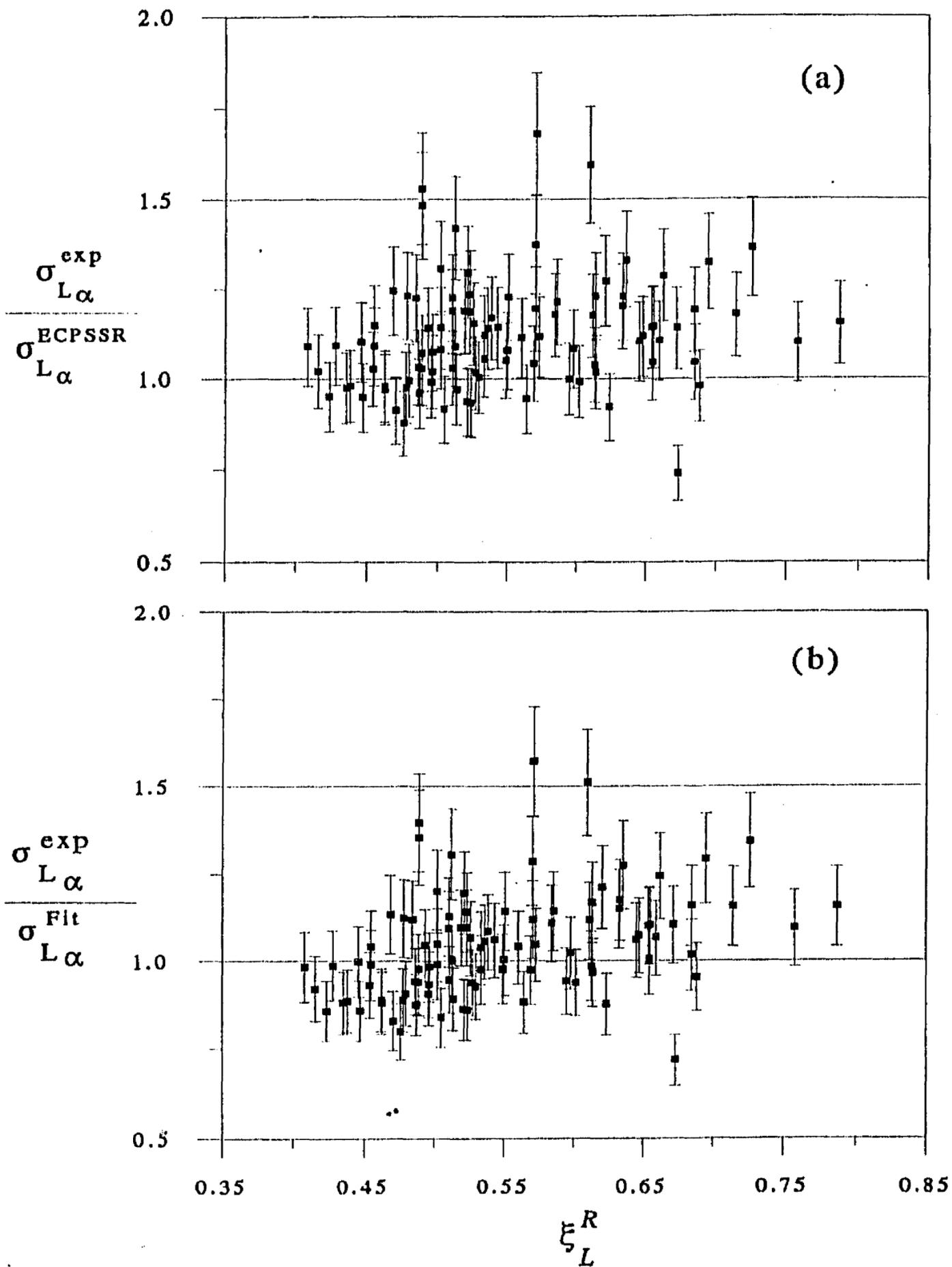


Figura 4.10 Cocientes de las secciones eficaces de producción de rayos X  $L_1$  y  $L_{\beta 2}$  medidas en este trabajo entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_L^R$ .

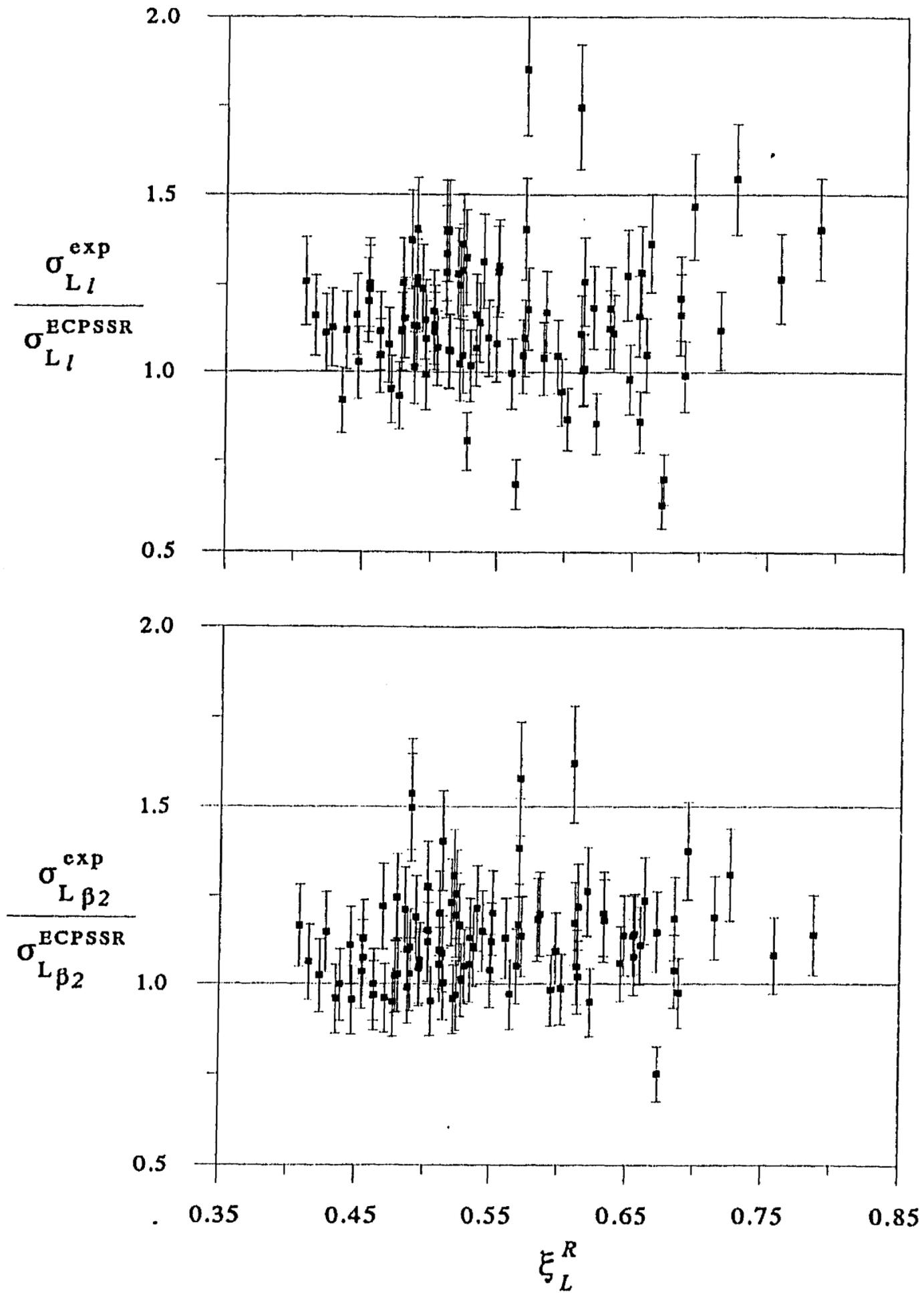
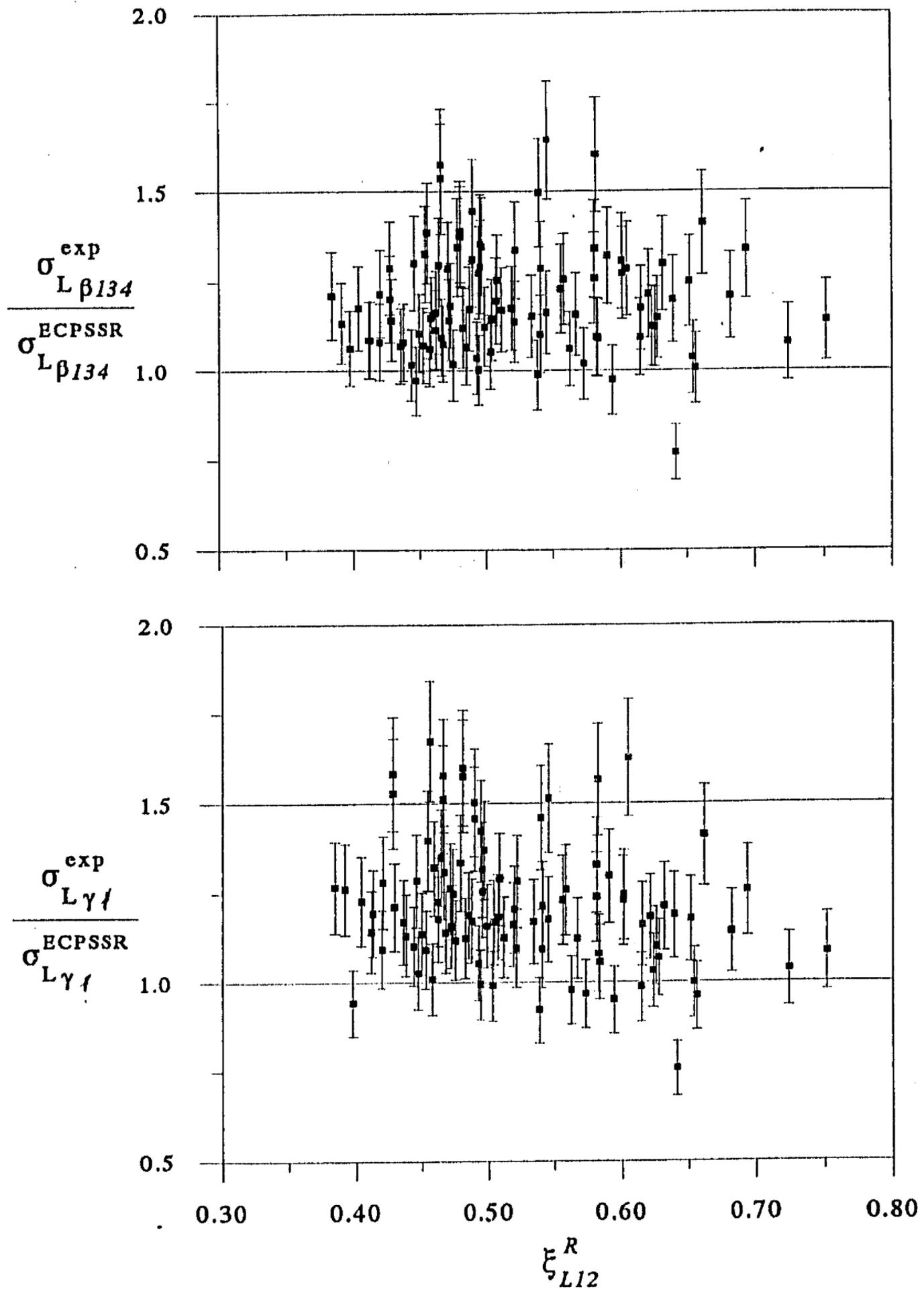


Figura 4.11 Cocientes de las secciones eficaces de producción de rayos X  $L_{\beta_{134}}$  y  $L_{\gamma_1}$  medidas en este trabajo entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_{L_{12}}^R$ .



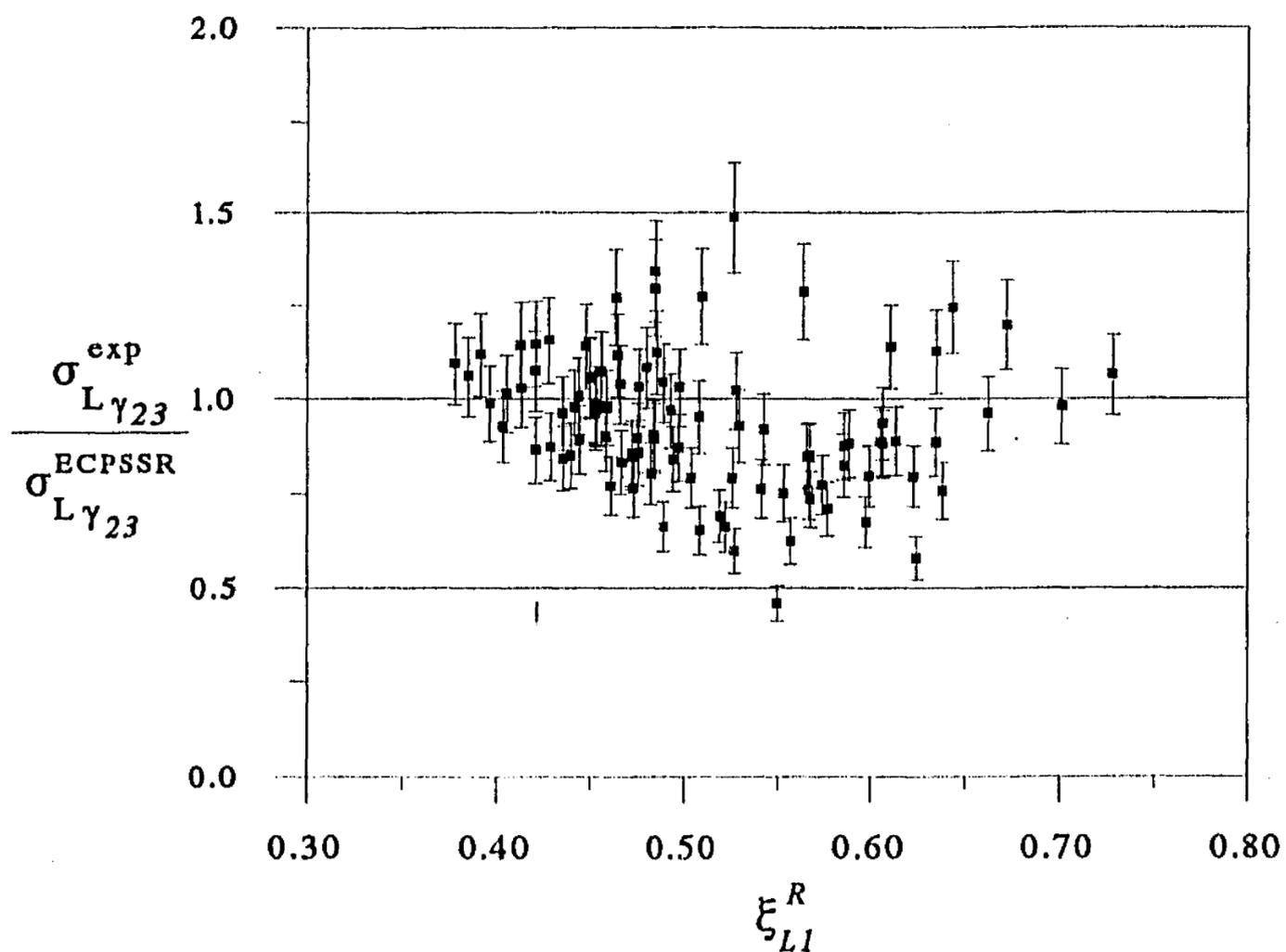


Figura 4.12 Cocientes de las secciones eficaces de producción de rayos  $X L_{\gamma 23}$  medidas en este trabajo entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_{L1}^R$ .

#### 4.2 COMPARACION DE LOS RESULTADOS DE LAS SECCIONES DE IONIZACION

En esta sección, comparamos los resultados de las secciones de ionización de las capas L obtenidos en este trabajo, a partir de los métodos de Datz *et al.* [DATS74] y de Rayburn y Metha [RAYL83, RAYL85] (ver sección 3.3.1), empleando las probabilidades de emisión

radiativa de Scofield [SCOJ74] y de Salem *et al.* [SALS74]. Estas comparaciones también se hacen en términos de los cocientes de las secciones experimentales entre las teóricas predichas por el modelo ECPSSR, tal como se indica en la Ec. (4.1), donde ahora  $j = 1, 2, 3$ , se refiere a cada una de las subcapas L. Estos cocientes se dan en función de las velocidades relativistas reducidas  $\xi_{L_j}^R$  correspondientes a cada una de las subcapas  $L_j$ .

Para las secciones  $\sigma_3$ , solamente se obtuvieron diferencias menores del 3%, al calcularlas con los métodos de Datz y de Rayburn, utilizando tanto las emisiones radiativas de Scofield, como las de Salem. En la Figura 4.13 se muestran las razones de la  $\sigma_3$  experimental con la teoría ECPSSR. Se observa que los valores medidos son mayores que los predichos. La desviación promedio con respecto a la teoría es del 11%.

Para las secciones  $\sigma_2$ , los resultados obtenidos utilizando Datz y Rayburn fueron consistentes entre sí, al utilizar las emisiones radiativas de Scofield. La diferencia entre los resultados fue hasta un 4%. La misma consistencia se obtuvo al utilizar estos dos métodos con las emisiones radiativas de Salem. Pero por otra parte, se observó que los resultados usando Salem fueron un 11% más grandes que los obtenidos usando Scofield. En la Figura 4.14, se muestran los cocientes  $S_2$  de la  $\sigma_2$  experimental calculada utilizando el método de Datz y comparando entre si los resultados al emplear las emisiones radiativas de Scofield (a) y de Salem (b). Se encuentra que la desviación promedio de las medidas utilizando Scofield con respecto a teoría ECPSSR es del 20%, en tanto que utilizando Salem, esta desviación es de 31%.

Para las secciones  $\sigma_1$ , se observaron grandes discrepancias entre los dos métodos, así como también en cada uno de ellos tanto al utilizar las emisiones radiativas de Scofield como las de Salem. De esta manera, se encontraron diferencias de hasta el 40% entre estos casos. En la Figura 4.15 se muestran los cocientes  $S_1$  de las secciones  $\sigma_1$  de tal manera que se comparan las medidas utilizando el método de Datz con Scofield (a) y Salem (b), y las de Rayburn con Scofield (c). Debido a que las secciones calculadas con Rayburn y Salem, nos dan algunos valores negativos, se decidió no tomarlos en cuenta en la comparación, pues son resultados irreales. Se observa que los resultados obtenidos con el método de Datz y Scofield, se encuentran dispersos en torno a la predicción de la ECPSSR. En tanto, que para los otros dos casos los valores calculados resultaron en promedio 12% más grandes,

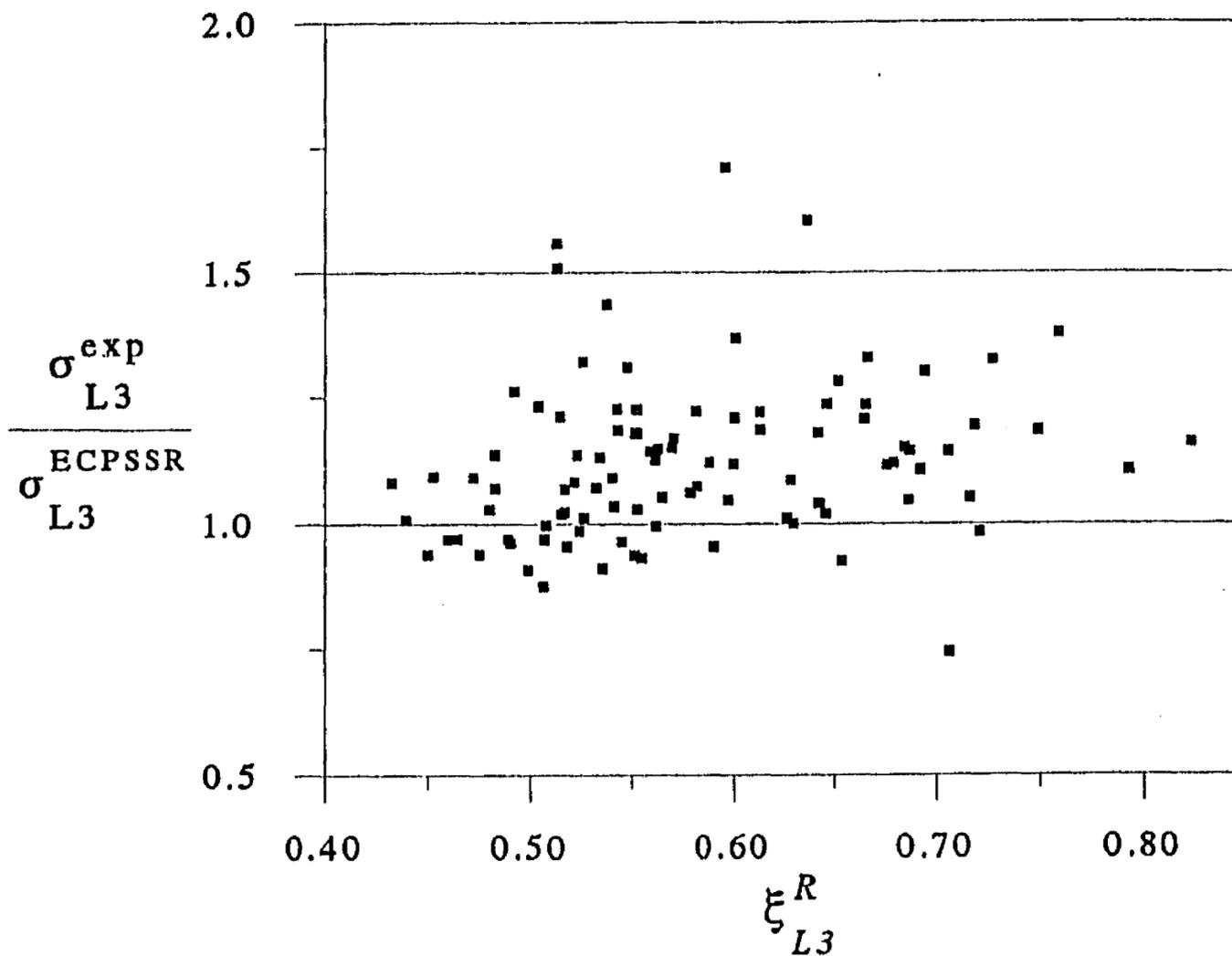


Figura 4.13 Cocientes de las secciones eficaces de ionización de la subcapa  $L_3$  obtenidas en este trabajo utilizando el método de Datz y las emisiones radiativas de Scofield, entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_{L_3}^R$ .

que los de la ECPSSR.

De las comparaciones anteriores se puede decir, que el método de Datz junto con las emisiones radiativas de Scofield, se presenta como el más consistente y cercano a las predicciones de la teoría ECPSSR para las secciones de ionización, en comparación con los otros procedimientos empleados en este trabajo.

Figura 4.14 Cocientes de las secciones eficaces de ionización de la subcapa L<sub>2</sub> obtenidas en este trabajo utilizando el método de Datz y las emisiones radiativas de (a) Scofield y (b) Salem, entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_{L_2}^R$ .

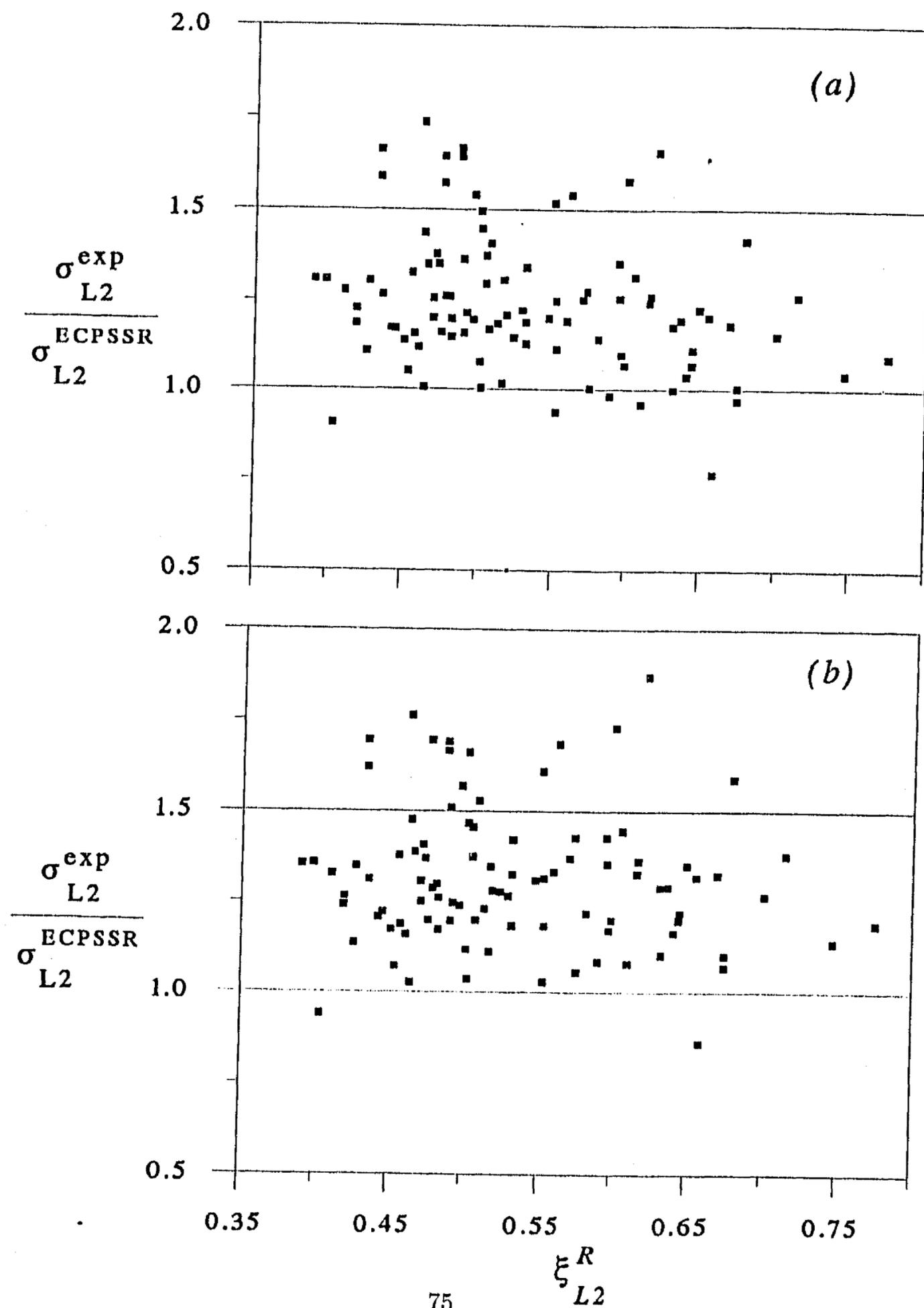
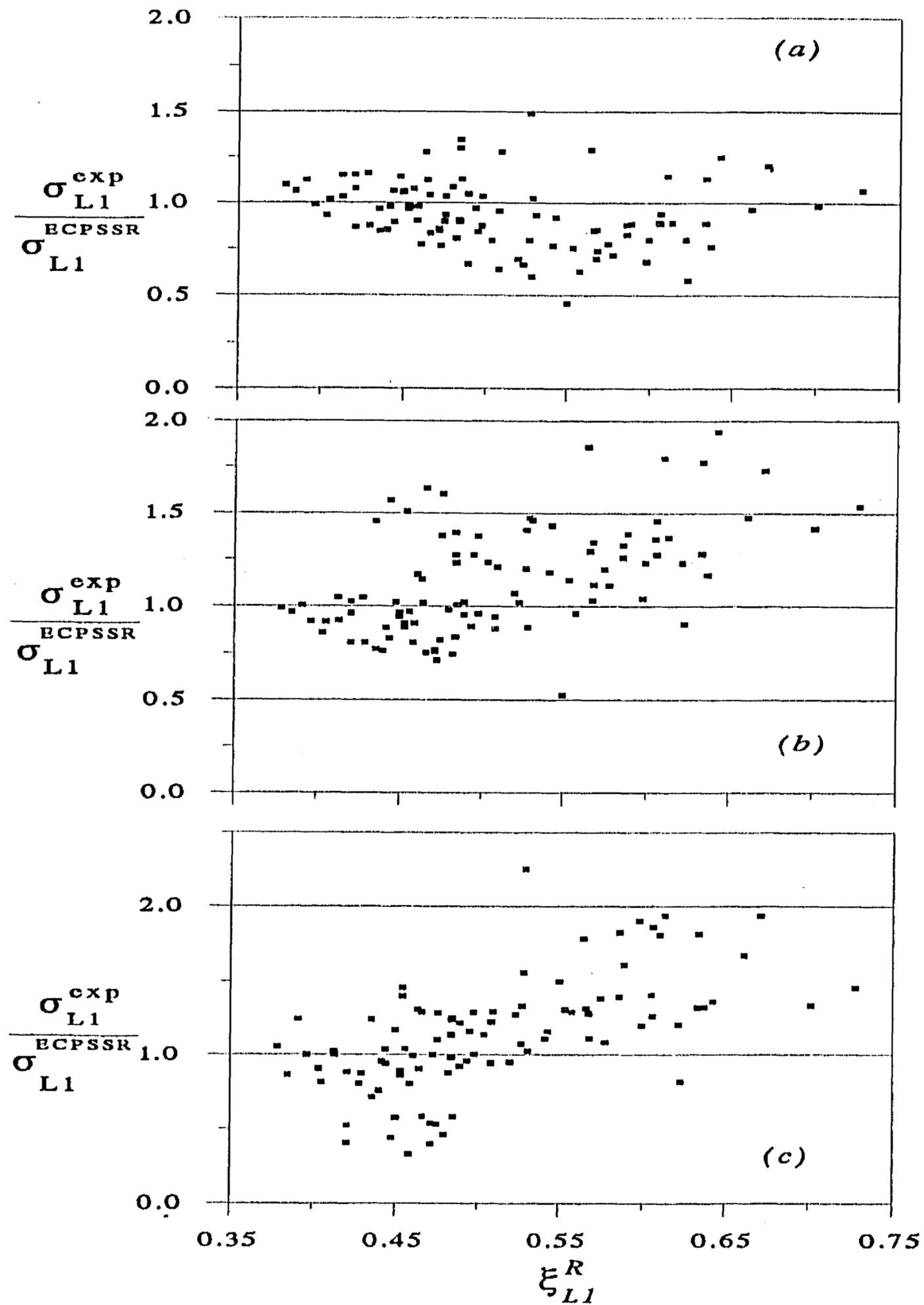


Figura 4.15 Cocientes de las secciones de ionización de  $L_1$  obtenidos con el método y las emisiones de: (a) Datz y Scofield, (b) Datz y Salem, (c) Rayburn y Scofield.



Con base en esta consistencia de los resultados utilizando el método de Datz y con Scofield, se comparan estos resultados para cada elemento con los reportados por otros autores y con las predicciones ECPSSR, en función de la energía de incidencia de los protones. En las figuras 4.16 a 4.30 se muestran estas comparaciones para las secciones de ionización de cada una de las subcapas L. Las medidas de cada autor se indican por medio de una clave y su correspondiente referencia se encuentra enlistada en la Tabla 4.3.

De estas comparaciones se encuentra que para el Cs son las primeras medidas que se efectúan en este intervalo de energías de incidencia. Las medidas obtenidas muestran en general el mismo comportamiento teórico y resultan ser del mismo orden de magnitud que las de otros autores. Se observa que este intervalo de energías para los elementos con número atómico  $52 \leq Z \leq 66$  la mayoría de las medidas resultan ser mayores que la ECPSSR.

#### **4.3 COMPILACION DE SECCIONES DE IONIZACION Y DE PRODUCCION DE RAYOS X PARA CAPAS L**

Con la finalidad de comprender mejor los fenómenos de ionización y de producción de rayos X por incidencia de protones, efectuamos una compilación de los valores de estas secciones para la capa atómica L reportados en la literatura hasta la fecha. Además, ésta también permitirá comparar los resultados obtenidos en este trabajo con los reportados por otros autores. En la compilación no se consideraron secciones de producción totales para la capa L y solamente se puso atención a los valores de grupos de líneas de emisión, como  $L_\alpha$ ,  $L_\beta$ , etc. Para las secciones de ionización sólo se consideraron aquellos trabajos en los cuales los autores reportaron dichos valores en forma tabular.

Los trabajos a partir de los cuales se obtuvieron las secciones de producción de rayos X por impacto de protones se muestran en la Tabla 4.1, indicadas por medio de una clave. Las referencias correspondientes a cada clave se indican en la tabla 4.3. La Tabla 4.1 incluye además indicaciones sobre cada trabajo referentes a los elementos estudiados, al intervalo de energías utilizado, el número total de medidas efectuadas, los errores relativos  $\epsilon^r$  y las líneas de emisión detectadas. En la columna "Tipo" se indica el tipo de blanco empleado, D si es delgado, G si es grueso y J si utiliza ambos. También se indica con una

Figura 4.16 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en telurio, a diferentes energías de incidencia.

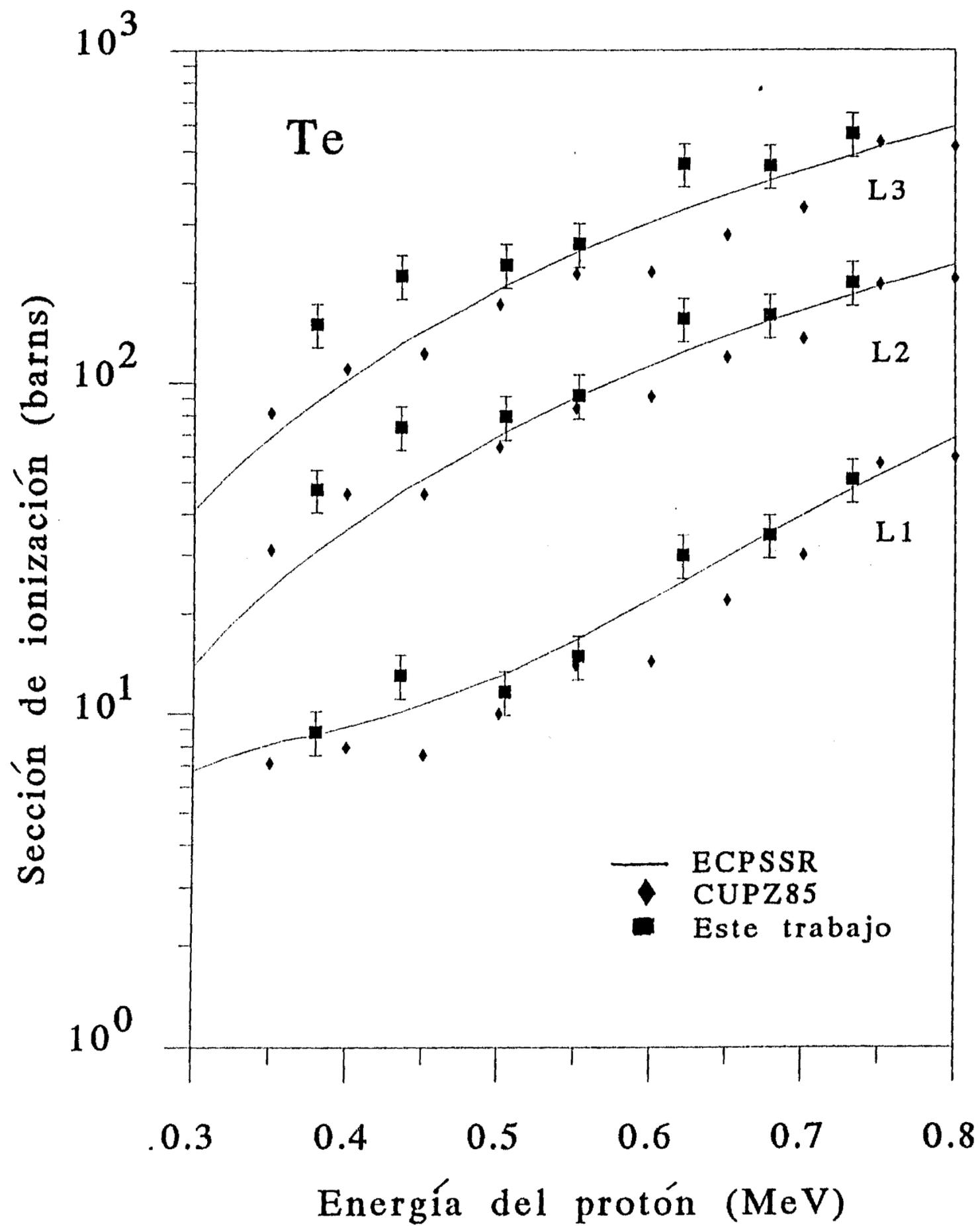


Figura 4.17 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en cesio, a diferentes energías de incidencia.

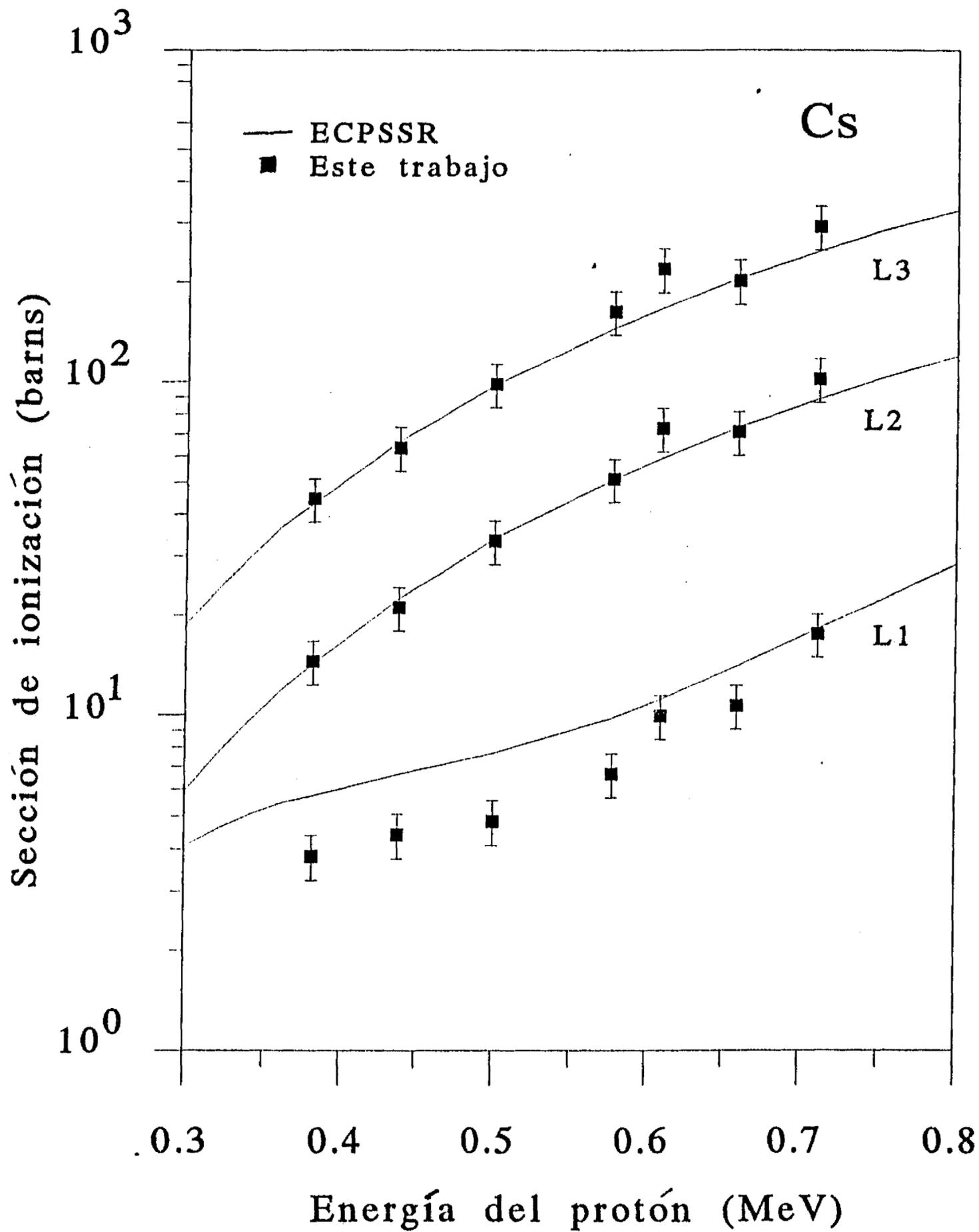


Figura 4.18 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en bario, a diferentes energías de incidencia.

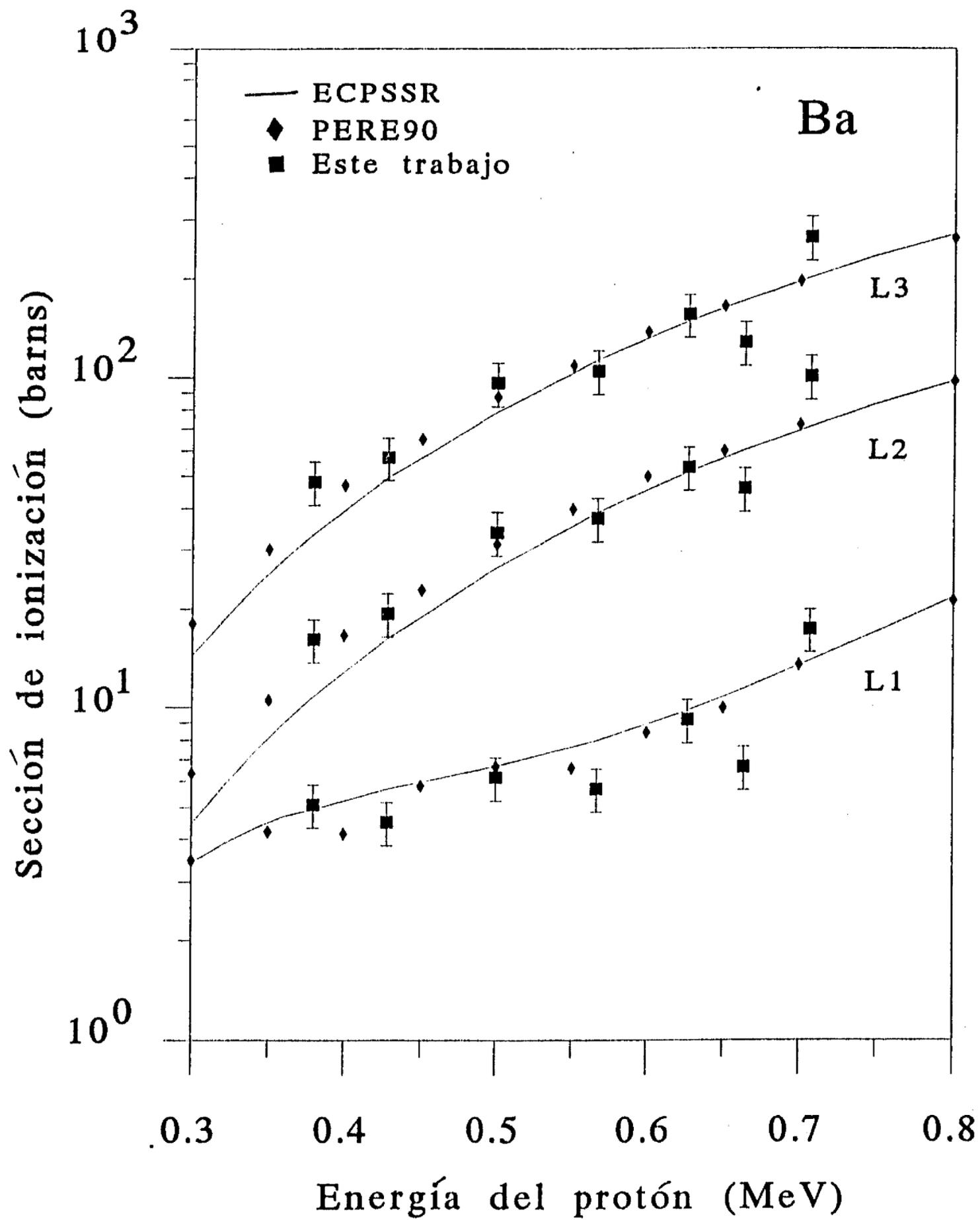


Figura 4.19 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en lantano, a diferentes energías de incidencia.

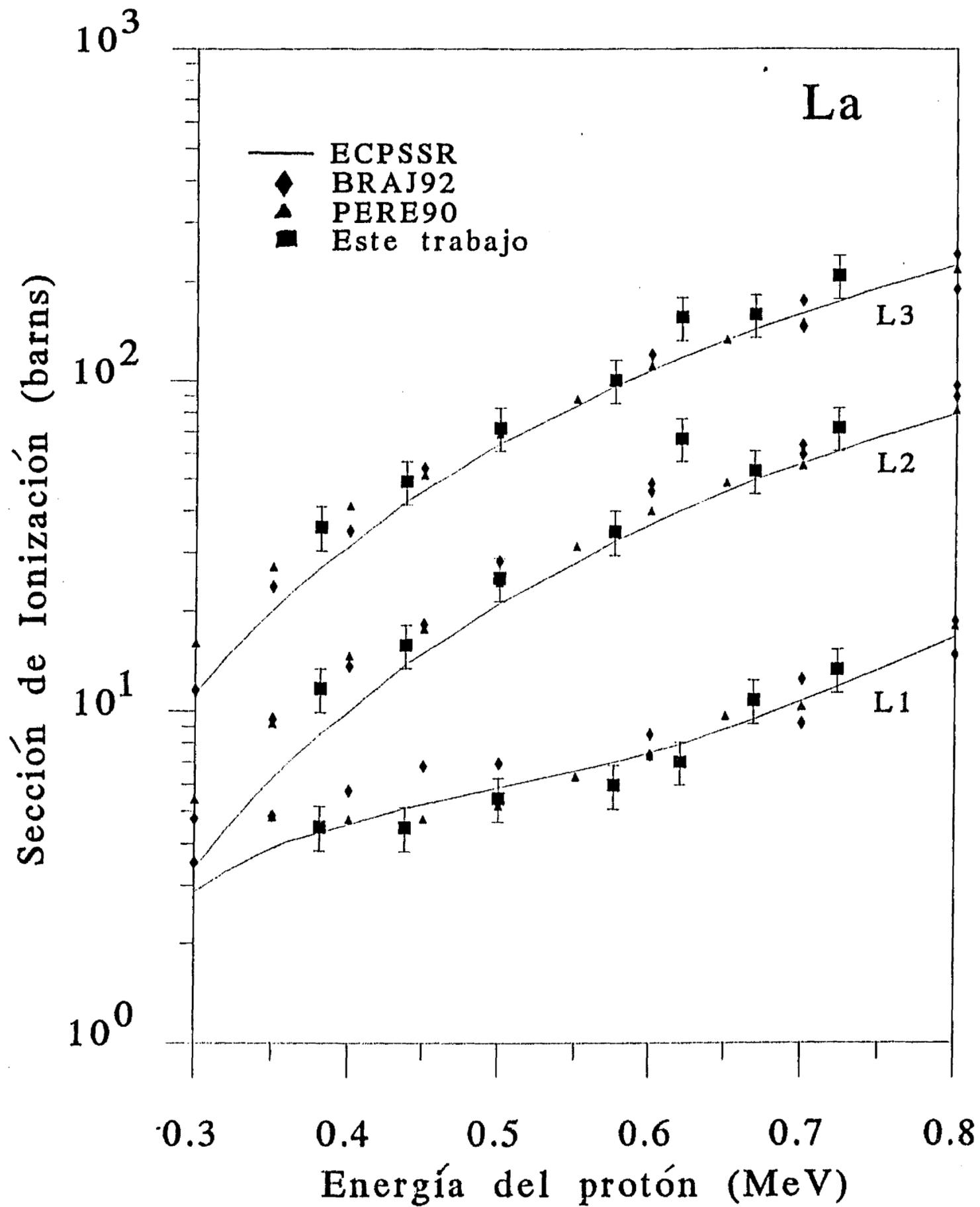


Figura 4.20 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en cerio, a diferentes energías de incidencia.

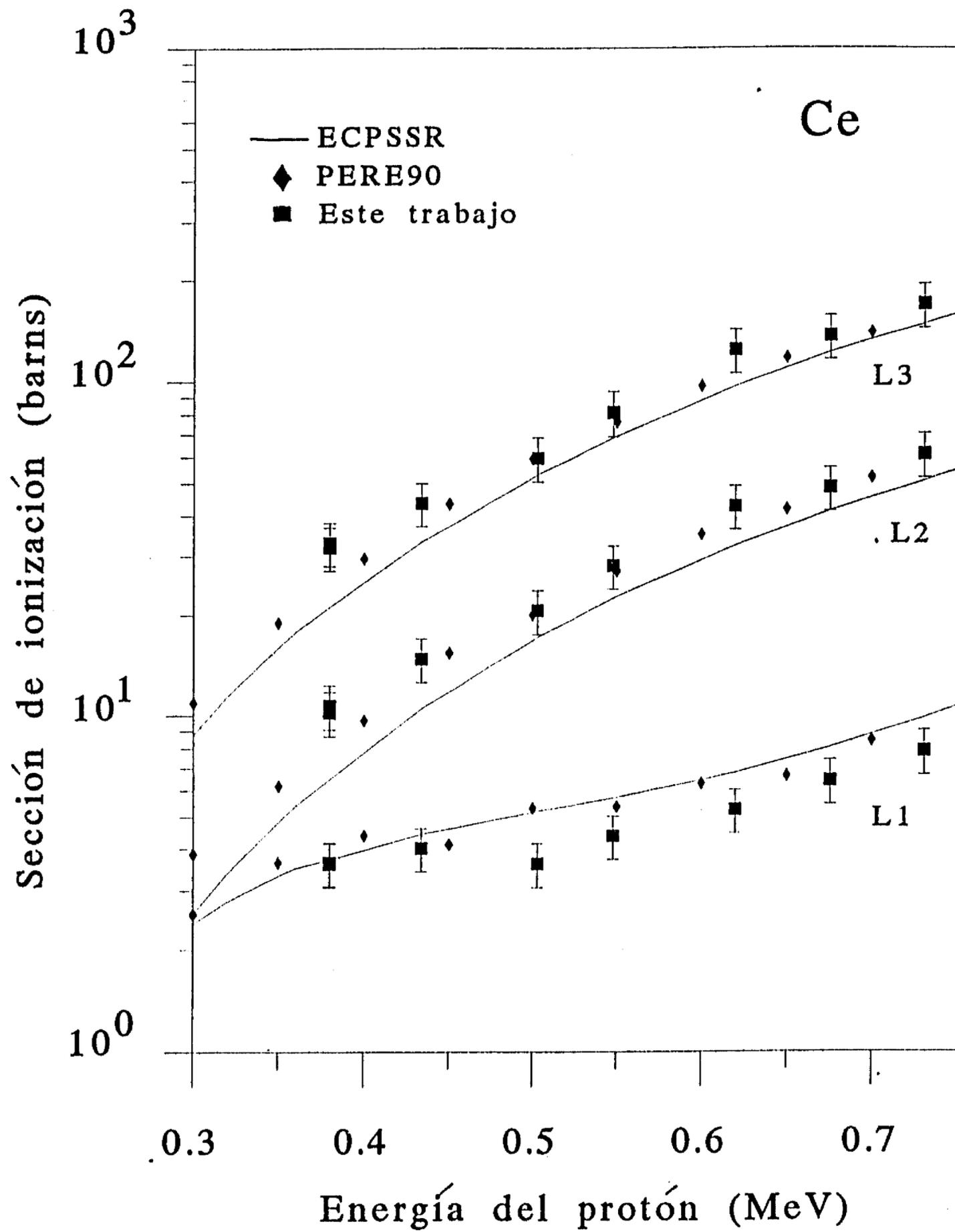


Figura 4.21 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en praseodimio, a diferentes energías de incidencia.

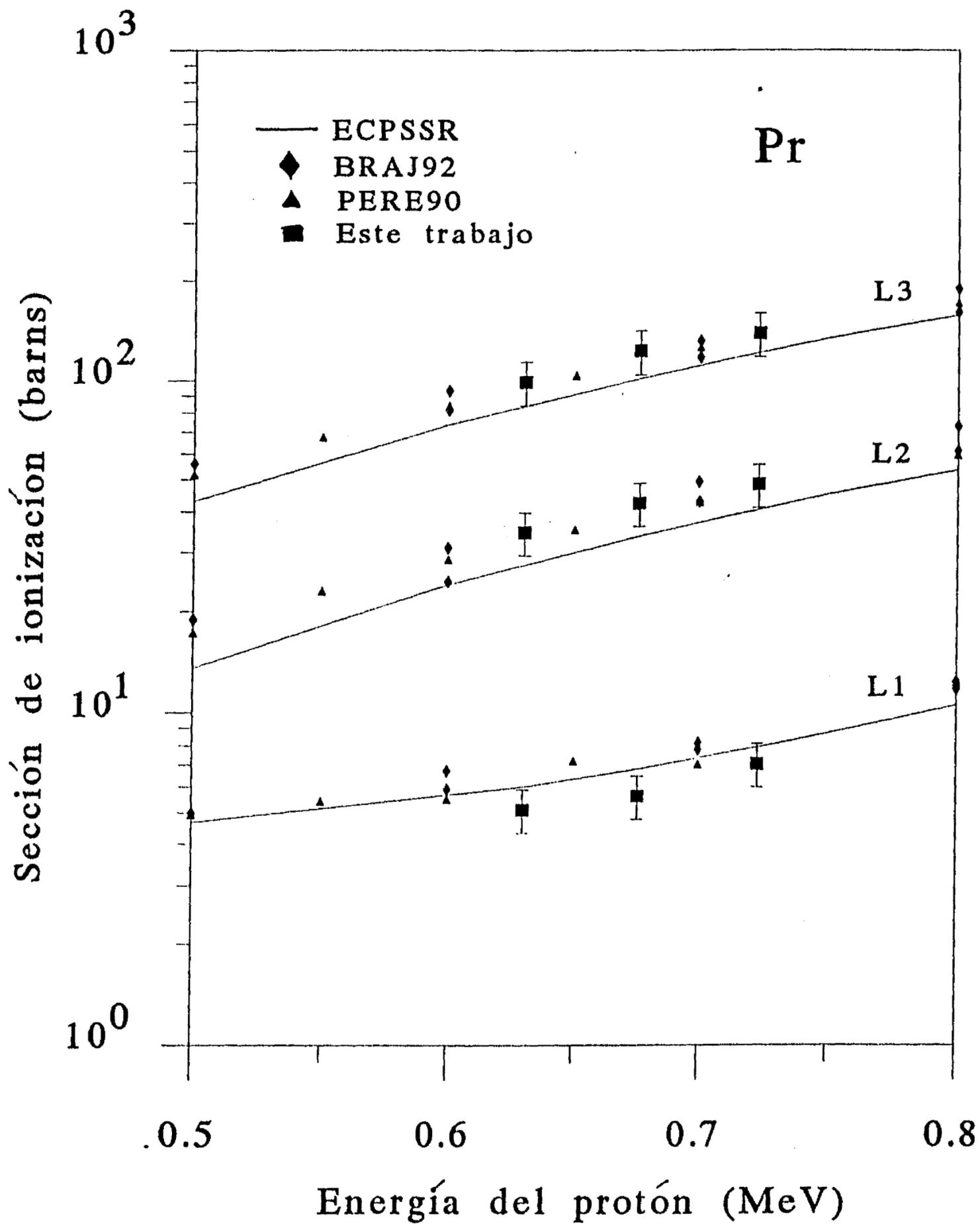


Figura 4.22 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en neodimio, a diferentes energías de incidencia.

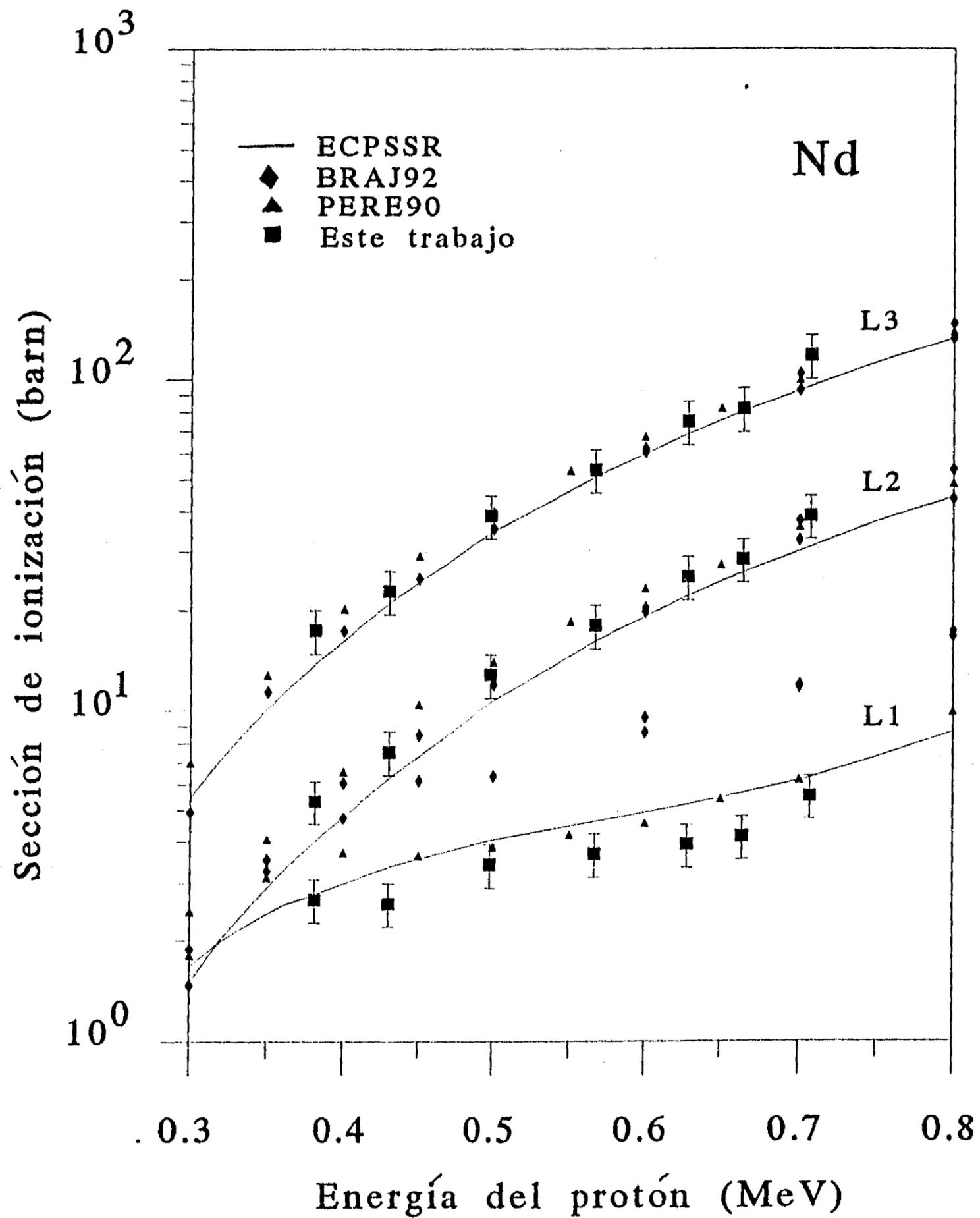


Figura 4.23 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en samario, a diferentes energías de incidencia.

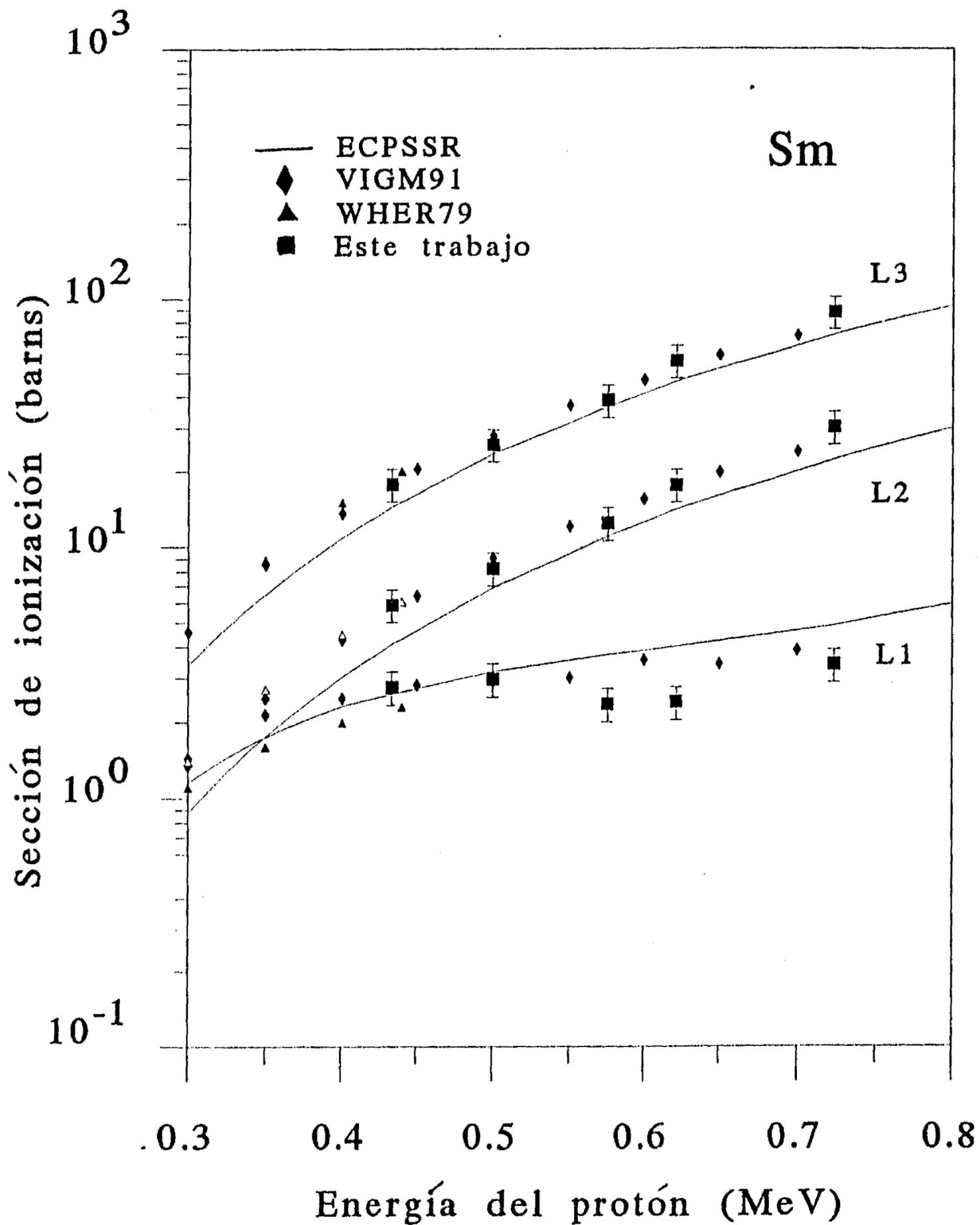


Figura 4.24 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en gadolinio, a diferentes energías de incidencia.

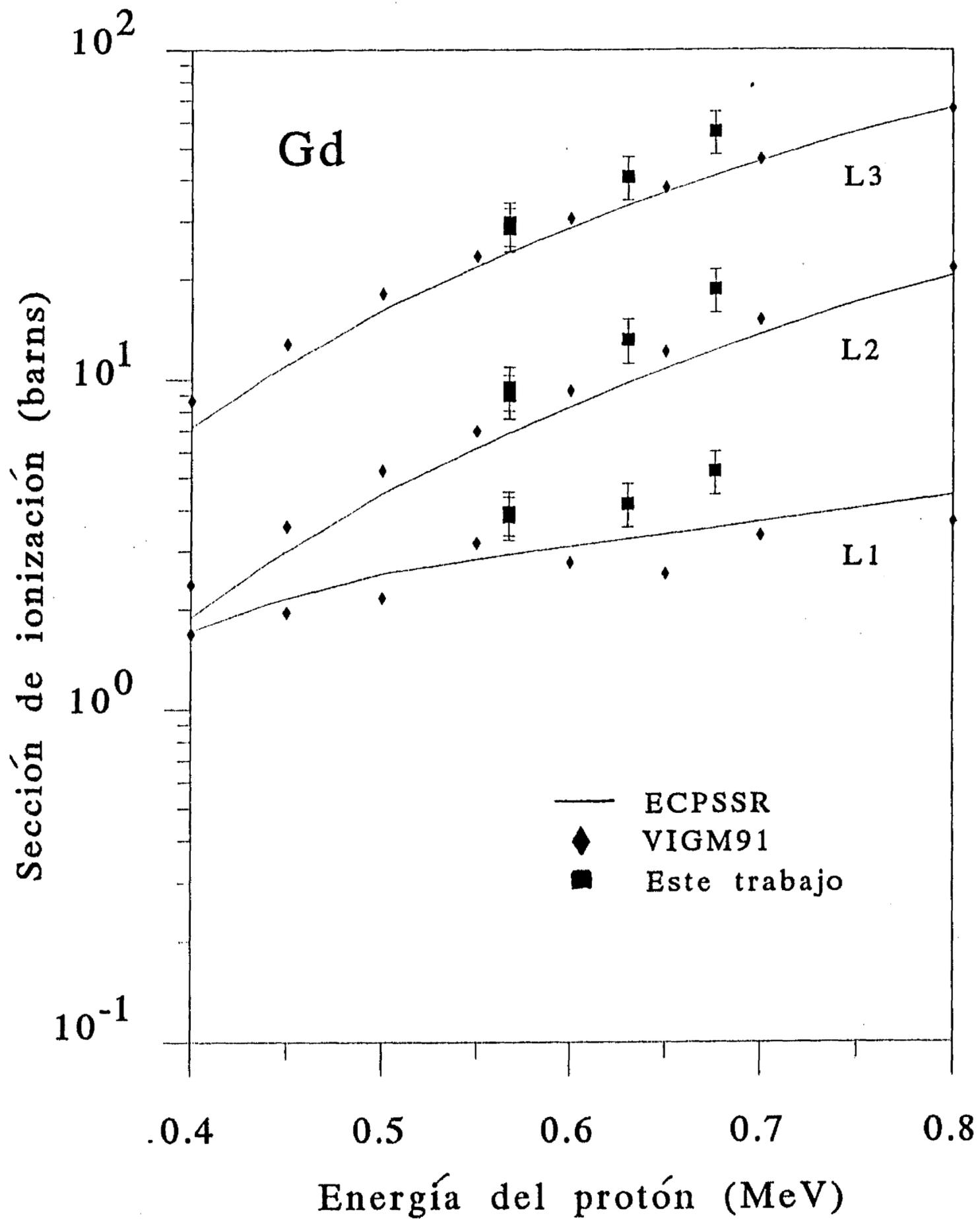


Figura 4.25 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en dysprosio, a diferentes energías de incidencia.

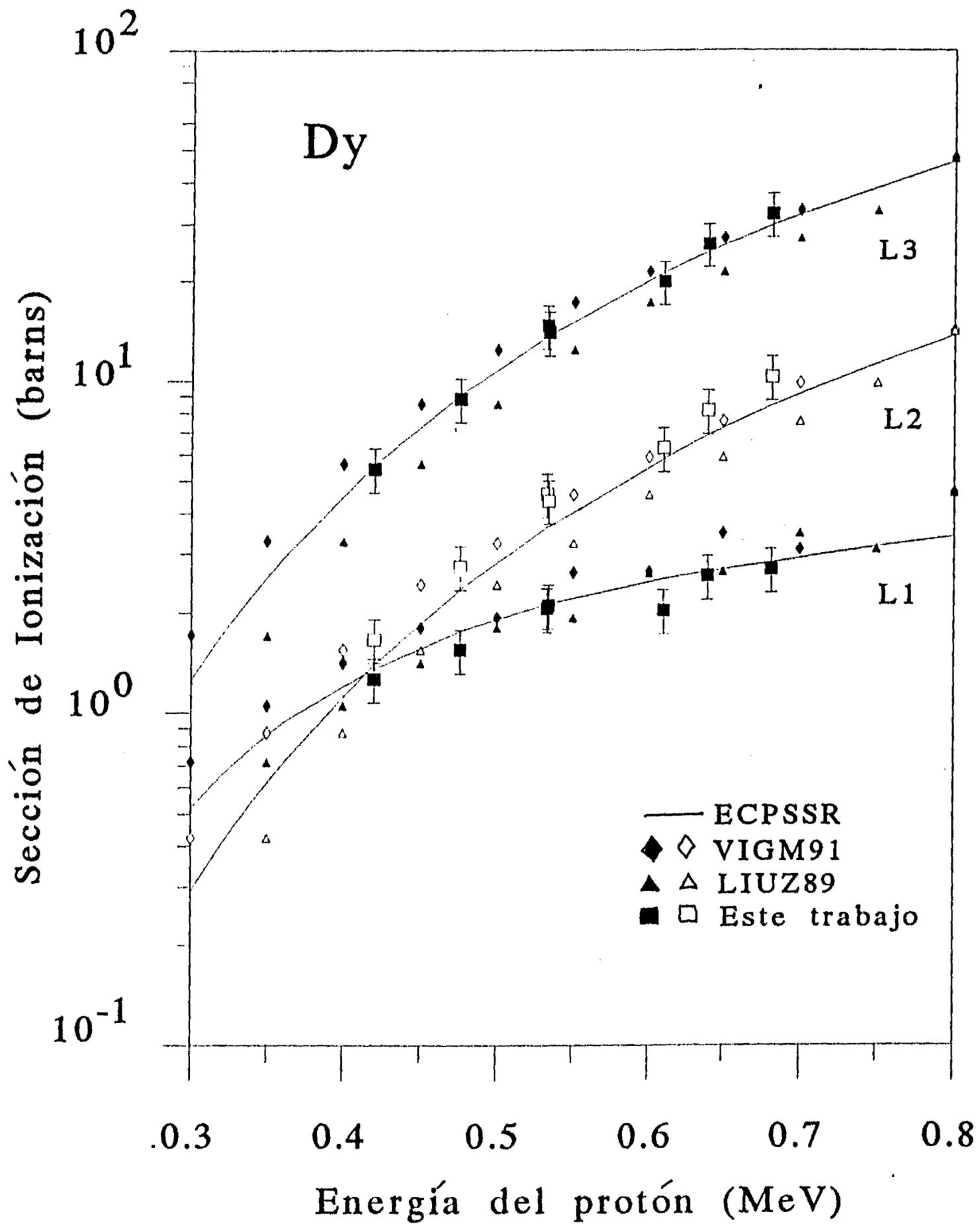


Figura 4.26 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en holmio, a diferentes energías de incidencia.

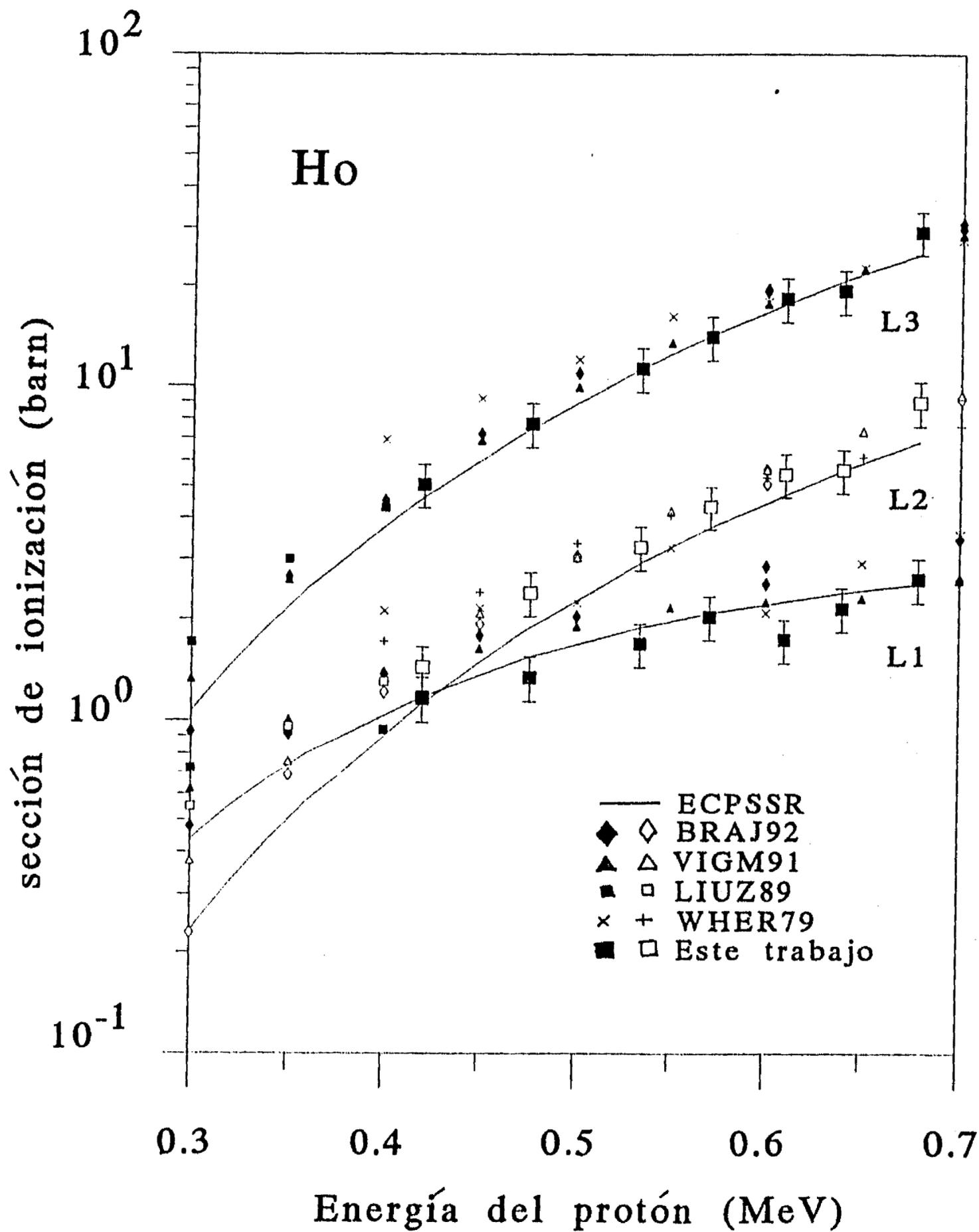


Figura 4.27 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en erbio, a diferentes energías de incidencia.

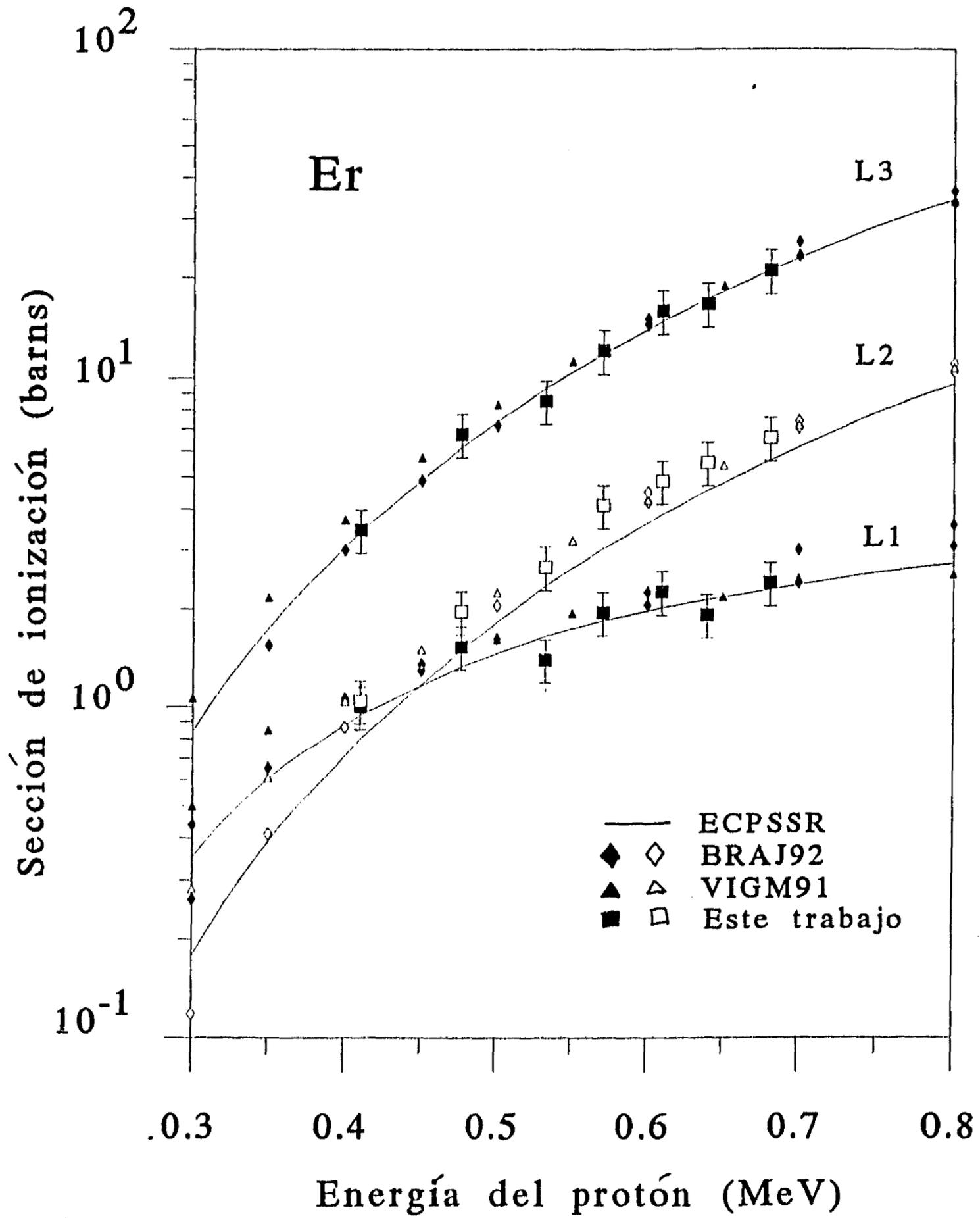


Figura 4.28 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en tulio, a diferentes energías de incidencia.

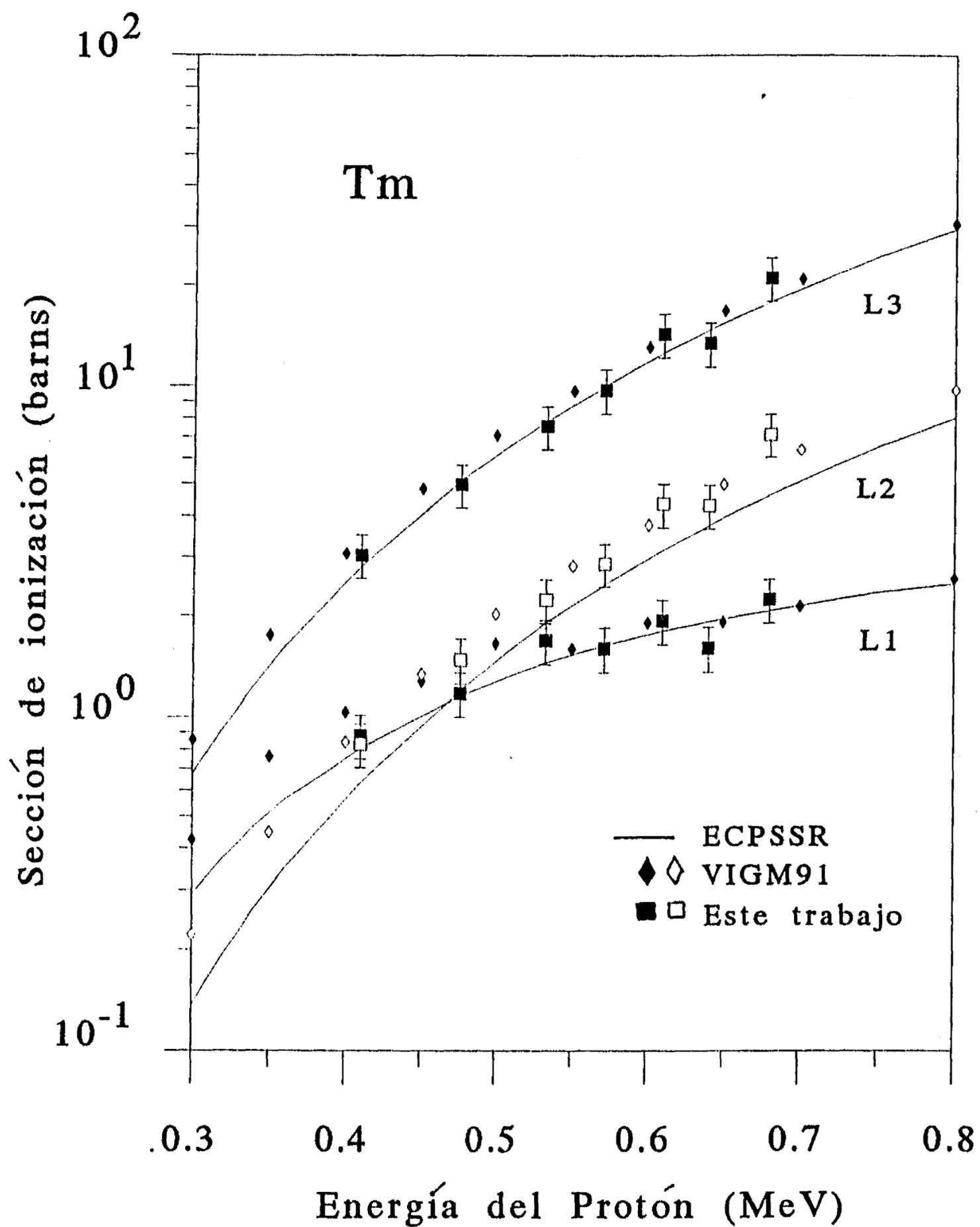


Figura 4.29 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en yterbio, a diferentes energías de incidencia.

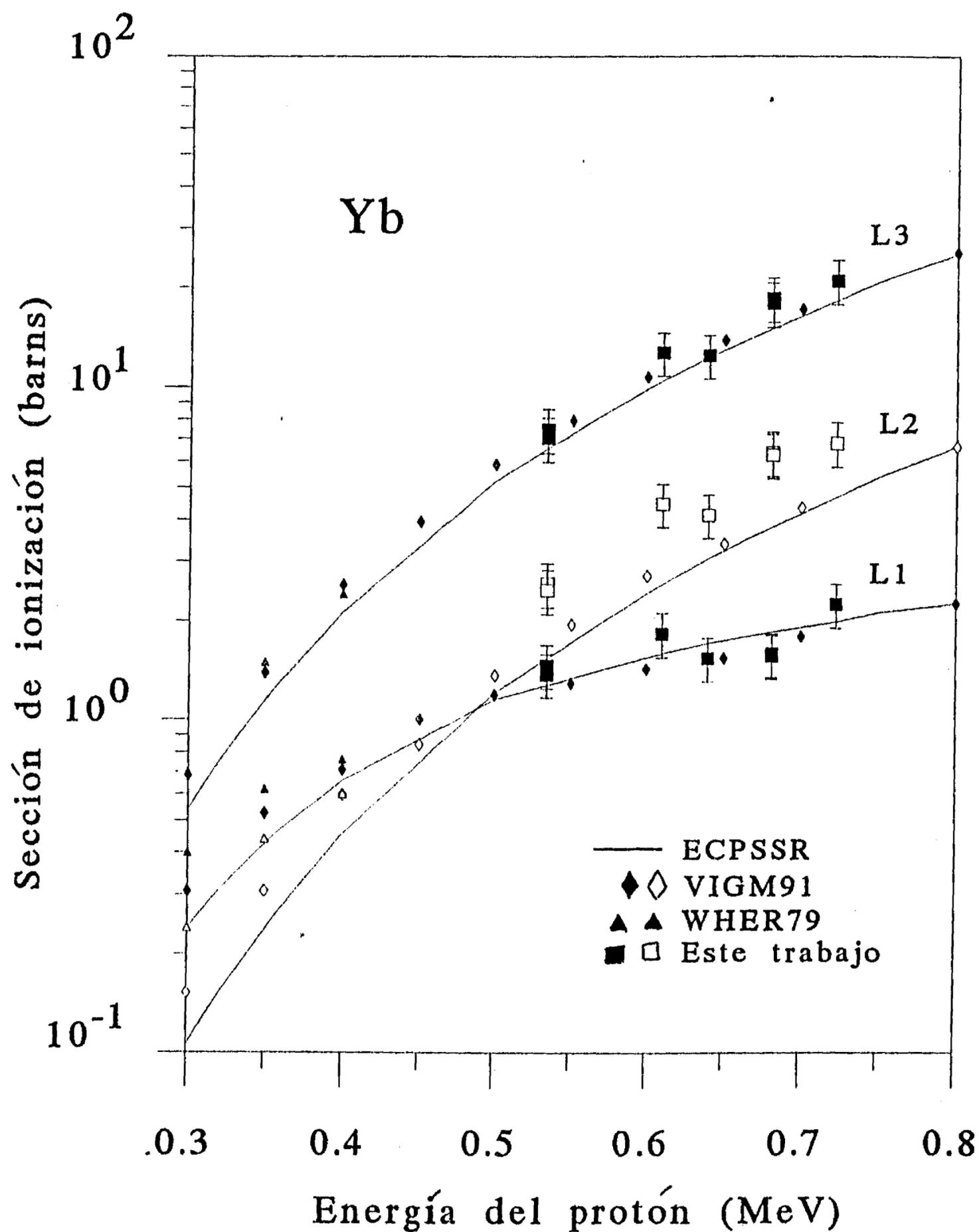
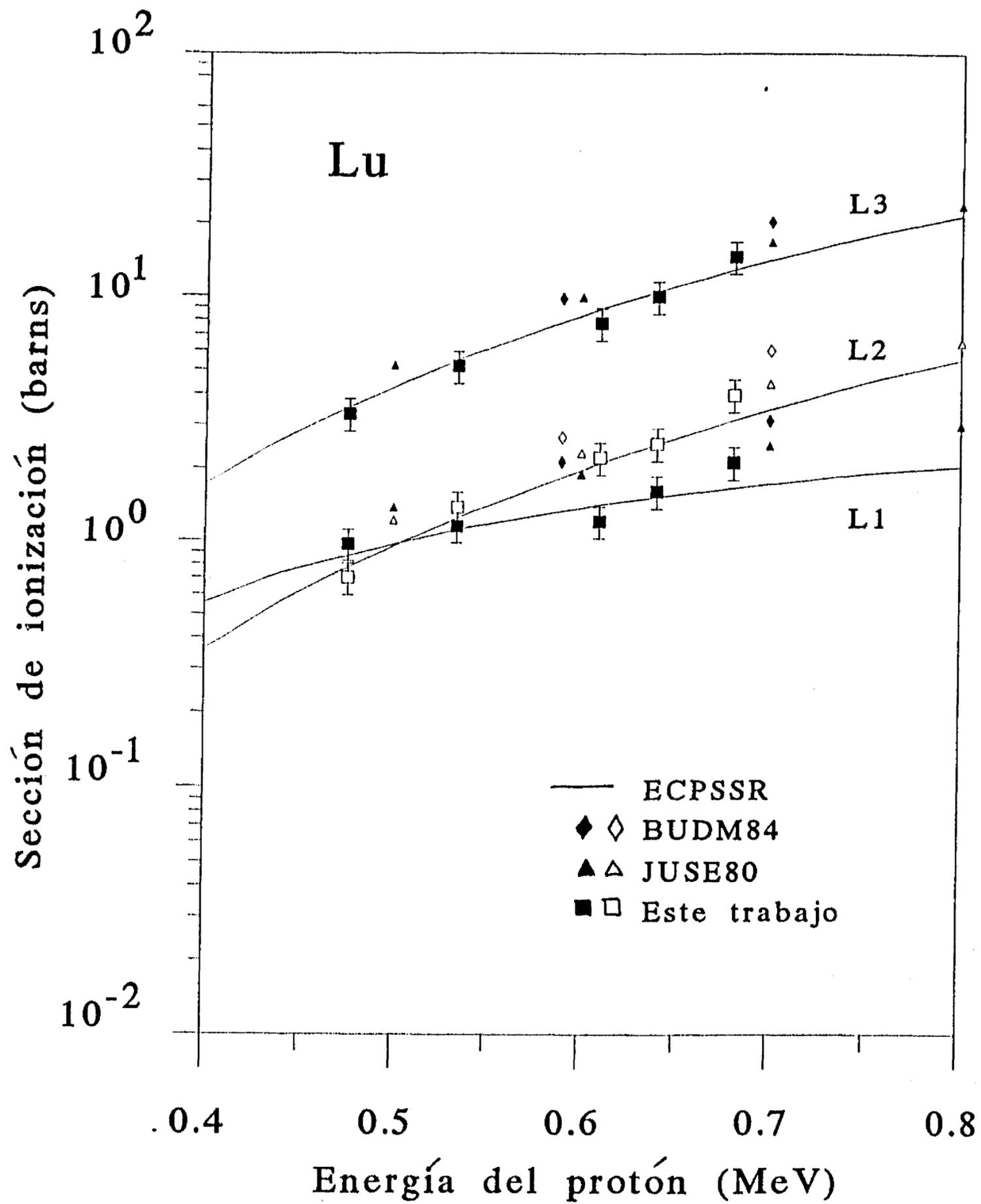


Figura 4.30 Medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de de ionización de las capas L por incidencia de protones en lutecio, a diferentes energías de incidencia.



R si se empleo la retrodispersión de Rutherford para determinar la carga acumulada en el blanco, I si se empleo un integrador de corriente y K si se determinó la sección eficaz con referencia a las secciones de la capa K. Esta compilación cuenta con 1973 medidas de secciones de rayos X  $L_{\alpha}$ . De los datos anteriores, 633 fueron medidos a energías de incidencia menores de 1 MeV.

En la Figura 4.31 se muestran los cocientes S de las secciones de rayos X  $L_{\alpha}$  de la compilación entre su respectiva predicción por la teoría ECPSSR en función de  $\xi_L^R$ . Para poder determinar los valores teóricos también se utilizaron los datos de Krause [KRAM79] para las fluorescencias y coeficientes de Coster-Kronig y las emisiones radiativas de Scofield [SCOJ74]. Se observa que el cociente S de esta sección de producción de rayos X presenta para valores de  $\xi_L^R > 0.8$  una distribución promedio en torno a la unidad. Cuando  $0.3 < \xi_L^R < 0.8$  el cociente S comienza a aumentar, mostrando una subestimación del modelo teórico ECPSSR con respecto a las secciones experimentales. Finalmente se observa una dispersión muy grande en S cuando  $\xi_L^R < 0.3$ , mostrando inconsistencias en la teoría como en las medidas efectuadas.

Aprovechando la cantidad de puntos que se tiene en la compilación para la sección de la  $L_{\alpha}$ , se procedió a dividir el conjunto de datos en tres intervalos de acuerdo con el número atómico del blanco y procurando que cada uno tuviera la misma cantidad de puntos. Esto anterior con la finalidad de determinar si existe algún tipo de dependencia entre la sección de  $L_{\alpha}$  y el número atómico del blanco. Estos intervalos considerados fueron: el I de  $46 \leq Z \leq 61$ , el II de  $62 \leq Z \leq 71$  y el III de  $72 \leq Z \leq 92$ . En las figuras 4.32 a 4.34 se muestran los cocientes S para cada intervalo respectivamente. Los tres conjuntos de datos presentan un comportamiento similar. El cociente aumenta a medida que disminuye  $\xi_L^R$  y para los valores más pequeños la dispersión de las medidas aumenta sin poder determinar claramente el comportamiento. Para los intervalos I y II las medidas resultan ser en promedio mayores que la ECPSSR y no se observan diferencias muy notables entre ellas. En tanto para el intervalo III los cocientes son en promedio más cercanos a la unidad que en comparación con los otros dos casos, pero aun así, las medidas siguen siendo por lo general mayores que las predicciones.

En la Tabla 4.2 se muestran las claves de las referencias a partir de las cuales se

Tabla 4.1 Compilación de secciones de producción de rayos X L por incidencia de protones.

Referencia	Tipo	Intervalo de $Z_2$	Intervalo de Energía [MeV]	Número de Medidas	$\epsilon^r$ (%)	Líneas de emisión
AVAL84	RD	55-64	1-2	20	6-11	$l \alpha \beta_1 \beta_2$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$
BEAR73	RD	58-92	1-3.7	108	15	$\alpha$
BHAD80	RD	79-92	0.33-1.81	67 (40)	15	$l \alpha \beta \gamma$
BRAJ84	RD	51-83	1.34-3.8	38	9	$l \alpha \beta \gamma$
BUDM84	RD	71-92	0.57-0.7	17 (17)	12-13	$l \alpha \eta \beta \gamma_1$ $\gamma_{2,3} \gamma_{44'}$
CUZP85	KD	48-52	0.35-2	48 (30)	5-30	$l \alpha \beta_1 \beta_2$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$
FASS82	RD	49	0.118-0.399	15 (15)	15	$\alpha \beta \beta_2$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$
HARM84	GI	64	0.1-0.2	11 (11)	20	$l \alpha \beta \gamma \gamma_1$
ISHK74	RD	73	1.75-4.17	11	15	$\alpha \beta_1 \beta_2$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$
JESA85	RD	79-92	0.2-1	33 (30)	6-14	$l \alpha \beta \gamma$
JESA86	RD	47-92	0.5-1.75	33 (9)	10	$l \alpha \beta_1 \beta_2$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$
JESA87	RD	63-74	0.2-1	45 (41)	6-10	$l \alpha \beta$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$
JUSE80	RD	72-77	0.5-2.5	57 (15)	5-8	$\alpha \gamma_1 \gamma_{4,4'}$
KADA90	RIJ	56-58	1-3.5	47	5-10	$l \alpha \beta_1 \beta_2$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$
KHAR78	IG	60-79	1-3	47	5-10	$l \alpha \beta \gamma$
KROA82	J	45-51	0.09-0.74	67 (67)	15	$\alpha$
LEIC77	RD	81-92	0.5-3.0	31 (5)	7-9	$l \alpha \eta \beta \gamma$
LIER73	RD	2.5-12	10-15	15	10-15	$\alpha \beta \gamma$
MILM76	RD	62-64	0.95	1 (1)	10	$\alpha \beta \gamma$
MOHH85	RD	82	0.24-0.44	11 (11)	18	$l \alpha \beta$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$
MOHH87	IG	64-82	0.22-0.44	15 (15)	7-11	$\alpha \beta \gamma$
PINA82	RD	79	0.5-4	19 (5)	7-11	$\alpha$
RAYL81	RD	60-66	0.25-2	58 (25)	15	$l \alpha \beta_1 \beta_2$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$
RAYL83	RD	56-58	0.4-2	63 (30)	15	$l \alpha \beta_1 \beta_2$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$

Tabla 4.1 (Continuación)

Referencia	Tipo	Intervalo de $Z_2$	Intervalo de Energía [MeV]	Número de Medidas	$\varepsilon^r(\%)$	Líneas de emisión
RAYL89	RD	59-72	0.25-2	101 (46)	15	$l \alpha \beta_1 \beta_2$
RODL93	RD	52-71	0.38-0.72	96 (96)	9-11	$l \alpha \beta_1 \beta_2$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$
SARL80	RD	79	2	2	15	$\alpha \beta \gamma$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$
SARW81	RD	47-92	0.25-0.4	28 (28)	9-30	$l \alpha \eta \beta \gamma$
SOKR81	RD	79	1-3	15	8	$l \alpha \beta \gamma$
SOKR82	RD	66-82	0.6-3	34 (5)	6-8	$l \alpha \beta \gamma$
SOKR86	RD	66-70	1-3	22	5-6	$l \alpha \beta_1 \beta_2$ $\gamma_1 \gamma_{2,3,4}$
TAWH74	ID	82	1.8-4.4	14	15	$l \alpha \eta \beta \gamma$
TAWH75	ID	79-83	1-4.5	29	15	$l \alpha \eta \beta \gamma$
UDEN81	ID	73	0.28-0.4	7 (7)	12	$l \alpha \beta$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$
VIGM88	KD	56-58	0.25-4.6	65 (36)	2-5	$l \alpha \beta_1 \beta_2$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$
VIGM90	KD	59-60	0.25-4.6	48 (12)	2-5	$l \alpha \beta_1 \beta_2$ $\gamma_1 \gamma_{2,3}$
WHER79	GI	59-70	0.15-0.4	36 (36)	30	$\alpha \gamma$

obtuvieron los valores de las secciones de ionización, junto con algunas indicaciones como en la tabla anterior. El método empleado para determinar la sección de ionización se denota con A si es utilizando el de Datz, B si con el de Tawara y C si es con el de Rayburn. Las emisiones radiativas utilizadas por los autores para determinar las secciones de ionización son; E si es con las de Scofield, S si es con Salem y M si se obtuvieron directamente del mismo espectro de rayos X. Para las secciones de ionización solamente se consideraron aquellos valores que fueron reportados directamente por los autores. Se cuenta en la compilación con 1018 puntos para cada sección de ionización L y se encuentra que las emisiones radiativas de Scofield son las más utilizadas en más de un 75%. De estos puntos, 577 fueron medidos a energías de incidencia de los protones de menos de 1 MeV.

Figura 4.31 Cocientes  $S_{L\alpha}$  de las secciones eficaces de producción de rayos X  $L\alpha$  contenidas en la compilación de datos, entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_L^R$ .

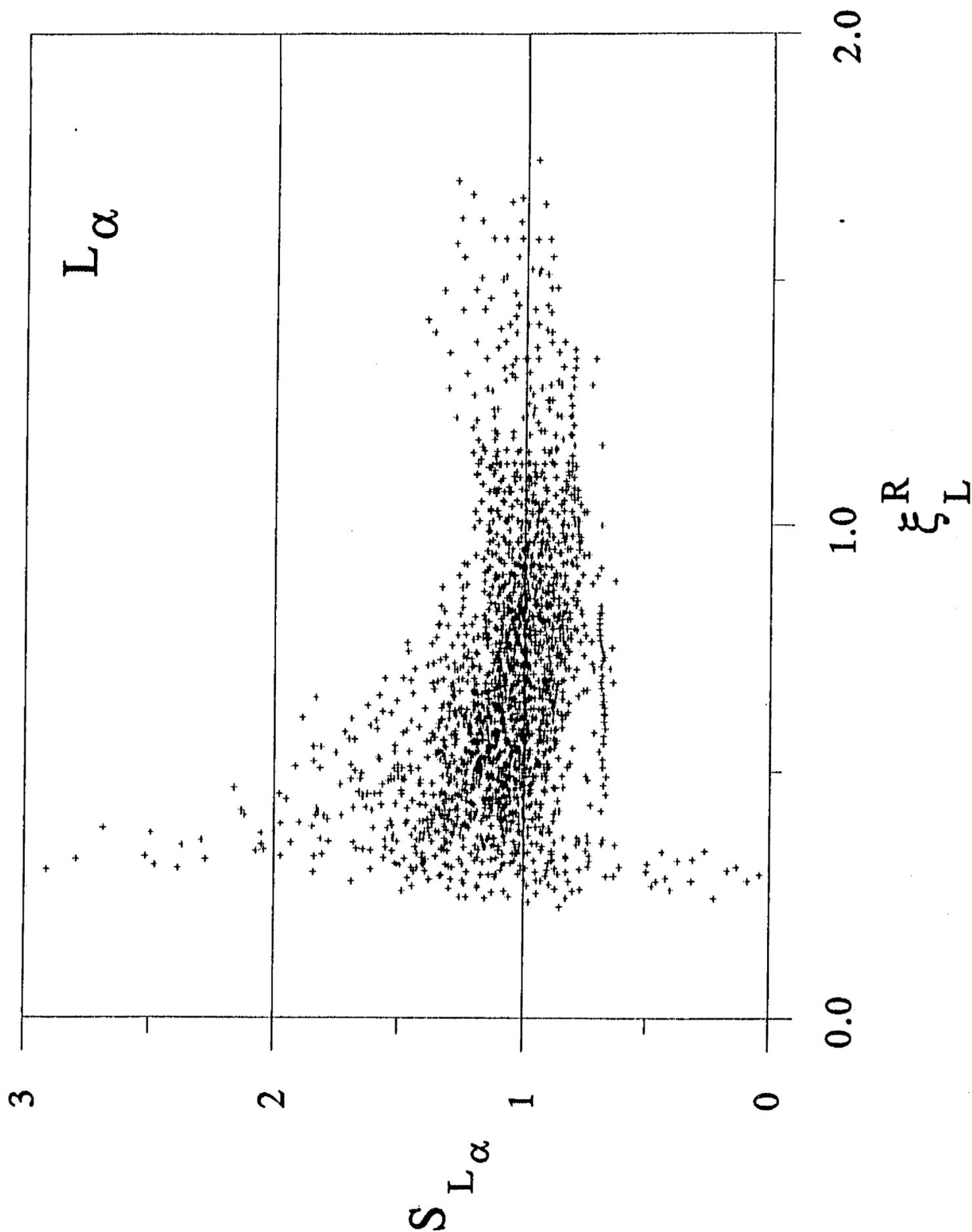


Figura 4.32 Cocientes  $S_{L\alpha}$  de las secciones eficaces de producción de rayos X  $L\alpha$  contenidas en la compilación de datos para elementos con  $46 \leq Z \leq 61$ , entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_L^R$ .

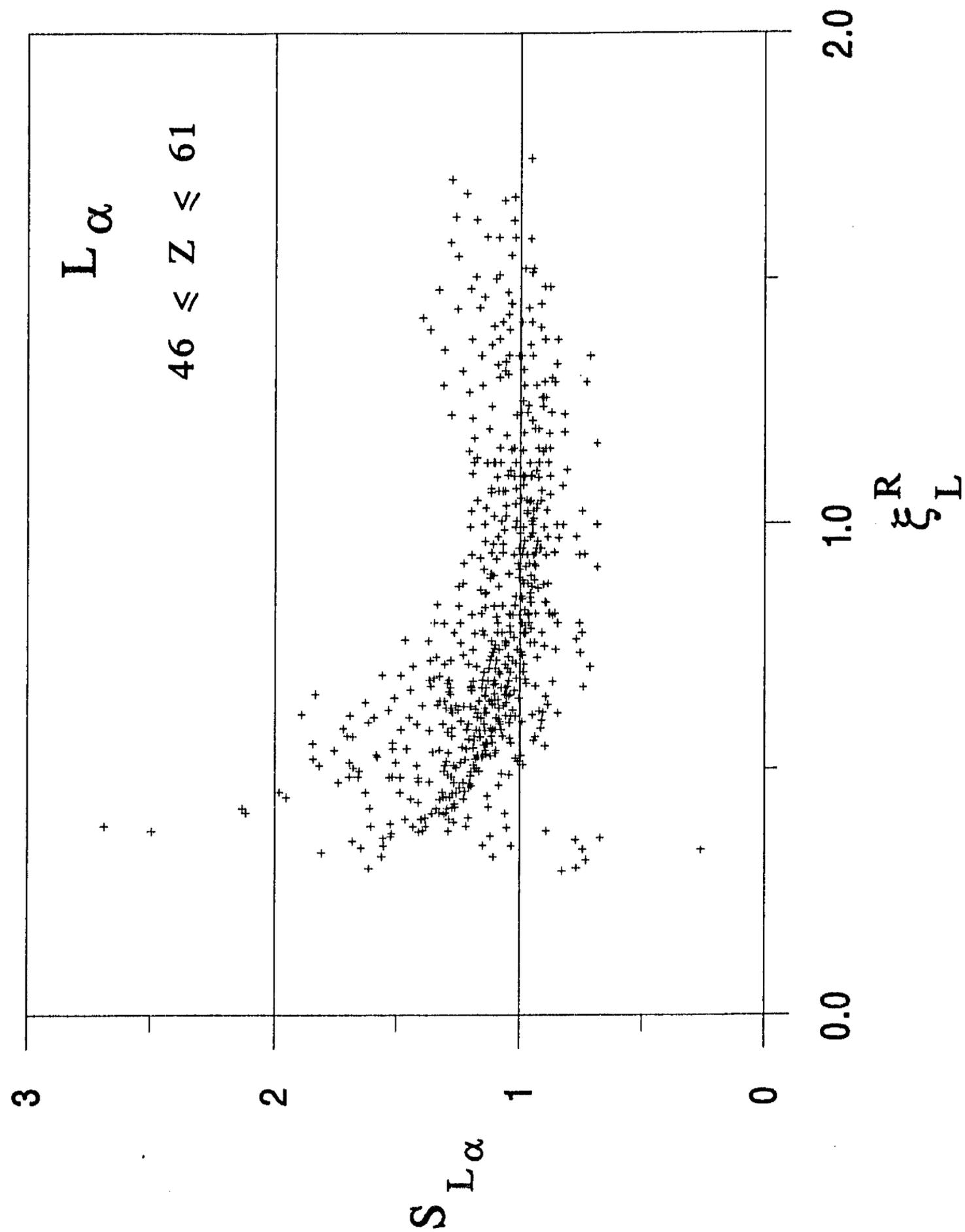


Figura 4.33 Cocientes  $S_{L\alpha}$  de las secciones eficaces de producción de rayos X  $L\alpha$  contenidas en la compilación de datos para elementos con  $62 \leq Z \leq 71$ , entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_L^R$ .

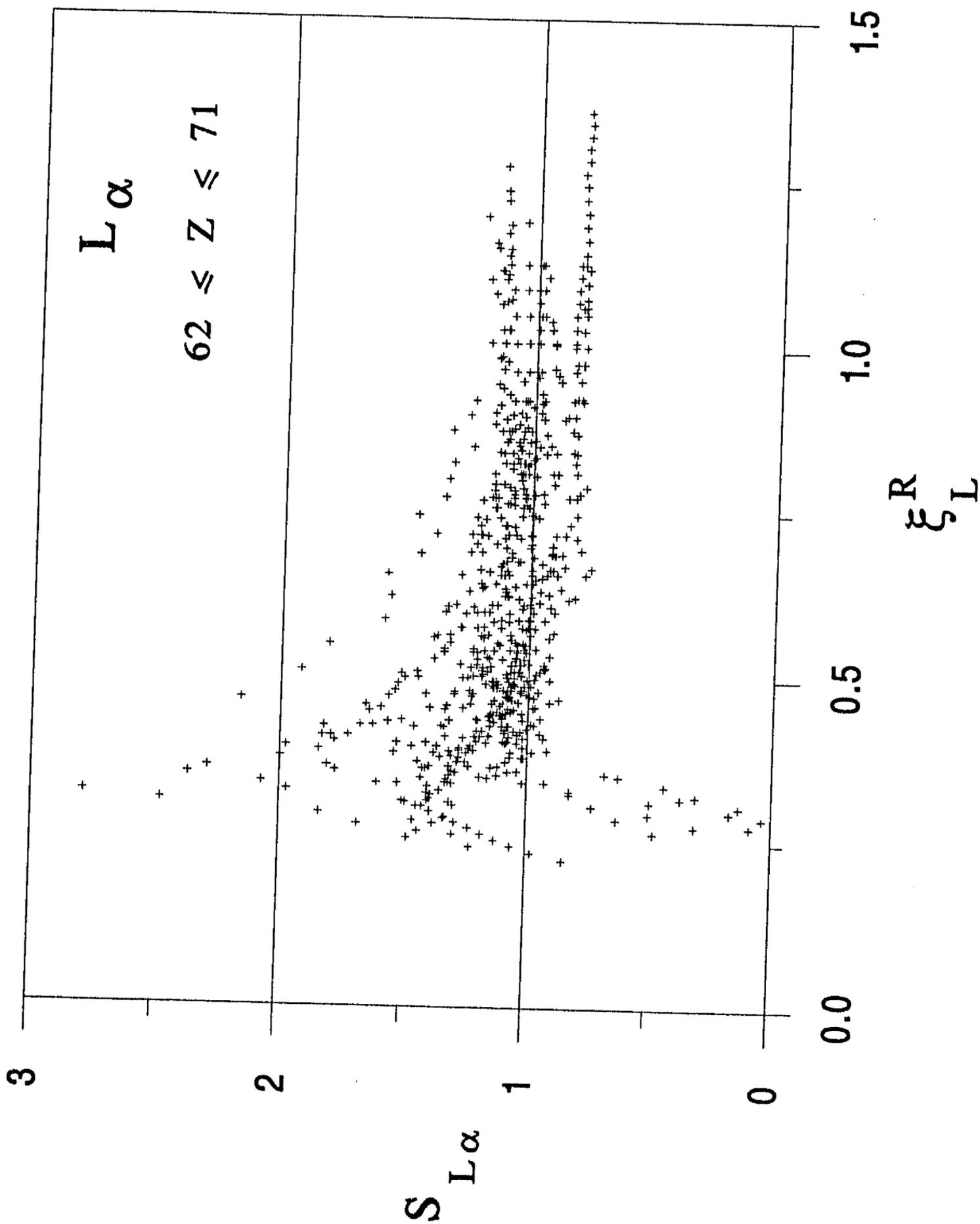


Figura 4.34 Cocientes  $S_{L\alpha}$  de las secciones eficaces de producción de rayos X  $L\alpha$  contenidas en la compilación de datos para elementos con  $72 \leq Z \leq 92$ , entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_L^R$ .

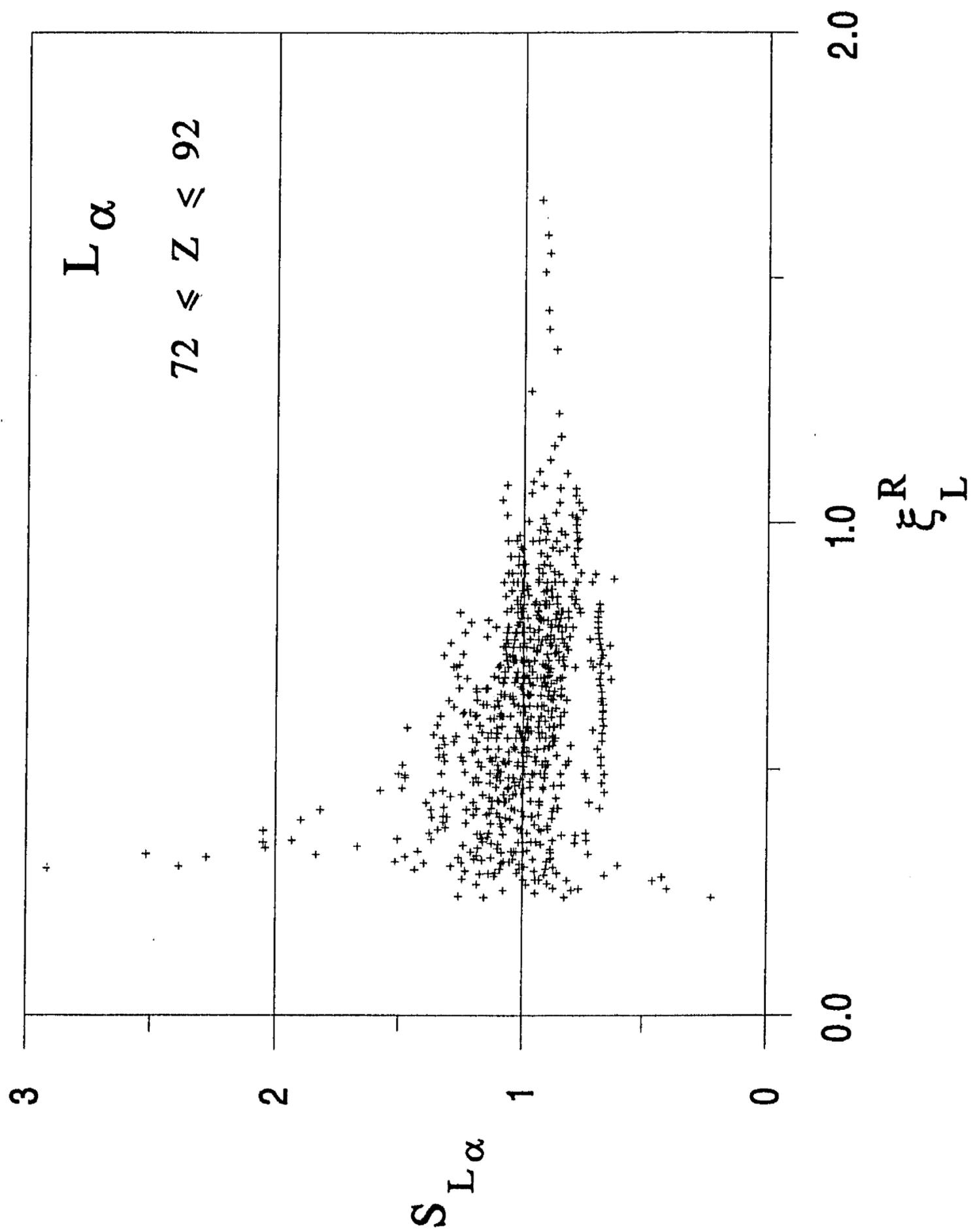


Tabla 4.2 Compilación de secciones de ionización de capas L por incidencia de protones.

Referencia	Tipo	Intervalo de $Z_2$	Intervalo de Energía [MeV]	Número de Medidas	$\epsilon^r(\%)$
BRAJ92	AE	57-68	0.175-4	221 (115)	5-14
BUDM84	AE	71-92	0.57-0.7	17 (17)	12-23
COHD80	BS	79-80	1-3	44	11-23
COHD84	BS	66-90	1-3	55	20
CUZP85	AE	48-52	0.35-2	48 (30)	4-31
JUSE80	AE	72-77	0.5-2.5	57 (15)	8-13
KROA82	A	45-51	0.09-0.74	67 (67)	8-24
LEIC77	AE	81-92	0.5-3.0	31 (5)	8-18
LIUZ89	CE	66-67	0.35-2.5	39 (21)	20
MOHH87	BE	64-82	0.22-0.44	15 (15)	7-11
PERE90	AE	56-60	0.25-4.6	113 (60)	6-15
PINA82	M	79	0.5-4	19 (5)	9-17
RODL93	AE	52-71	0.38-0.72	96 (96)	9-11
SARL80	AE	79	2	2	15-19
SOKR86		66-70	1-3	22	3-10
VIGM91	AE	62-70	0.25-1.8	136 (95)	4-5
WHER79		59-70	0.15-0.4	36 (36)	15-20

En la Tabla 4.3 también se dan las referencias correspondientes a cada clave de la Tabla 4.2.

En las figuras 4.35 a 4.37 se muestran los cocientes  $S$  de las secciones de ionización de cada una de las subcapas  $L_3$ ,  $L_2$  y  $L_1$  respectivamente, obtenidas de la compilación, entre su respectiva predicción a partir de la teoría ECPSSR. De estas figuras 4.35 y 4.36 se observa que las secciones de ionización de las subcapas  $L_2$  y  $L_3$  para los valores de  $\xi_{L_i}^R > 0.9$  la ECPSSR predice correctamente las secciones de ionización. En cambio, para  $\xi_{L_i}^R < 0.9$  las predicciones subestiman la sección de ionización, pues las medidas resultan ser en promedio mayores. La situación se complica para  $\xi_{L_i}^R < 0.4$  en donde los valores medidos se dispersan considerablemente sin poder obtener conclusiones definitivas sobre el comportamiento de las secciones de ionización de capas L. De la Figura 4.37, se

Tabla 4.3 Referencias correspondiente a cada clave de las Tablas 4.1 y 4.2

Código	Referencia
AVAL84	L. Avaldi, I. V. Michell, H. L. Eschbach y W. Dobma, J. Phys. B <b>17</b> (1984) 2851.
BEAR73	R. C. Bearse, D. A. Close, J. J. Malanify y J. C. Umbarger, Phys. Rev. A <b>7</b> (1973) 1269.
BHAD80	D. Bhattacharga, S. K. Battacherjee y S. K. Mitra, J. Phys. B <b>13</b> (1980) 967.
BRAJ84	J. Braziewicz, M. Pajek, E. Braziewicz, J. Ploskonka y G. M. Osteynski, J. Phys. B <b>17</b> (1984) 1589.
BRAJ92	J. Braziewicz, E. Braziewicz, M. Pajek, T. Czyzewski, L. Glowacka, M. Jaskola, A. P. Kobzev, and W. Kretschmer, Raport SINS 2129/I, Soltan Institute for Nuclear Studies, Poland, 1992.
BUDM84	M. Budnar, V. Cindro, M. Kregar, M. Ravnikar, V. Ramzak y Z. Smit, Nucl. Instr. and Meth. B <b>3</b> (1984) 39.
COHD80	D.D. Cohen, J. Phys. B <b>13</b> (1980) 2953.
COHD84	D. D. Cohen, Nucl. Instr. and Meth. B <b>3</b> (1984) 47.
CUZP85	P. Cuzzocrea, E. Perillo, E. Rosato, G. Spadacini y M. Vigilante, J. Phys. B <b>18</b> (1985) 711.
FASS82	S. Fast, J. L. Flinner, A. Glick, F. W. Inman, L. Oolman, C. Pearson y D. Wickelgren, Phys. Rev. A <b>26</b> (1982) 2417.
HARM84	M. F. Harrigan, B. M. Spicer y D. D. Cohen, Aust. J. Phys. <b>37</b> (1984) 475.
ISHK74	K. Ishii, S. Morita, H. Tawara, H. Kaji y T. Shiokawa, Phys. Rev. A <b>10</b> (1974) 774.
JESA85	A. P. Jesus, J. S. Lopez y J. P. Ribeiro, J. Phys. B <b>18</b> (1985) 2453.
JESA86	A. P. Jesus, T. M. Pinheiro, J. A. Niza, J. P. Ribeiro y J. S. Lopes, Nucl. Instr. and Meth. B <b>15</b> (1986) 595.
JESA87	A. P. Jesus, J. P. Ribeiro y J. S. Lopes. J. Phys. B <b>20</b> (1987) 95. A. P. Jesus, J. P. Ribeiro y J. S. Lopes, J. de Physique, C9 (1987) 235.
JUSE80	E. L. B. Justiniano, A. A. G. Naderm, N. V. de Castri Faria, C. V. Barros Leite y A. G. Pinho, Phys. Rev. A <b>21</b> (1980) 73.
KADA90	A. Kadom-Al-Neami, A. Al-Neami, M. Bordas, J. Lacher y C. Heitz, Int. J. PIXE <b>1</b> (1990) 63.
KHAR78	M. R. Khan, A. G. Hopkins y D. Crumpton. Z. Phys. A <b>288</b> (1978) 133.
KROA82	A. Kropf. Tesis Doctoral, Universidad de Linz, "Johannes Kepler," Vienna, 1982.
LEIC77	C. V. Barros Leite, N. V. de Castro y A. G. Pinho, Phys. Rev. A <b>15</b> (1977) 943.

Tabla 4.3 (Continuación)

Código	Referencia
LIER73	R. B. Liebert, T. Zabel, D. Miljanic, H. Larson V. Valkovic and G. C. Philips. Phys. Rev. A <b>8</b> (1973) 2336.
LIUZ89	Z. Liu, X. Cai, S. Ma, J. Liu, J. Feng, S. Liu, and Z. Zheng, Nucl. Instr. and Meth. B <b>43</b> (1989) 162, y comunicación privada.
MILM76	M. Molazzo y G. Riccobono. Phys. Rev. A <b>13</b> (1976) 578.
MOHH85	H. Moheb, R. Bigauette y F. W. Inman. Phys. Rev. A <b>32</b> (1985) 3739.
MOHH87	H. Mohan, P. S. Singh, D. Singh, H. R. Verma y C. S. Khurana, J. Phys. B <b>20</b> (1987) 5355. H. Mohan, P. S. Singh, D. Singh, H. R. Verma y C. S. Khurana, Nucl. Instr. and Meth. B <b>26</b> (1987) 507.
PERE90	E. Perillo, P. Cuzzocrea, N. De Cesare, F. Murolo, G. Spadaccini, and M. Vigilante, Nucl. Instr. and Meth. A <b>299</b> (1990) 399.
PINA82	Comunicación privada en R. S. Sokhi y D. Crumpton, At. Data and Nucl. Data Tables <b>30</b> (1984) 49.
RAYL81	L. A. Rayburn. IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-28 (1981) 1109, y comunicación privada.
RAYL83	L. A. Rayburn. IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-30 (1983) 964.
RAYL89	Comunicación privada.
RODL93	El presente trabajo.
SARL80	L. Sarkadi y T. Mukoyama. J. Phys. B <b>13</b> (1980) 2255.
SARW81	W. Sarter, H. Mommsen, M. Sarkar, P. Schurkes y A. Weller. J. Phys. B <b>14</b> (1981) 2843.
SOKR81	R. S. Sokhi y D. Crumpton. Nucl. Instr. and Meth. <b>181</b> (1981) 5.
SOKR82	R. S. Sokhi y D. Crumpton. Nucl. Instr. and Meth. <b>192</b> (1982) 121.
SOKR86	R. S. Sokhi y D. Crumpton. J. Phys. B <b>19</b> (1986) 4193.
SOKR88	
TAWH74	H. Tawara, K. Ishii, S. Morita, H. Kaji, C. N. Hsu y T. Shiokawa. Phys. Rev. A <b>9</b> (1974) 1617.
TAWH75	H. Tawara, K. Ishii, S. Morita, H. Kaji y T. Shiokawa. Phys. Rev. A <b>11</b> (1975) 1560.
UDEN81	N. V. Udeh, J. J. Chmielewski, J. L. Flinner, F. W. Inmman y B. Sollenberger, Phys. Rev. A <b>24</b> (1981) 1746.
VIGM88	M. Vigilante, P. Cuzzocrea, N. de Cesare, E. Perillo y G. Spadaccini, Nulc. Instr. and Meth. B <b>33</b> (1988) 256.

Tabla 4.3 (Continuación)

Código	Referencia
VIGM90	M. Vigilante, P. Cuzzocrea, N. de Cesare, F. Murolo, E. Perillo and G. Spadaccini. Nucl. Instr. and Meth. B 51 (1990) 232.
VIGM91	M. Vigilante, P. Cuzzocrea, N. De Cesare, F. Murolo, E. Perillo, and G. Spadaccini, J. Phys B 24 (1991) 2521.
WHER79	R. Wheeler, R. P. Chaturvedi y S. Amey. IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-26 (1979) 1166.

observa que los valores experimentales de las secciones de ionización de la subcapa  $L_1$  para  $\xi_{L_1}^R > 0.6$  son mayores en promedio que las predicciones teóricas en 35%. Para valores de  $0.4 < \xi_{L_1}^R < 0.6$  los datos en promedio son más cercanos a la unidad, pero existe gran dispersión en algunos. Finalmente para  $\xi_{L_1}^R < 0.4$  la dispersión aumenta considerablemente de tal manera que tampoco es posible determinar el comportamiento de estas secciones de ionización.

#### 4.4 AJUSTES SEMIEMPIRICOS

Como se pudo concluir de la sección anterior, el comportamiento de las secciones eficaces de producción de rayos X y ionización de las capas atómicas L por incidencia de protones no está bien comprendido hasta el momento, especialmente en la región de bajas energías de incidencia. Además, debido a la necesidad de poder contar con cierta exactitud en estas secciones para poderse aplicar en la técnica de análisis PIXE, se propuso efectuar un ajuste semiempírico a los valores experimentales de estas secciones. Para lograr esto, se siguió el método propuesto por Paul y Muhr [PAUL86] empleado en el estudio de las secciones correspondientes a la capa atómica K.

El procedimiento consiste primeramente en tomar las secciones eficaces normalizadas con la ECPSSR. Esto es, se toman todos los cocientes  $S_j$ , Ec. (4.1) para cada una de las medidas que se tienen en la compilación, de cada sección eficaz. Después, se procede a dividir a las  $\xi_L^R$  en intervalos iguales de  $\log_{10} \xi_L^R$ . Luego para todos los cocientes S en cada

Figura 4.35 Cocientes  $S_{L_3}$  de las secciones eficaces de ionización de la subcapa  $L_3$  contenidas en la compilación de datos, entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_{L_3}^R$ .

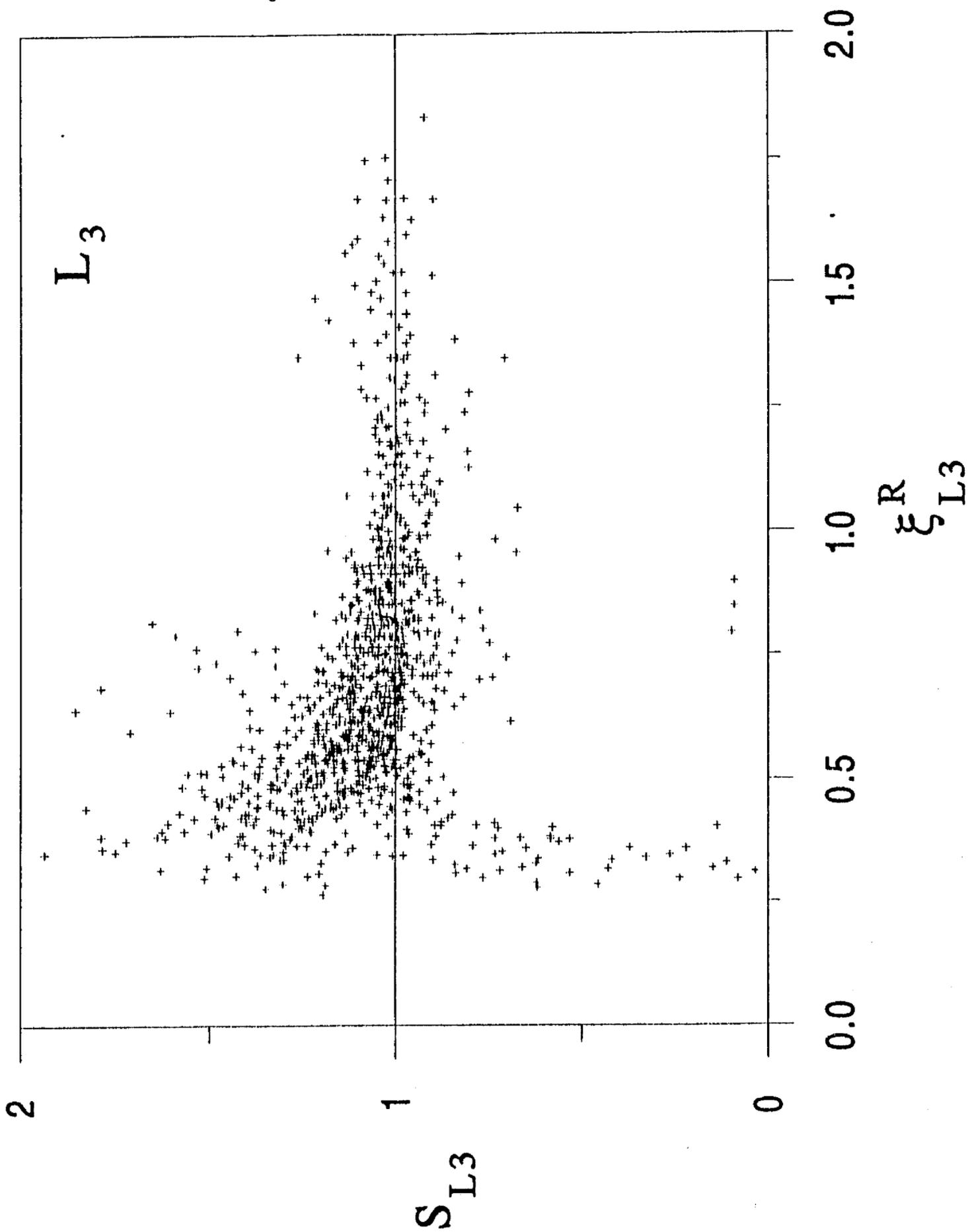


Figura 4.36 Cocientes  $S_{L_2}$  de las secciones eficaces de ionización de la subcapa  $L_2$  contenidas en la compilación de datos, entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_{L_2}^R$ .

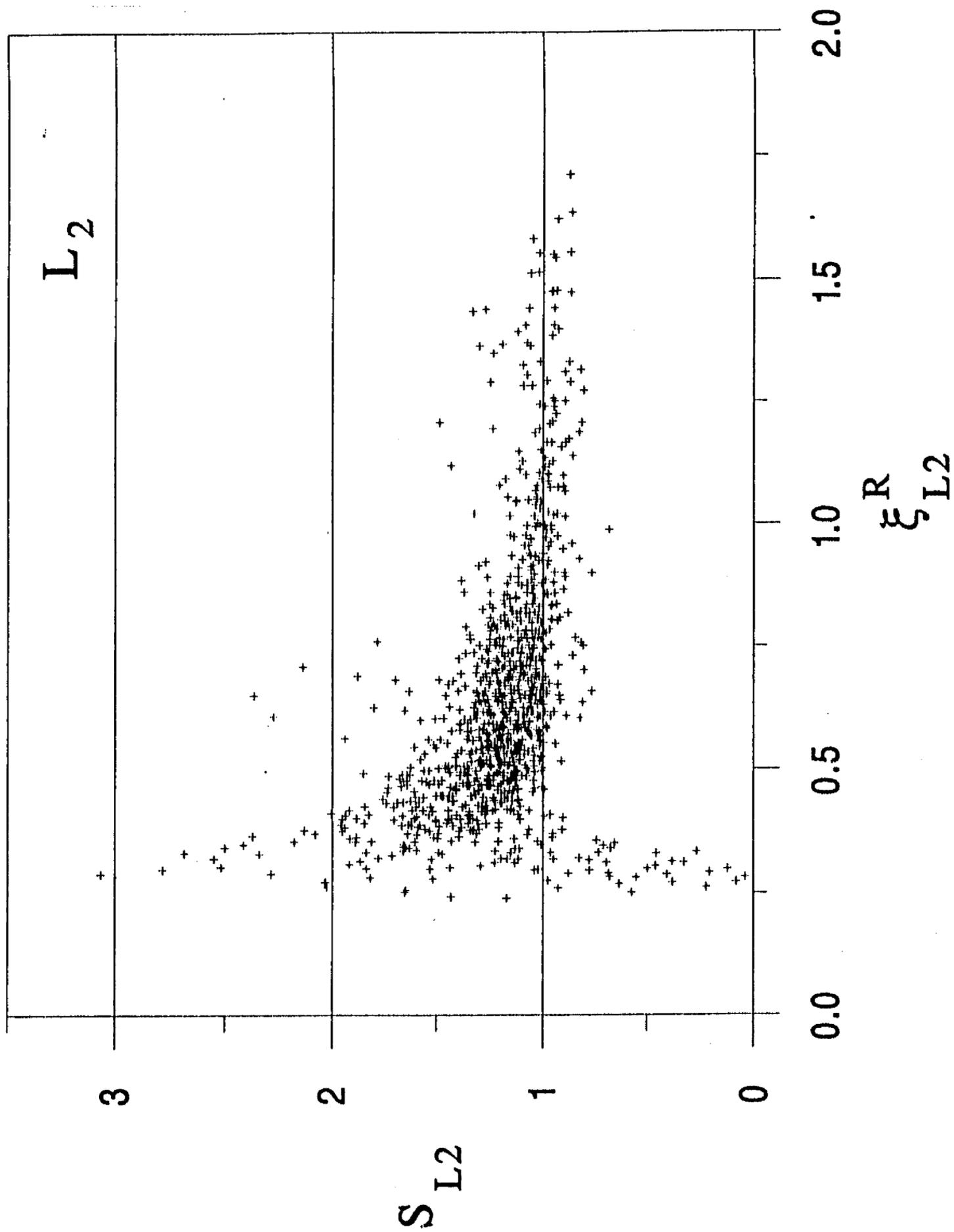
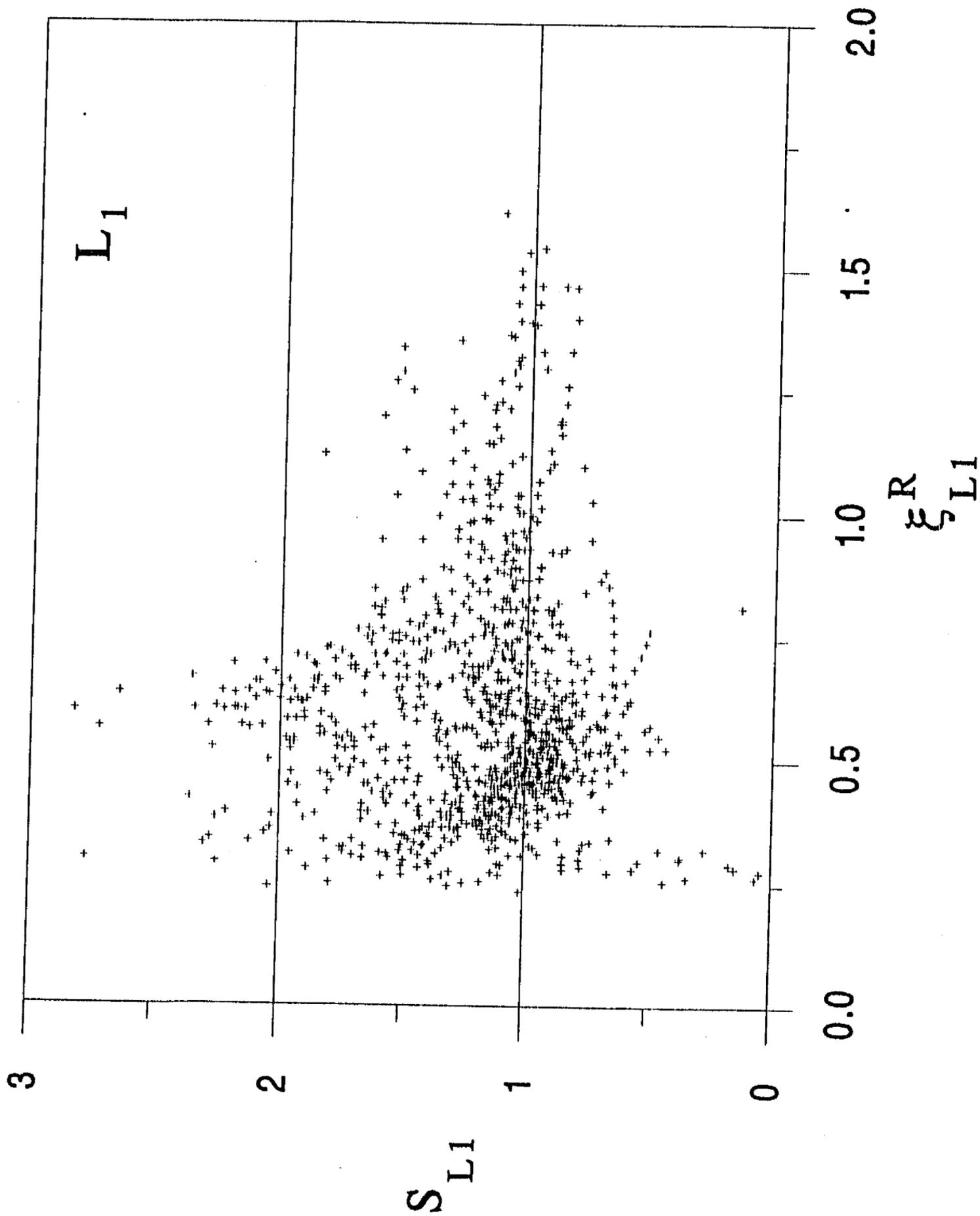


Figura 4.37 Cocientes  $S_{L1}$  de las secciones eficaces de ionización de la subcapa  $L_1$  contenidas en la compilación de datos, entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_{L1}^R$ .



intervalo  $\Delta \log_{10} \xi_L^R$  se obtiene su valor promedio pesado  $\bar{S}$ , definido como:

$$\bar{S} = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{S_i}{\varepsilon_i^2}}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{\varepsilon_i^2}} \quad (4.4)$$

donde  $n$  es el número de datos en cada intervalo y  $\varepsilon_i$  es el error relativo de cada uno de los cocientes  $S_i$ . De esta manera, a cada intervalo le corresponderá un sólo punto que estará dado por el cociente promedio  $\bar{S}$ . El error relativo para cada valor promedio se determina a partir de:

$$\delta = \left( \frac{\sum_{i=1}^n \frac{(S_i - \bar{S})^2}{\varepsilon_i^2}}{(n-1) \sum_{i=1}^n \frac{1}{\varepsilon_i^2}} \right)^{1/2} \quad (4.5)$$

En este trabajo se tomaron los intervalos  $\Delta \log_{10} \xi_L^R = 0.05$  con la finalidad de dividir en un número razonable de intervalos.

Con la finalidad de que estos valores promedio  $\bar{S}$  no se vean muy afectados por puntos muy dispersos, que podrían considerarse como irrelevantes, se determinó el residual de student  $R_i$  para todos los puntos de cada intervalo, dado como:

$$R_i = \frac{n(S_i - \bar{S})}{(n-1)\delta}, \quad (4.6)$$

donde  $S_i$  es el  $i$ -ésimo cociente experimental de cada intervalo y  $\bar{S}$  el cociente promedio del intervalo. Este residual fue utilizado para identificar los puntos que pudieran considerarse como irrelevantes en el cálculo del promedio  $\bar{S}$ . Entonces arbitrariamente se consideró que los puntos que tuviesen un valor de  $|R_i| > 20$  serían descartados. Así sin tomar en cuenta estos puntos en cada intervalo se procede a calcular nuevamente los valores promedio  $\bar{S}$ , que llamaremos "corregidos".

Una vez determinados todos los valores corregidos de  $\bar{S}$  de cada sección eficaz  $j$ , ya sea de producción de rayos  $X L_\alpha$  o de ionización, se procedió a ajustarles un polinomio por medio de mínimos cuadrados lineales. Generalmente este polinomio fue de cuarto grado

con excepción para la sección de ionización de  $L_1$ . De esta manera, se tiene el ajuste a los valores promedio corregidos  $\bar{S}$ , dado como:

$$g_j(\bar{S}, y) = A_0 + A_1y + A_2y^2 + A_3y^3 + A_4y^4, \quad (4.7)$$

en donde  $y = \log_{10} \xi_L^R$ . Entonces, a partir de este ajuste semiempírico será posible determinar predicciones para la sección eficaz  $j$  más reales que las que se obtienen directamente de la teoría. Así, este valor semiempírico  $\sigma_j^{emp}$  de la sección eficaz  $j$  correspondiente a una velocidad reducida  $\xi_L^R$  estará dado por:

$$\sigma_j^{emp} = g_j(\bar{S}, y) \sigma_j^{ECPSSR}. \quad (4.8)$$

En la Figura 4.38 se muestran los valores de  $\bar{S}$  para la sección de producción de rayos X  $L_\alpha$ , antes y después de ser corregidos por el criterio del residual considerado. En este caso fueron descartados un total de 312 puntos. Se observa de esta figura que los valores de  $\bar{S}$  para  $\log_{10} \xi_L^R \geq -0.6$  muestran un comportamiento suave y continuo sin mostrar grandes saltos. En cambio, los dos puntos en la región de más baja energía muestran no seguir el mismo comportamiento analítico de los demás puntos. La razón de esto se debe a la pequeña cantidad de datos experimentales en estos intervalos y además a la dispersión tan grande que presentan, lo que ocasiona que los valores de  $\bar{S}$  en estos intervalos no sean los adecuados. La línea continua en la misma figura muestra el ajuste semiempírico  $g_{L_\alpha}$  del polinomio de cuarto grado. En la Tabla 4.4 se muestran los valores de los coeficientes del polinomio ajustado.

En la figura 4.9b se muestra el cociente de las secciones de producción de  $L_\alpha$  medidas en este trabajo, normalizadas con el ajuste semiempírico obtenido. Puede verse que hay una mejoría en la predicción de estas secciones con el ajuste en comparación con la ECPSSR (Fig. 4.9a). El error promedio ahora es del 5% a diferencia del 12% que se tenía antes, pero aun así, la dispersión aun es grande y los valores medidos continúan siendo mayores a las predicciones.

En las figuras 4.39 a 4.41 se muestran los valores de los cocientes promedio  $\bar{S}$  antes y después de ser corregidos, para las secciones de ionización  $L_3$ ,  $L_2$  y  $L_1$  respectivamente. De las figuras 4.39 y 4.40 se observa que estos cocientes también siguen un comportamiento

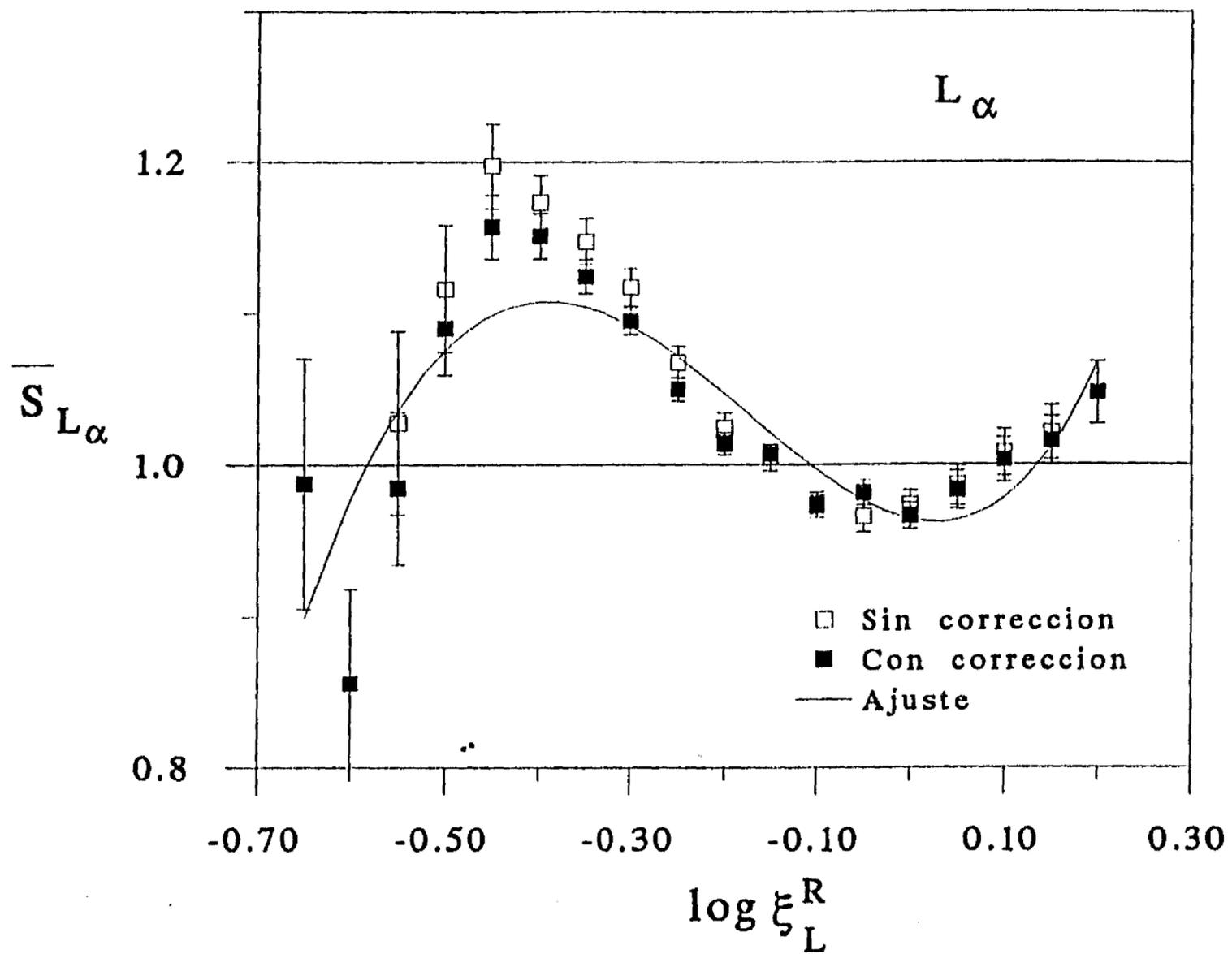


Figura 4.38 Cocientes promedio  $\bar{S}_{L\alpha}$  de las secciones eficaces de producción de rayos X  $L_\alpha$  contenidas en la compilación de datos, entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_L^R$ . Se muestran los cocientes promedio antes y después de ser corregidos estadísticamente. Por medio de una línea continua se muestra el ajuste del polinomio de cuarto grado a los promedios corregidos.

Tabla 4.4 Valores de los coeficientes correspondientes a los polinomios ajustados a los cocientes  $\bar{S}$  para cada sección eficaz.

Coefficiente	Sección $L_\alpha$	Sección $L_3$	Sección $L_2$	Sección $L_1$ Ajuste 1	Sección $L_1$ Ajuste 2
$A_0$	0.9645	0.9617	0.9832	1.0496	1.0174
$A_1$	-0.1371	0.1589	-0.0511	-1.1942	-0.7359
$A_2$	2.2854	2.3967	0.8490	4.0160	15.642
$A_3$	4.7330	-4.249	-9.8762	48.513	62.839
$A_4$	1.0046	-14.072	-15.725	-32.192	-454.79
$A_5$	-	-	-	-518.82	-2650.7
$A_6$	-	-	-	-600.61	-4413.8
$A_7$	-	-	-	-	-2369.8

suave y continuo con excepción de los dos primeros puntos en la región de más baja energía, que presentan saltos con respecto a los otros puntos. La causa de esto es análoga a la descrita antes para la sección de  $L_\alpha$ . Por medio de una línea continua se muestran los polinomios  $g_{L_3}$  y  $g_{L_2}$  ajustados a estos puntos y en la Tabla 4.4 se dan sus respectivos coeficientes. Con estos ajustes mejoran bastante las predicciones de las secciones de ionización.

Por otro lado, para el caso de la sección de ionización de  $L_1$ , mostrado en la Figura 4.41, se encuentra que los valores de  $\bar{S}$  presentan también, con la excepción de los dos primeros puntos, un comportamiento continuo y suave, pero más complicado que los anteriores. Esto anterior, debido a que los promedios presentan una forma oscilatoria. El ajuste de un polinomio resultó complicado de llevar a cabo en este caso pues con polinomios de grado menor o igual que cinco no se llegaba a reproducir siquiera el comportamiento oscilatorio y mostraban una divergencia enorme para la mayoría de los puntos. Por este motivo se tuvo que recurrir en primera instancia a uno de grado seis. Este ajuste resultó ser bueno, pero debido a que el punto extremo de la derecha era el resultado del promedio de tres puntos solamente, se decidió efectuar un segundo ajuste que no tomara en cuenta este punto. El segundo ajuste también fue difícil de conseguir y se recurrió a un polinomio de

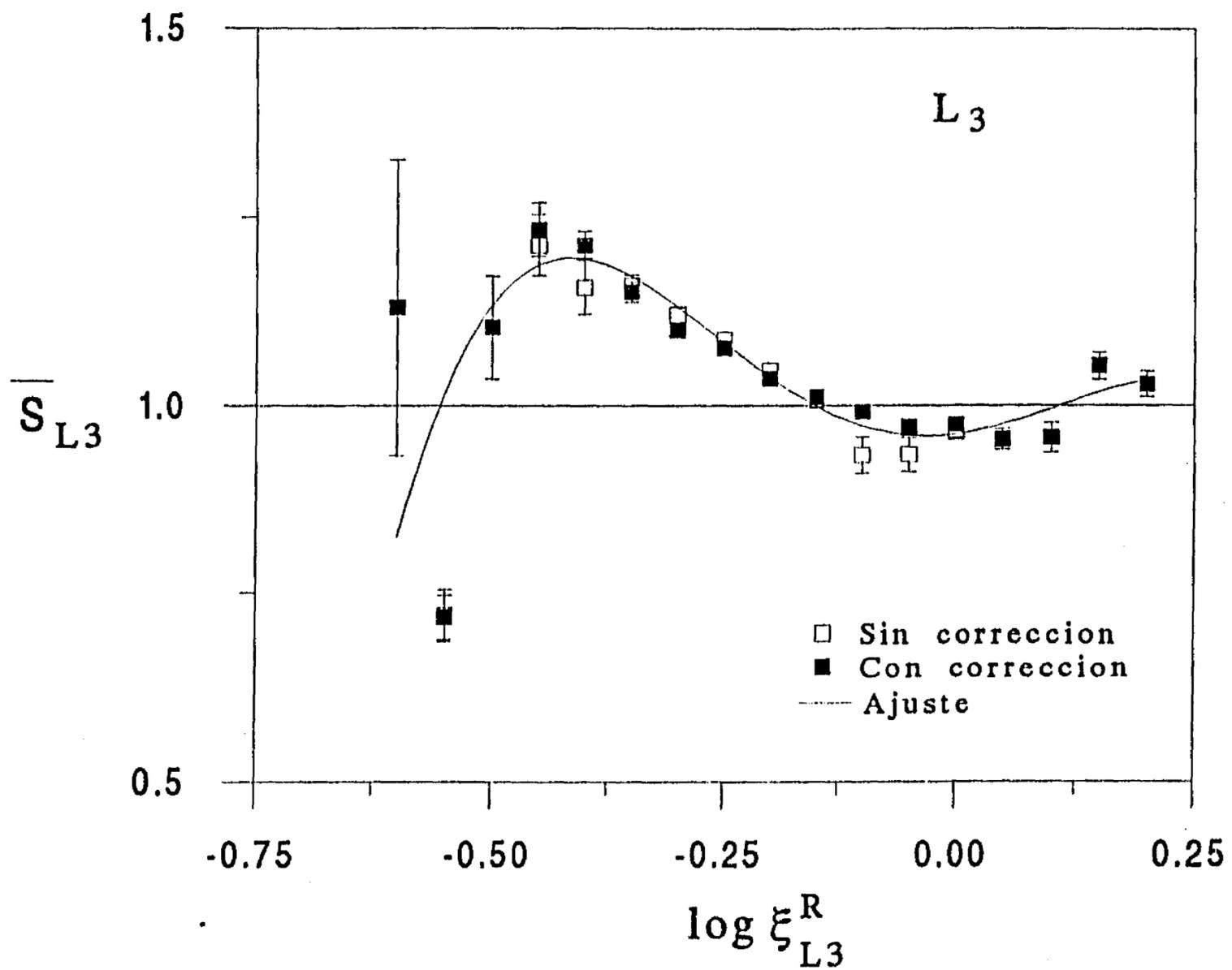


Figura 4.39 Cocientes promedio  $\bar{S}_{L_3}$  de las secciones eficaces de ionización de la subcapa  $L_3$  contenidas en la compilación de datos, entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_{L_3}^R$ . Se muestran los cocientes promedio antes y después de ser corregidos estadísticamente. Por medio de una línea continua se muestra el ajuste del polinomio de cuarto grado a los promedios corregidos.

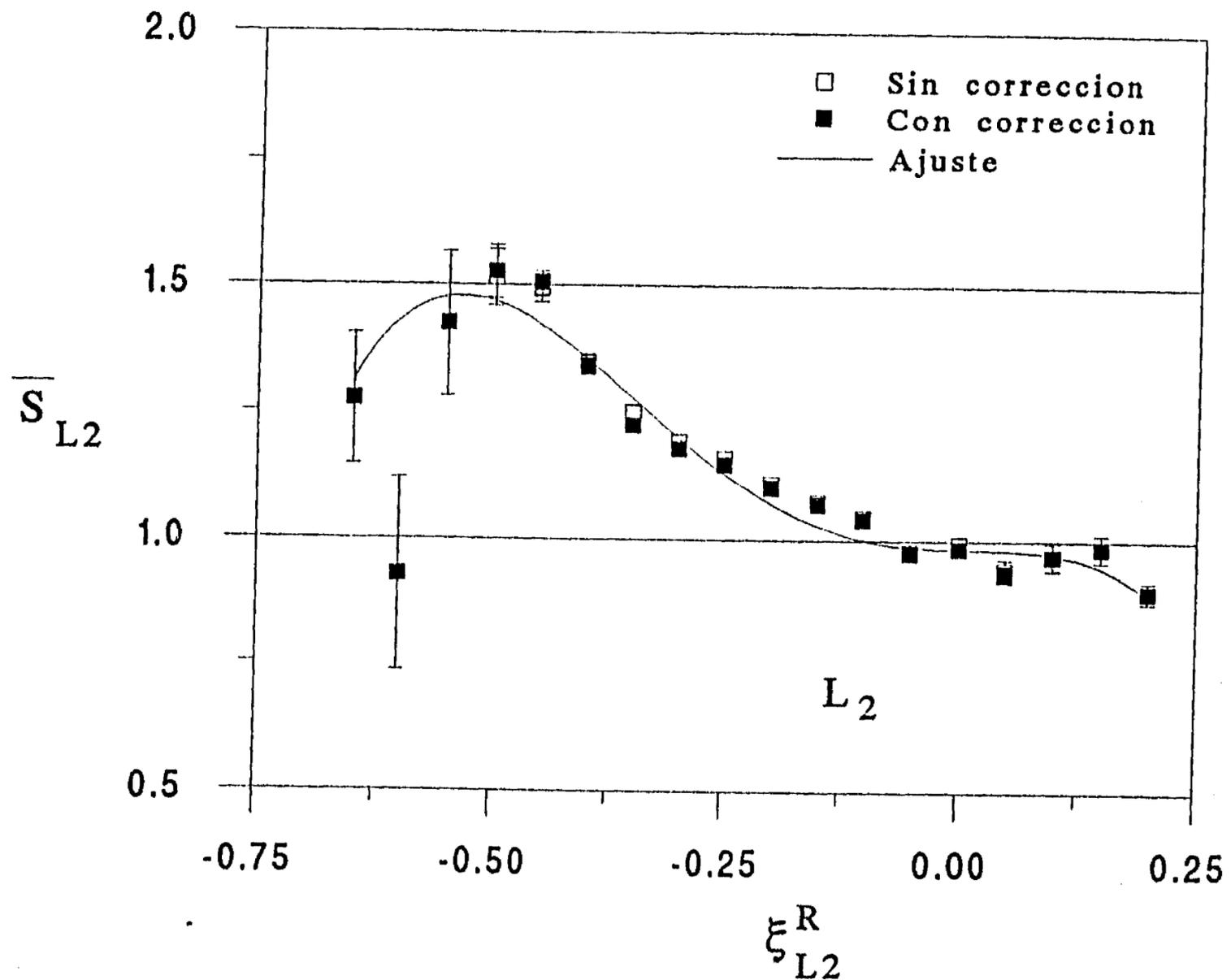


Figura 4.40 Cocientes promedio  $\bar{S}_{L_2}$  de las secciones eficaces de ionización de la subcapa  $L_2$  contenidas en la compilación de datos, entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_{L_2}^R$ . Se muestran los cocientes promedio antes y después de ser corregidos estadísticamente. Por medio de una línea continua se muestra el ajuste del polinomio de cuarto grado a los promedios corregidos.

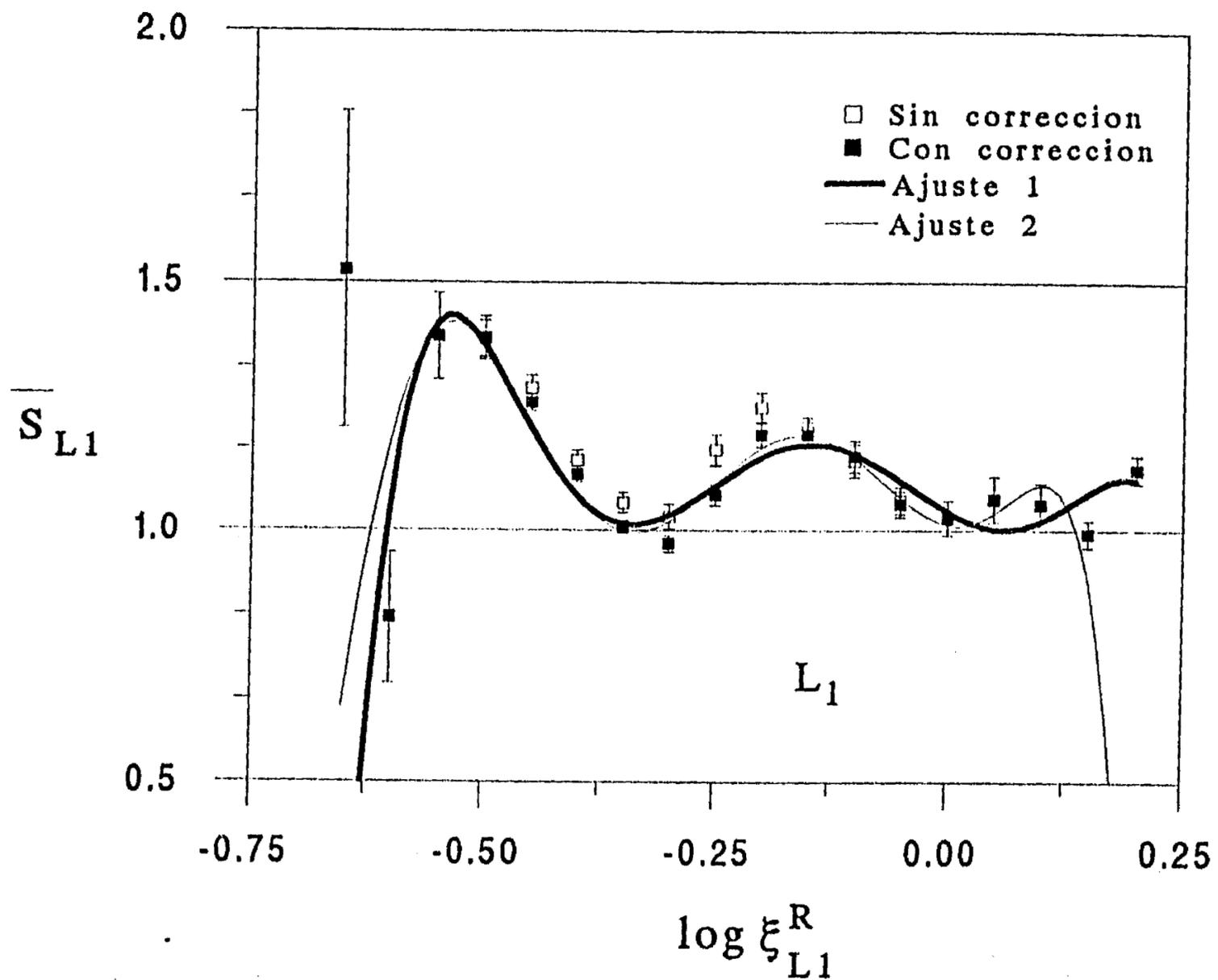


Figura 4.41 Cocientes promedio  $\bar{S}_1$  de las secciones eficaces de ionización de la subcapa  $L_1$  contenidas en la compilación de datos, entre las predicciones del modelo ECPSSR, en función de la velocidad reducida  $\xi_{L_1}^R$ . Se muestran los cocientes promedio antes y después de ser corregidos estadísticamente. Por medio de una línea continua gruesa se muestra el ajuste del polinomio de sexto grado a los promedios corregidos. Con una línea delgada se muestra el ajuste del polinomio de grado séptimo a los promedios corregidos excluyendo el punto de la extrema derecha.

grado siete. Este segundo ajuste resultó ser mejor que el primero en la región de los puntos de la derecha. En la Figura 4.41 se muestran estos dos ajustes a  $g_{L1}$  con líneas continuas y en la Tabla 4.4 se dan los coeficientes obtenidos para cada uno de estos dos.

Todos los ajustes semiempíricos efectuados contribuyen mejorando las predicciones de estas secciones eficaces, pero aun así continúan presentándose problemas en la región de baja energía de incidencia de los protones.

## CAPITULO V

### CONCLUSIONES

En este trabajo se midieron experimentalmente secciones eficaces de producción de rayos X y de ionización de las capas atómicas L por incidencia de protones, empleando blancos delgados. De esta manera, se contribuyó a aumentar el número existente de estas medidas, especialmente a bajas energías, donde como se ha podido determinar, es la región donde más se requieren de éstas para poder sacar conclusiones acerca del comportamiento de estas secciones.

Los resultados obtenidos fueron consistentes en la gran mayoría de los casos con los valores reportados por otros autores, dentro del intervalo de incertidumbre, o bien, del mismo orden de magnitud.

Comparando las medidas obtenidas de las secciones de producción de rayos X L, se observa que estas son mayores en promedio que las predichas por el modelo teórico ECPSSR, excepto para la  $L_{\gamma 2,3}$ . Los resultados de las otras secciones que presentaron una menor dispersión con respecto a este modelo fueron la  $L_{\alpha}$ ,  $L_{\beta 2}$  y  $L_1$ , las cuales involucran la producción de una vacancia en la capa  $L_3$ . La dispersión promedio que presentaron éstas con respecto a la ECPSSR fue de entre 12 y 14%. Las secciones de  $L_{\beta 1,3,4}$  y  $L_{\gamma 1}$  fueron las que presentaron las mayores dispersiones con respecto a la ECPSSR, siendo del orden de 19 a 22%. Se aquí se observa que las secciones de producción de rayos X que involucran una vacancia en una determinada subcapa atómica, presentan dispersiones similares.

De la compilación de medidas efectuadas para la sección de producción  $L_{\alpha}$ , tanto reportadas en este trabajo y como por otros autores, se observa un aumento en el valor de estas secciones a medida que disminuye la velocidad relativa  $\xi_L^R$ . Gran dispersión se presenta en estas medidas cuando  $\xi_L^R < 0.3$ . Esto es en general, cuando tenemos energías de incidencia menores de 300 keV y elementos con número atómico mayor que 50.

El ajuste semiempírico efectuado a las secciones de producción de rayos X  $L_{\alpha}$ , nos da mejores predicciones que la ECPSSR. Pero este ajuste presenta problemas a bajas energías en la misma región que se ha indicado antes, pues en ésta, la dispersión en las medidas

efectuadas hasta el momento no permite concluir nada en concreto sobre el comportamiento de esta sección eficaz.

En la obtención de las secciones de ionización de capas L a partir de las de producción de rayos X medidas, se pudo constatar la sensibilidad que presenta la selección del método y del conjunto de parámetros atómicos (coeficientes Coster-Kronig y probabilidades de emisión radiativa) empleados en su determinación. En esta determinación de las secciones de ionización, la subcapa  $L_3$  resultó ser la menos sensible al método y conjunto de parámetros atómicos, en tanto que la de  $L_1$  fue la más sensible. Esto anterior puede deberse al hecho de que en el cálculo de los diversos parámetros atómicos asociados con la subcapa  $L_1$ , la forma de la función de onda que se utilice juega un papel dominante. Esto es, como la función de onda del estado  $2S_{1/2}$  presenta un nodo, los cambios y la forma en cómo se considere la caída y la curvatura en la función de onda que se utilice van a provocar cambios en el cálculo de estos parámetros. Por otro lado, para las otras funciones de onda de los otros dos niveles, como no presentan un nodo su caída es más suave y los cambios en ésta no afectan seriamente el cálculo de otras variables atómicas. De esta manera se encuentra necesario en la determinación teórica de los parámetros atómicos, emplear modelos que permitan obtener o utilizar funciones de onda lo más reales posibles para la subcapa  $L_1$ . Además se requiere de más estudios experimentales de los diversos parámetros atómicos involucrados con estas secciones, para así poder comprobar la validez de las predicciones teóricas y poder obtener nuevos ajustes semiempíricos de éstos.

Los resultados de las secciones de ionización de capas L que se obtuvieron más consistentes con la ECPSSR, son los que se determinaron utilizando el método de Datz *et al.* [DATS74] y las emisiones radiativas de Scofield [SCOJ74]. Además, este método es el que se encuentra más utilizado en literatura por otros autores. Estos resultados para las secciones de  $L_2$  y  $L_3$  fueron en promedio mayores que las predicciones de la ECPSSR. Las dispersiones promedio para estos dos casos fueron respectivamente de de 20 y 11% más grandes. Los resultados para la sección  $L_1$  presentaron una dispersion de un 20%, pero en este caso en torno a la predicción de la ECPSSR.

El uso de otros métodos para la determinación de las secciones de ionización de las capas L presentaron en varios casos como resultado valores negativos. La presencia de

estos resultados irreales al usar estos métodos ocasiona que sean menos confiables y por tanto menos convenientes de utilizar. Una revisión cuidadosa de estos métodos nos señala a los parámetros atómicos como los primeros responsables de esto. En segundo lugar y en grado menor que antes, se deben a la forma en como se efectúe la deconvolución de los espectros para las líneas de emisión de  $L_\beta$  y  $L_\gamma$ .

De la compilación de medidas efectuadas para las secciones eficaces de ionización de las subcapas L, se encuentra que la teoría ECPSSR subestima la magnitud de esta sección, ya que la mayor parte de las medidas realizadas es mayor que la predicción teórica. Se observa también, que a medida que disminuye la velocidad reducida  $\xi_{L_i}^R$ , aumenta el valor de estas secciones de ionización. Para valores de  $\xi_{L_i}^R < 0.4$  la dispersión en los resultados reportados es grande y contradictoria, de tal manera que tampoco permite determinar con claridad la tendencia que siguen estas secciones. Esto es en general cuando se tienen energías de menos de 400 keV en elementos atómicos con número atómico mayor que 50

Los ajustes semiempíricos efectuados a estas secciones nos permiten tener mejores predicciones de ellas. De esta manera, el empleo de estos ajustes en las aplicaciones de la técnica PIXE resultan convenientes, pues aumentan la exactitud del método cuando se tengan que emplear líneas de emisión L. Pero aun así, debido a la poca cantidad de medidas con las que se cuenta ( $\approx 2000$ ) para las secciones de producción de rayos X  $L_\alpha$  y también para las de ionización de cada subcapa L ( $\approx 1000$ ), aun resulta difícil poder determinar secciones eficaces de referencia confiables.

Estos efectos que se han observado a bajas energías de incidencia pone de manifiesto la mayor complejidad de las capas atómicas L en comparación con las K. Así, a pesar de haber contribuido con más medidas para estas secciones eficaces, se requiere entonces de más estudios experimentales de estas secciones, especialmente a bajas energías (menores de 1 MeV).

También se encuentra necesario modificar los modelos teóricos o agregarles correcciones que permitan explicar el aumento en el valor de estas secciones eficaces. Las correcciones que se han presentado hasta el momento para la ECPSSR, como la MECPSSR y UA-ECPSSR, requieren de la determinación de parámetros semiempíricos a partir de

los datos experimentales, especialmente a bajas energías de incidencia. El inconveniente de estas correcciones es que el cálculo de las secciones eficaces no es directo como con la ECPSSR, porque se requiere de estos parámetros semiempíricos característicos de cada elemento. Entonces se requieren de más medidas para cada elemento, que permitan determinar estos parámetros en forma exacta.

## APENDICE A

En este apéndice se muestra la equivalencia entre las secciones de ionización utilizando la PWBA y la SCA cuando es calculada utilizando una línea recta. Esto es lo mismo que decir que la PWBA y la SCA son equivalentes a altas energías de incidencia de los iones.

Inicialmente utilizando la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo se tiene que la probabilidad de que en la colisión entre un ion y un electrón se produzca un cambio en el estado  $n_0$  de un electrón al estado  $n$ , viene expresada por la EC. (2.38) como:

$$P_{n_0 n} = \frac{1}{\hbar} \left| Z_1 e^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi_{n_0}(\mathbf{r}) \frac{e^{i\omega t}}{|\mathbf{R}(t) - \mathbf{r}|} d^3 r dt \right|^2. \quad (A1)$$

Expresando el potencial de interacción coulombiana entre el ion y el electrón en la representación de Fourier como:

$$\frac{1}{|\mathbf{R}(t) - \mathbf{r}|} = \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R})}}{q^2} d^3 q, \quad (A2)$$

se obtiene que:

$$\begin{aligned} P_{n_0 n} &= \frac{1}{\hbar} \left| \frac{Z_1 e^2}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int \int \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi_{n_0}(\mathbf{r}) \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R})}}{q^2} d^3 r d^3 q dt \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar} \left| \frac{Z_1 e^2}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int F_{nn_0}(q) \frac{e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}}}{q^2} e^{i\omega t} d^3 q dt \right|^2, \end{aligned} \quad (A3)$$

donde  $F_{nn_0}(q)$  es equivalente al factor de forma de la Ec. (2.14) para un sólo electrón. Considerando una trayectoria en línea recta dada como:

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{b} + vt\hat{z}, \quad (A4)$$

donde  $\mathbf{b}$  es un vector perpendicular a  $\hat{z}$  y que tiene la misma magnitud que el parámetro de impacto de la colisión entre el ion y el electrón. Entonces tenemos que la integral con respecto al tiempo se expresa como:

$$I(\omega, q) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}(t)} dt = 2\pi e^{q_{\perp} b} \delta(\omega - q_z v), \quad (A5)$$

donde  $q^2 = q_{\perp}^2 + q_z^2$  y en la cual  $q_{\perp}$  es la componente perpendicular de  $q$  al eje  $z$ . Sustituyendo la Ec. (A5) en la (A3) e integrando con respecto a  $q_z$  queda:

$$P_{nn_0} = \frac{1}{\hbar} \left| \frac{Z_1 e^2}{\pi} \int F(q_{\perp}, \frac{\omega}{v}) \frac{e^{i\mathbf{q}_{\perp} \cdot \mathbf{b}}}{q_{\perp}^2 + \left(\frac{\omega}{v}\right)^2} d^2 q_{\perp} \right|^2. \quad (A6)$$

Luego la sección eficaz total de la transición del estado electrónico  $n_0$  al  $n$  está dada a partir de la suma de las probabilidades anteriores sobre todos los posibles vectores  $\mathbf{b}$ , que representan al parámetro de impacto, como:

$$\sigma_{nn_0} = \int |P_{nn_0}|^2 d^2b. \quad (A7)$$

En este desarrollo que estamos efectuando es conveniente el uso del teorema de Parseval [BOAS83]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |G(k)|^2 dk, \quad (A8)$$

donde  $G(k)$  es la transformada de Fourier de  $g(x)$ . Entonces aplicando este teorema en la Ec (A7), para el caso de una transformada de Fourier bidimensional, tenemos que:

$$\sigma_{nn_0} = \frac{Z_1^2 e^4}{\hbar \pi^2 v^2} \int \left| \int F_{nn_0}(q_{\perp}, \frac{\omega}{v}) \frac{e^{i\mathbf{q}_{\perp} \cdot \mathbf{b}}}{q_{\perp}^2 + \left(\frac{\omega}{v}\right)^2} d^2q_{\perp} \right|^2 d^2b = \int |G(\mathbf{b})|^2 d^2b, \quad (A9)$$

y se puede escribir entonces como:

$$\sigma_{nn_0} = \frac{4Z_1 e^4}{\hbar v^2} \int |F_{nn_0}(q_{\perp}, \frac{\omega}{v})|^2 \frac{d^2q_{\perp}}{\left[ q_{\perp}^2 + \left(\frac{\omega}{v}\right)^2 \right]^2}. \quad (A10)$$

Entonces integrando en coordenadas polares, la sección para una transferencia de energía  $\omega = \epsilon/\hbar$  queda como:

$$d\sigma_{\epsilon s} = 8\pi \left( \frac{Z_1 e^2}{\hbar v} \right)^2 \int_{\epsilon/\hbar v}^{\infty} |F_{\epsilon s}(q)|^2 \frac{dq}{q^3} d\epsilon. \quad (A11)$$

Esta ecuación multiplicada por el número de electrones en cada nivel atómico, es análoga a la integral sobre  $q$  de la Ec. (2.17), por lo cual la SCA calculada con una trayectoria recta es equivalente a la PWBA.

## APENDICE B

En este apéndice se muestra un ejemplo sobre como calcular una sección de ionización utilizando el modelo teórico ECPSSR. Supongamos que se desea conocer la sección eficaz de ionización para las subcapas L de oro ( $Z_2 = 79$ ,  $m_2 = 197$  uma), al ser bombardeado con helio ( $Z_1 = 2$ ,  $m_1 = 4$  uma) a una energía de  $E_1 = 80$  MeV. Las energías de ligadura en el oro para los electrones en las capas  $L_1$ ,  $L_2$  y  $L_3$  son respectivamente de 14.35, 13.73 y 11.92 keV. Luego utilizando unidades atómicas tenemos que la carga nuclear efectiva es  $Z_{2L} = 79 - 4.15 = 74.85$ ;  $a_{2L} = 4/74.85 = 0.05344$ ;  $v_{2L} = 74.85/2 = 37.425$  y  $8\pi a_0^2 = 7.04 \times 10^8$  barns. El argumento del factor de deflexión coulombiana se expresa como:

$$\pi dq_{0Li} = \pi \frac{Z_1 Z_2 Z_{2L} \theta_{Li}}{2E_1 8v_1}. \quad (B1)$$

En la Tabla B1 se muestran los cálculos para cada subcapa L, indicando las ecuaciones o referencias que es necesario utilizar en cada caso, para determinar las secciones de ionización.

TABLA B1

Cantidad	$L_1$	$L_2$	$L_3$	Ecuación
$\theta_{Li}$	0.735	0.721	0.625	Ec. (2.1)
$\xi_{Li}$	2.02	2.11	2.43	Ec. (2.2)
$m_{Li}^R(\xi_{Li})$	1.030	1.021	1.019	Ec. (2.79)
$(m_{Li}^R)^{1/2} \xi_{Li} \equiv X$	2.05	2.13	2.45	Ec. (2.80)
$F_{Li}(X, \theta_{Li})$	0.840	0.799	0.906	Ec. (2.23) y Ref. [SMIT89]
$\sigma_{Li}^{PWBAR}$ [barns]	$1.60 \times 10^3$	$1.59 \times 10^3$	$4.16 \times 10^3$	Ecs. (2.23) y (2.80)
$g_{Li}$	0.328	0.177	0.137	Ecs. (2.61) y (2.62)
$h_{Li}$	0.037	0.088	0.110	Ec. (2.66)
$g_{L-i} - h_{Li}$	0.291	0.089	0.027	
$\zeta_{Li}$	1.021	1.007	1.002	Ec. (2.70)
$\xi_{Li}/\zeta_{Li}$	1.98	2.10	2.43	
$m_{Li}^R(\xi_{Li}/\zeta_{Li})$	1.031	1.022	1.019	Ec. (2.79)
$\xi_{Li}^R/\zeta_{Li}$	2.01	2.12	2.45	
$\zeta_{Li} \theta_{Li}$	0.769	0.726	0.626	
$F_{Li}(\xi_{Li}^R/\zeta_{Li}, \zeta_{Li} \theta_{Li})$	0.831	0.794	0.906	Ec. (2.23) y Ref. [SMIT89]
$\sigma_{Li}^{PSSR}$ [barns]	$1.55 \times 10^3$	$1.57 \times 10^3$	$4.15 \times 10^3$	
$\pi dq_{0Li} \zeta_{Li}$	0.002	0.002	0.001	Ec. (B1)
$C_{Li}(\pi dq_{0Li} \zeta_{Li})$	0.998	0.998	0.999	Ec. (2.75)
$\sigma_{Li}^{CPSSR}$ [barns]	$1.55 \times 10^3$	$1.57 \times 10^3$	$4.15 \times 10^3$	Ec. (2.81)

## APENDICE C

En este apéndice se muestran las medidas obtenidas en este trabajo para las secciones eficaces de producción de rayos X L.

### SECCIONES DE RAYOS X L INDUCIDAS CON PROTONES (barns)

TELURIO Z=52						
ENERGIA (keV)	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 1	Lg 23	Li
732	3.82E+01	1.57E+01	5.02E+00	1.88E+00	3.72E-01	1.75E+00
	10%	10%	10%	11%	11%	11%
678	3.05E+01	1.21E+01	4.00E+00	1.49E+00	2.52E-01	1.33E+00
	10%	10%	10%	10%	11%	11%
621	3.07E+01	1.20E+01	3.93E+00	1.45E+00	2.19E-01	1.31E+00
	11%	11%	11%	12%	13%	13%
552	1.76E+01	6.77E+00	2.32E+00	8.48E-01	1.08E-01	7.37E-01
	10%	10%	11%	12%	13%	13%
504	1.52E+01	5.74E+00	2.02E+00	7.31E-01	8.49E-02	6.43E-01
	10%	10%	10%	11%	12%	12%
435	1.41E+01	5.46E+00	1.91E+00	6.84E-01	9.50E-02	5.84E-01
	10%	10%	11%	11%	12%	13%
380	1.00E+01	3.83E+00	1.26E+00	4.40E-01	6.43E-02	4.17E-01
	10%	10%	11%	12%	13%	12%

CESIO Z=55						
ENERGIA (keV)	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 1	Lg 23	Li
711	2.38E+01	9.33E+00	3.66E+00	1.29E+00	1.70E-01	8.68E-01
	10%	10%	11%	11%	13%	11%
659	1.64E+01	6.34E+00	2.49E+00	8.94E-01	1.04E-01	6.36E-01
	10%	10%	11%	12%	13%	12%
609	1.77E+01	6.62E+00	2.58E+00	9.14E-01	9.65E-02	7.18E-01
	10%	11%	12%	13%	14%	14%
577	1.32E+01	4.82E+00	1.92E+00	6.42E-01	6.46E-02	5.83E-01
	10%	10%	11%	11%	12%	11%
500	7.99E+00	3.03E+00	1.21E+00	4.19E-01	4.67E-02	2.68E-01
	10%	10%	10%	11%	11%	12%
438	5.17E+00	2.03E+00	8.09E-01	2.68E-01	4.27E-02	1.44E-01
	10%	11%	12%	12%	13%	12%
382	3.63E+00	1.45E+00	5.51E-01	1.86E-01	3.68E-02	1.11E-01
	10%	11%	11%	12%	13%	13%

SECCIONES DE RAYOS X L INDUCIDAS CON PROTONES (barns)

BARIO Z=56

ENERGIA (keV)	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 1	Lg 234	Li
707	2.30E+01 10%	9.13E+00 10%	3.76E+00 10%	1.40E+00 10%	1.83E-01 11%	9.80E-01 11%
664	1.10E+01 10%	4.21E+00 10%	1.76E+00 10%	6.38E-01 10%	7.01E-02 10%	4.00E-01 11%
627	1.33E+01 10%	5.28E+00 10%	2.17E+00 11%	7.44E-01 11%	9.71E-02 11%	4.24E-01 12%
567	8.99E+00 10%	3.47E+00 10%	1.46E+00 10%	5.18E-01 10%	6.00E-02 10%	3.23E-01 11%
499	8.30E+00 10%	3.15E+00 10%	1.29E+00 10%	4.73E-01 10%	6.50E-02 11%	3.09E-01 11%
428	4.92E+00 10%	1.91E+00 10%	7.83E-01 10%	2.72E-01 10%	4.75E-02 10%	1.83E-01 11%
380	4.19E+00 10%	1.65E+00 10%	6.53E-01 10%	2.30E-01 11%	5.37E-02 11%	1.59E-01 11%

LANTANO Z=57

ENERGIA (keV)	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 1	Lg 234	Li
723	1.92E+01 9%	7.41E+00 10%	3.11E+00 10%	1.11E+00 10%	1.53E-01 11%	7.57E-01 10%
669	1.46E+01 10%	5.53E+00 10%	2.39E+00 10%	8.17E-01 10%	1.23E-01 11%	5.39E-01 11%
620	1.44E+01 10%	5.04E+00 10%	3.73E+00 11%	1.01E+00 11%	8.03E-02 11%	4.67E-01 11%
576	9.21E+00 10%	3.50E+00 10%	1.52E+00 10%	5.33E-01 10%	6.82E-02 11%	3.47E-01 10%
500	6.63E+00 10%	2.52E+00 10%	1.11E+00 10%	3.90E-01 10%	6.23E-02 10%	2.72E-01 11%
438	4.53E+00 9%	1.74E+00 10%	7.17E-01 10%	2.47E-01 10%	5.10E-02 11%	1.76E-01 11%
382	3.33E+00 9%	1.32E+00 10%	5.32E-01 10%	1.85E-01 10%	5.12E-02 11%	1.16E-01 10%

SECCIONES DE RAYOS X L INDUCIDAS CON PROTONES (barns)

CERIO Z=58

ENERGIA (keV)	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 1	Lg 23	Ll
730	1.66E+01 10%	6.34E+00 10%	2.71E+00 10%	9.91E-01 10%	9.37E-02 10%	3.59E-01 10%
676	1.34E+01 10%	5.05E+00 10%	2.20E+00 10%	7.88E-01 10%	7.67E-02 11%	4.59E-01 11%
620	1.21E+01 10%	4.49E+00 10%	1.94E+00 10%	6.91E-01 10%	6.27E-02 11%	4.41E-01 10%
548	7.95E+00 10%	2.97E+00 10%	1.29E+00 10%	4.58E-01 10%	5.22E-02 11%	2.74E-01 10%
503	5.85E+00 10%	2.19E+00 10%	9.60E-01 10%	3.36E-01 10%	4.31E-02 11%	2.05E-01 11%
434	4.31E+00 10%	1.67E+00 10%	7.03E-01 10%	2.45E-01 10%	4.80E-02 11%	1.63E-01 11%
380	3.17E+00 10%	1.27E+00 10%	5.18E-01 10%	1.72E-01 10%	4.33E-02 11%	1.06E-01 11%
380	3.27E+00 10%	1.30E+00 10%	5.31E-01 10%	1.80E-01 10%	4.30E-02 11%	1.18E-01 11%

PRASEODIMIO Z=59

ENERGIA (keV)	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 1	Lg 23	Ll
723	1.43E+01 11%	5.42E+00 12%	2.33E+00 12%	8.42E-01 14%	8.85E-02 15%	5.75E-01 14%
676	1.27E+01 11%	4.73E+00 12%	2.07E+00 12%	7.37E-01 14%	7.06E-02 15%	4.67E-01 14%
630	1.02E+01 12%	3.86E+00 13%	1.67E+00 14%	6.01E-01 15%	6.42E-02 16%	3.82E-01 15%

SECCIONES DE RAYOS X L INDUCIDAS CON PROTONES (barns)

NEODIMIO		Z=60				
ENERGIA	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 1	Lg 234	Li
(keV)						
707	1.29E+01	4.77E+00	2.04E+00	7.21E-01	7.37E-02	4.94E-01
	8%	8%	8%	8%	9%	9%
664	9.03E+00	3.37E+00	1.49E+00	5.32E-01	5.53E-02	3.56E-01
	8%	8%	8%	8%	9%	9%
628	8.25E+00	3.06E+00	1.37E+00	4.70E-01	5.22E-02	2.86E-01
	8%	8%	8%	8%	8%	8%
567	5.93E+00	2.19E+00	9.84E-01	3.38E-01	4.89E-02	2.37E-01
	8%	8%	8%	8%	9%	9%
498	4.31E+00	1.64E+00	7.16E-01	2.44E-01	4.53E-02	1.63E-01
	8%	8%	8%	9%	9%	9%
429	2.55E+00	1.00E+00	4.17E-01	1.45E-01	3.45E-02	9.38E-02
	8%	8%	9%	9%	10%	10%
381	1.96E+00	7.86E-01	3.16E-01	1.06E-01	3.55E-02	6.74E-02
	8%	8%	8%	8%	9%	9%

SAMARIO		Z=62				
ENERGIA	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 1	Lg 23	Li
(keV)						
724	1.07E+01	3.99E+00	1.76E+00	6.41E-01	5.51E-02	4.42E-01
	11%	12%	12%	13%	14%	12%
622	6.78E+00	2.52E+00	1.10E+00	3.76E-01	3.58E-02	2.53E-01
	11%	12%	12%	13%	15%	12%
576	4.76E+00	1.79E+00	7.82E-01	2.68E-01	3.61E-02	1.98E-01
	12%	13%	13%	14%	16%	14%
501	3.20E+00	1.23E+00	5.30E-01	1.83E-01	4.07E-02	1.26E-01
	11%	12%	12%	13%	15%	13%
434	2.23E+00	8.97E-01	3.76E-01	1.33E-01	3.89E-02	9.23E-02
	12%	13%	13%	14%	16%	14%

EUROPIO		Z=63				
ENERGIA	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 15	Lg 234	Li
(keV)						
708	7.29E+00	2.63E+00	1.20E+00	3.93E-01	3.00E-02	3.12E-01
	11%	11%	12%	13%	15%	12%

SECCIONES DE RAYOS X L INDUCIDAS CON PROTONES (barns)

GADOLINIO Z=64

ENERGIA (keV)	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 1	Lg 234	Ll
676	7.71E+00 8%	2.84E+00 8%	1.32E+00 9%	4.48E-01 9%	8.76E-02 10%	3.26E-01 9%
630	5.61E+00 8%	2.08E+00 8%	9.30E-01 8%	3.17E-01 9%	6.98E-02 10%	2.46E-01 8%
567	3.93E+00 8%	1.49E+00 8%	6.71E-01 8%	2.22E-01 8%	6.36E-02 9%	1.77E-01 8%
567	4.09E+00 8%	1.56E+00 8%	7.04E-01 9%	2.33E-01 9%	6.58E-02 10%	1.87E-01 9%

DYSPROSIO Z=66

ENERGIA (keV)	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 1	Lg 234	Ll
681	4.89E+00 8%	1.78E+00 8%	8.58E-01 8%	2.89E-01 9%	5.05E-02 10%	2.47E-01 9%
640	3.97E+00 8%	1.45E+00 8%	6.71E-01 8%	2.31E-01 8%	4.81E-02 9%	1.85E-01 9%
610	3.04E+00 8%	1.14E+00 8%	5.26E-01 8%	1.78E-01 8%	3.80E-02 9%	1.40E-01 9%
534	2.17E+00 8%	8.26E-01 8%	3.67E-01 8%	1.27E-01 8%	3.92E-02 9%	1.01E-01 9%
534	2.26E+00 8%	8.62E-01 8%	3.94E-01 8%	1.33E-01 9%	3.83E-02 10%	1.12E-01 9%
476	1.38E+00 8%	5.57E-01 8%	2.32E-01 8%	8.15E-02 9%	2.88E-02 9%	6.29E-02 9%
419	8.65E-01 8%	3.66E-01 8%	1.44E-01 8%	5.08E-02 9%	2.35E-02 10%	3.45E-02 9%

SECCIONES DE RAYOS X L INDUCIDAS CON PROTONES (barns)

HOLMIO Z=67

ENERGIA (keV)	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 1	Lg 234	Li
679	4.63E+00 8%	1.66E+00 8%	8.16E-01 8%	2.69E-01 9%	5.16E-02 9%	2.23E-01 8%
640	3.09E+00 8%	1.12E+00 8%	5.43E-01 8%	1.72E-01 9%	4.23E-02 9%	1.48E-01 8%
609	2.91E+00 8%	1.08E+00 8%	5.06E-01 8%	1.65E-01 9%	3.41E-02 9%	1.56E-01 8%
571	2.28E+00 8%	8.58E-01 8%	4.06E-01 9%	1.35E-01 9%	4.00E-02 10%	1.13E-01 9%
534	1.83E+00 8%	6.96E-01 8%	3.20E-01 9%	1.03E-01 9%	3.31E-02 10%	9.08E-02 9%
476	1.26E+00 8%	5.14E-01 8%	2.15E-01 8%	7.53E-02 9%	2.63E-02 9%	6.33E-02 8%
420	8.38E-01 8%	3.45E-01 8%	1.49E-01 9%	4.71E-02 9%	2.28E-02 10%	3.70E-02 9%

ERBIO Z=68

ENERGIA (keV)	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 15	Lg 234	Li
681	3.57E+00 8%	1.33E+00 8%	6.34E-01 8%	2.14E-01 9%	5.03E-02 9%	1.57E-01 9%
640	2.85E+00 8%	1.05E+00 8%	4.99E-01 9%	1.80E-01 9%	4.03E-02 9%	1.34E-01 9%
610	2.72E+00 8%	1.01E+00 8%	4.79E-01 9%	1.61E-01 9%	4.73E-02 9%	1.24E-01 9%
571	2.09E+00 8%	8.06E-01 8%	3.77E-01 9%	1.36E-01 9%	4.09E-02 10%	9.94E-02 9%
533	1.47E+00 8%	5.75E-01 8%	2.62E-01 8%	8.91E-02 9%	2.93E-02 10%	6.60E-02 9%
476	1.18E+00 8%	4.77E-01 8%	2.01E-01 8%	6.83E-02 9%	3.21E-02 10%	5.39E-02 9%
410	6.16E-01 8%	2.64E-01 8%	1.09E-01 9%	3.74E-02 9%	2.09E-02 9%	3.03E-02 9%

SECCIONES DE RAYOS X L INDUCIDAS CON PROTONES (barns)

TULIO Z=69

ENERGIA (keV)	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 1	Lg 23	Li
680	3.72E+00 8%	1.37E+00 8%	6.56E-01 8%	2.42E-01 8%	4.96E-02 9%	1.75E-01 9%
640	2.37E+00 8%	8.86E-01 8%	4.19E-01 9%	1.48E-01 9%	3.56E-02 10%	1.21E-01 9%
610	2.53E+00 8%	9.78E-01 8%	4.48E-01 8%	1.51E-01 8%	4.29E-02 9%	1.20E-01 9%
571	1.73E+00 8%	6.81E-01 8%	3.09E-01 8%	1.02E-01 9%	3.55E-02 9%	8.67E-02 10%
533	1.37E+00 8%	5.30E-01 8%	2.38E-01 8%	8.16E-02 9%	3.74E-02 10%	6.83E-02 10%
476	9.08E-01 8%	3.71E-01 8%	1.57E-01 8%	5.46E-02 9%	2.61E-02 10%	4.53E-02 10%
410	5.62E-01 8%	2.43E-01 8%	1.02E-01 9%	3.19E-02 10%	1.95E-02 10%	2.84E-02 11%

YTERBIO Z=70

ENERGIA (keV)	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 15	Lg 234	Li
723	3.87E+00 11%	1.40E+00 12%	6.66E-01 12%	2.44E-01 13%	5.24E-02 14%	1.97E-01 14%
681	3.31E+00 12%	1.27E+00 12%	5.19E-01 12%	2.26E-01 14%	3.73E-02 15%	1.73E-01 16%
681	3.41E+00 11%	1.28E+00 12%	5.69E-01 13%	2.23E-01 13%	3.69E-02 15%	1.65E-01 14%
640	2.33E+00 11%	8.40E-01 12%	4.08E-01 12%	1.50E-01 13%	3.63E-02 14%	1.11E-01 14%
610	2.39E+04 11%	9.20E-01 11%	4.02E-01 12%	1.63E-01 12%	4.29E-02 14%	1.19E-01 15%
534	1.41E+00 11%	5.62E-01 12%	2.36E-01 12%	9.60E-02 13%	3.22E-02 15%	6.84E-02 14%
534	1.34E+00 12%	5.25E-01 12%	2.25E-01 14%	9.27E-02 15%	3.44E-02 16%	6.75E-02 16%

SECCIONES DE RAYOS X L INDUCIDAS CON PROTONES (barns)

LUTECIO	Z=71						
ENERGIA	La 12cta	Lb 1346	Lb 2,15	Lg 15	Lg 234	Ll	
(keV)							
681	2.81E+00 8%	1.05E+00 8%	4.88E-01 8%	1.57E-01 9%	5.37E-02 9%	1.24E-01 8%	
640	1.93E+00 8%	7.20E-01 8%	3.43E-01 8%	1.02E-01 9%	4.09E-02 9%	9.15E-02 8%	
610	1.51E+00 8%	5.69E-01 8%	2.80E-01 8%	8.77E-02 9%	3.07E-02 10%	7.18E-02 9%	
534	1.02E+00 8%	4.14E-01 8%	1.76E-01 8%	5.76E-02 90%	2.92E-02 10%	4.95E-02 9%	
476	6.62E-01 8%	2.76E-01 8%	1.23E-01 9%	3.18E-02 9%	2.45E-02 10%	3.47E-02 9%	

## APENDICE D

En este apéndice se muestran los resultados obtenidos en los cálculos de las secciones eficaces de ionización de capas atómicas L por incidencia de protones, utilizando los métodos de Datz *et al.* [DATS74] y Rayburn [RAYL83, RAYL85]. En ambos casos, junto con las emisiones radiativas de Scofield [SCOJ74] y las de Salem *et al.* [SALS74].

### SECCIONES DE IONIZACION DE CAPAS L POR INCIDENCIA DE PROTONES

		DATZ Y SCOFIELD 1974			DATZ Y SALEM 1974		
Elemento	Energía (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Telurio Z=52	732	5.11E+01	2.00E+02	5.63E+02	7.36E+01	2.18E+02	5.62E+02
	678	3.46E+01	1.60E+02	4.51E+02	4.98E+01	1.74E+02	4.51E+02
	621	3.00E+01	1.56E+02	4.57E+02	4.33E+01	1.71E+02	4.58E+02
	552	1.49E+01	9.18E+01	2.61E+02	2.15E+01	1.01E+02	2.62E+02
	504	1.17E+01	7.93E+01	2.26E+02	1.68E+01	8.71E+01	2.27E+02
	435	1.30E+01	7.39E+01	2.10E+02	1.88E+01	8.10E+01	2.10E+02
	380	8.83E+00	4.75E+01	1.50E+02	1.27E+01	5.20E+01	1.50E+02
Cesio Z=55	711	1.76E+01	1.03E+02	2.93E+02	2.69E+01	1.13E+02	2.93E+02
	659	1.07E+01	7.12E+01	2.03E+02	1.64E+01	7.85E+01	2.02E+02
	609	9.96E+00	7.30E+01	2.19E+02	1.53E+01	8.06E+01	2.19E+02
	577	6.67E+00	5.13E+01	1.64E+02	1.02E+01	5.67E+01	1.64E+02
	500	4.83E+00	3.34E+01	9.89E+01	7.39E+00	3.68E+01	9.89E+01
	438	4.40E+00	2.11E+01	6.37E+01	6.75E+00	2.32E+01	6.35E+01
	382	3.80E+00	1.45E+01	4.46E+01	5.83E+00	1.59E+01	4.43E+01
Bario Z=56	707	1.73E+01	1.01E+02	2.65E+02	2.69E+01	1.13E+02	2.64E+02
	664	6.63E+00	4.61E+01	1.27E+02	1.03E+01	5.18E+01	1.27E+02
	627	9.19E+00	5.34E+01	1.55E+02	1.43E+01	6.00E+01	1.54E+02
	567	5.68E+00	3.73E+01	1.05E+02	8.82E+00	4.20E+01	1.04E+02
	500	6.15E+00	3.39E+01	9.63E+01	9.55E+00	3.80E+01	9.58E+01
	428	4.50E+00	1.93E+01	5.70E+01	6.99E+00	2.16E+01	5.66E+01
	380	5.08E+00	1.61E+01	4.81E+01	7.90E+00	1.79E+01	4.76E+01

SECCIONES DE IONIZACION DE CAPAS L POR INCIDENCIA DE PROTONES

		DATZ Y SCOFIELD1974			DATZ Y SALEM 1974		
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Lantano Z=57	723	1.33E+01	7.20E+01	2.09E+02	2.10E+01	8.09E+01	2.07E+02
	669	1.08E+01	5.30E+01	1.59E+02	1.70E+01	5.95E+01	1.57E+02
	620	7.02E+00	6.66E+01	1.56E+02	1.10E+01	7.53E+01	1.55E+02
	576	5.97E+00	3.47E+01	1.00E+02	9.38E+00	3.91E+01	9.94E+01
	500	5.45E+00	2.52E+01	7.19E+01	8.56E+00	2.83E+01	7.10E+01
	438	4.46E+00	1.58E+01	4.91E+01	7.00E+00	1.76E+01	4.83E+01
	382	4.48E+00	1.16E+01	3.58E+01	7.04E+00	1.29E+01	3.50E+01
Cerio Z=58	730	7.85E+00	6.12E+01	1.70E+02	1.21E+01	6.72E+01	1.69E+02
	676	6.42E+00	4.86E+01	1.37E+02	9.88E+00	5.34E+01	1.36E+02
	620	5.25E+00	4.27E+01	1.24E+02	8.08E+00	4.69E+01	1.24E+02
	548	4.37E+00	2.82E+01	8.12E+01	6.72E+00	3.08E+01	8.09E+01
	503	3.61E+00	2.06E+01	5.96E+01	5.55E+00	2.25E+01	5.94E+01
	434	4.02E+00	1.48E+01	4.36E+01	6.18E+00	1.60E+01	4.32E+01
	380	3.63E+00	1.02E+01	3.19E+01	5.58E+00	1.10E+01	3.15E+01
	380	3.60E+00	1.07E+01	3.29E+01			
Prascodimio Z=59	723	7.02E+00	4.84E+01	1.38E+02	1.07E+01	5.24E+01	1.38E+02
	676	5.60E+00	4.25E+01	1.22E+02	8.53E+00	4.60E+01	1.22E+02
	630	5.09E+00	3.46E+01	9.87E+01	7.75E+00	3.74E+01	9.87E+01
Neodimio Z=60	707	5.55E+00	3.89E+01	1.18E+02	8.37E+00	4.15E+01	1.19E+02
	664	4.17E+00	2.86E+01	8.21E+01	6.29E+00	3.06E+01	8.27E+01
	628	3.93E+00	2.53E+01	7.50E+01	5.93E+00	2.70E+01	7.55E+01
	567	3.68E+00	1.80E+01	5.37E+01	5.55E+00	1.92E+01	5.39E+01
	498	3.41E+00	1.28E+01	3.89E+01	5.15E+00	1.36E+01	3.89E+01
	430	2.60E+00	7.53E+00	2.28E+01	3.92E+00	7.93E+00	2.27E+01
	381	2.67E+00	5.33E+00	1.74E+01	4.04E+00	5.54E+00	1.72E+01

SECCIONES DE IONIZACION DE CAPAS L POR INCIDENCIA DE PROTONES

		DATZ Y SCOFIELD 1974			DATZ Y SALEM 1974		
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Samario Z=62	724	3.41E+00	3.04E+01	8.79E+01	5.04E+00	3.21E+01	8.83E+01
	622	2.42E+00	1.77E+01	5.60E+01	3.58E+00	1.87E+01	5.63E+01
	576	2.38E+00	1.25E+01	3.91E+01	3.51E+00	1.31E+01	3.91E+01
	500	2.99E+00	8.28E+00	2.58E+01	4.40E+00	8.59E+00	2.57E+01
	434	2.77E+00	5.90E+00	1.78E+01	4.08E+00	6.07E+00	1.76E+01
Europio Z=63	708	1.92E+00	1.74E+01	5.73E+01	2.19E+00	1.83E+01	5.78E+01
Gadolinio Z=64	676	5.25E+00	1.86E+01	5.64E+01	4.97E+00	1.97E+01	5.69E+01
	630	4.19E+00	1.32E+01	4.09E+01	3.96E+00	1.39E+01	4.13E+01
	567	3.81E+00	8.95E+00	2.85E+01	3.61E+00	9.51E+00	2.87E+01
	567	3.94E+00	9.48E+00	2.96E+01	3.73E+00	1.01E+01	2.99E+01
Dysprosio Z=66	681	2.71E+00	1.03E+01	3.20E+01	2.50E+00	1.07E+01	3.23E+01
	640	2.59E+00	8.14E+00	2.59E+01	2.38E+00	8.45E+00	2.61E+01
	610	2.04E+00	6.29E+00	1.98E+01	1.88E+00	6.53E+00	2.00E+01
	534	2.11E+00	4.37E+00	1.40E+01	1.94E+00	4.56E+00	1.41E+01
	533	2.06E+00	4.58E+00	1.46E+01	1.89E+00	4.77E+00	1.47E+01
	476	1.55E+00	2.75E+00	8.81E+00	1.42E+00	2.88E+00	8.89E+00
	420	1.26E+00	1.66E+00	5.44E+00	1.16E+00	1.74E+00	5.50E+00
Holmio Z=67	679	2.63E+00	8.95E+00	2.91E+01	2.44E+00	9.23E+00	2.58E+01
	640	2.15E+00	5.64E+00	1.93E+01	2.00E+00	5.82E+00	1.71E+01
	610	1.73E+00	5.48E+00	1.83E+01	1.61E+00	5.65E+00	1.62E+01
	571	2.04E+00	4.36E+00	1.41E+01	1.89E+00	4.51E+00	1.25E+01
	534	1.68E+00	3.29E+00	1.13E+01	1.56E+00	3.40E+00	1.00E+01
	476	1.34E+00	2.39E+00	7.72E+00	1.24E+00	2.47E+00	6.84E+00
	420	1.16E+00	1.43E+00	5.06E+00	1.08E+00	1.49E+00	4.48E+00

SECCIONES DE IONIZACION DE CAPAS L POR INCIDENCIA DE PROTONES

		DATZ Y SCOFIELD 1974			DATZ Y SALEM 1974		
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Erbio Z=68	681	2.40E+00	6.62E+00	2.11E+01	2.19E+00	6.80E+00	2.12E+01
	640	1.93E+00	5.57E+00	1.68E+01	1.75E+00	5.72E+00	1.69E+01
	610	2.26E+00	4.89E+00	1.60E+01	2.06E+00	5.03E+00	1.61E+01
	571	1.96E+00	4.12E+00	1.21E+01	1.78E+00	4.24E+00	1.22E+01
	532	1.40E+00	2.68E+00	8.52E+00	1.27E+00	2.76E+00	8.58E+00
	476	1.53E+00	1.97E+00	6.76E+00	1.40E+00	2.03E+00	6.82E+00
	410	1.00E+00	1.04E+00	3.46E+00	9.11E-01	1.09E+00	3.49E+00
Tulio Z=69	680	2.24E+00	7.13E+00	2.10E+01	2.02E+00	7.27E+00	2.11E+01
	640	1.60E+00	4.31E+00	1.34E+01	1.45E+00	4.40E+00	1.34E+01
	610	1.94E+00	4.36E+00	1.42E+01	1.75E+00	4.46E+00	1.43E+01
	571	1.60E+00	2.87E+00	9.68E+00	1.44E+00	2.94E+00	9.72E+00
	533	1.69E+00	2.23E+00	7.53E+00	1.52E+00	2.30E+00	7.57E+00
	476	1.18E+00	1.48E+00	4.97E+00	1.06E+00	1.53E+00	5.00E+00
	410	8.80E-01	8.28E-01	3.04E+00	7.94E-01	8.57E-01	3.06E+00
Yterbio Z=70	723	2.24E+00	6.81E+00	2.10E+01	2.00E+00	6.91E+00	2.10E+01
	681	1.60E+00	6.39E+00	1.80E+01	1.43E+00	6.47E+00	1.80E+01
	681	1.58E+00	6.30E+00	1.86E+01	1.41E+00	6.38E+00	1.86E+01
	640	1.55E+00	4.16E+00	1.25E+01	1.39E+00	4.22E+00	1.25E+01
	610	1.83E+00	4.48E+00	1.28E+01	1.64E+00	4.56E+00	1.28E+01
	534	1.38E+00	2.58E+00	7.46E+00	1.31E+00	2.51E+00	7.06E+00
	534	1.47E+00	2.46E+00	7.04E+00	1.23E+00	2.63E+00	7.49E+00
Lutecio Z=71	681	2.13E+00	3.98E+00	1.45E+01	1.90E+00	4.06E+00	1.47E+01
	640	1.62E+00	2.53E+00	9.97E+00	1.45E+00	2.59E+00	1.01E+01
	610	1.22E+00	2.21E+00	7.75E+00	1.09E+00	2.26E+00	7.82E+00
	534	1.15E+00	1.39E+00	5.16E+00	1.03E+00	1.42E+00	5.22E+00
	476	9.71E-01	7.03E-01	3.31E+00	8.70E-01	7.29E-01	3.36E+00

SECCIONES DE IONIZACION DE CAPAS L POR INCIDENCIA DE PROTONES

		RAYBURN Y SCOFIELD 1974			RAYBURN Y SALEM 1974		
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Telurio Z=52	732	6.97E+01	1.91E+02	5.57E+02	3.15E+01	2.19E+02	5.64E+02
	678	4.70E+01	1.53E+02	4.46E+02	1.67E+01	1.75E+02	4.52E+02
	621	4.84E+01	1.49E+02	4.48E+02	1.90E+01	1.70E+02	4.54E+02
	552	2.22E+01	8.81E+01	2.58E+02	4.93E+00	1.01E+02	2.61E+02
	504	1.67E+01	7.64E+01	2.24E+02	1.78E+00	8.73E+01	2.27E+02
	435	1.81E+01	7.11E+01	2.08E+02	4.15E+00	8.13E+01	2.11E+02
	380	1.94E+01	4.43E+01	1.45E+02	1.05E+01	5.09E+01	1.47E+02
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Cesio Z=55	711	3.06E+01	9.75E+01	2.87E+02	8.69E+00	1.14E+02	2.91E+02
	659	1.86E+01	6.79E+01	1.99E+02	3.49E+00	7.90E+01	2.02E+02
	609	2.17E+01	6.89E+01	2.13E+02	6.20E+00	8.03E+01	2.16E+02
	577	1.87E+01	4.77E+01	1.59E+02	7.84E+00	5.57E+01	1.61E+02
	500	9.97E+00	3.15E+01	9.61E+01	2.88E+00	3.67E+01	9.75E+01
	438	8.46E+00	1.98E+01	6.17E+01	3.93E+00	2.31E+01	6.26E+01
	382	6.96E+00	1.35E+01	4.30E+01	3.81E+00	1.58E+01	4.36E+01
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Bario Z=56	707	1.90E+01	9.77E+01	2.65E+02	-6.42E+00	1.16E+02	2.70E+02
	664	9.34E+00	4.44E+01	1.25E+02	-2.23E+00	5.29E+01	1.28E+02
	627	1.82E+01	5.04E+01	1.51E+02	4.74E+00	6.03E+01	1.53E+02
	567	8.63E+00	3.58E+01	1.03E+02	-7.61E-01	4.27E+01	1.05E+02
	500	7.74E+00	3.28E+01	9.47E+01	-8.39E-01	3.90E+01	9.63E+01
	428	6.44E+00	1.85E+01	5.59E+01	1.51E+00	2.21E+01	5.69E+01
	380	6.33E+00	1.55E+01	4.72E+01	2.15E+00	1.85E+01	4.80E+01
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Lantano Z=57	723	2.15E+01	6.86E+01	2.04E+02	2.47E+00	8.24E+01	2.08E+02
	669	1.71E+01	5.05E+01	1.55E+02	3.07E+00	6.06E+01	1.58E+02
	620	1.28E+01	6.88E+01	1.73E+02	-3.02E+01	8.13E+01	1.76E+02
	576	9.00E+00	3.33E+01	9.85E+01	-1.47E-01	3.99E+01	1.00E+02
	500	6.01E+00	2.45E+01	7.14E+01	-6.96E-01	2.94E+01	7.28E+01
	438	6.59E+00	1.50E+01	4.77E+01	2.35E+00	1.80E+01	4.86E+01
	382	5.56E+00	1.11E+01	3.48E+01	2.38E+00	1.34E+01	3.55E+01

SECCIONES DE IONIZACION DE CAPAS L POR INCIDENCIA DE PROTONES

		RAYBURN Y SCOFIELD 1974			RAYBURN Y SALEM 1974		
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Cerio Z=58	730	1.18E+01	5.90E+01	1.65E+02	-6.97E-01	6.80E+01	1.67E+02
	676	9.64E+00	4.69E+01	1.34E+02	-3.20E-01	5.40E+01	1.36E+02
	620	9.36E+00	4.09E+01	1.21E+02	6.24E-01	4.72E+01	1.23E+02
	548	6.33E+00	2.71E+01	7.95E+01	5.43E-01	3.13E+01	8.08E+01
	503	4.94E+00	1.98E+01	5.86E+01	6.88E-01	2.29E+01	5.94E+01
	434	5.04E+00	1.42E+01	4.29E+01	1.93E+00	1.64E+01	4.35E+01
	380	5.39E+00	9.62E+00	3.10E+01	3.22E+00	1.12E+01	3.14E+01
	380	5.18E+00	1.01E+01	3.21E+01	2.91E+00	1.17E+01	3.25E+01
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Prascodimio Z=59	723	1.11E+01	4.64E+01	1.36E+02	2.07E+00	5.28E+01	1.37E+02
	676	9.47E+00	4.06E+01	1.20E+02	1.56E+00	4.63E+01	1.21E+02
	630	7.89E+00	3.31E+01	9.67E+01	1.44E+00	3.77E+01	9.80E+01
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Neodimio Z=60	707	1.15E+01	3.67E+01	1.14E+02	5.23E+00	4.12E+01	1.16E+02
	664	6.27E+00	2.75E+01	8.08E+01	1.62E+00	3.08E+01	8.18E+01
	628	6.82E+00	2.41E+01	7.33E+01	2.70E+00	2.70E+01	7.42E+01
	567	4.96E+00	1.73E+01	5.29E+01	2.00E+00	1.94E+01	5.36E+01
	498	4.69E+00	1.23E+01	3.81E+01	2.56E+00	1.38E+01	3.86E+01
	430	3.34E+00	7.19E+00	2.23E+01	2.07E+00	8.09E+00	2.26E+01
	381	3.45E+00	5.04E+00	1.69E+01	2.53E+00	5.69E+00	1.71E+01
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Samario Z=62	724	6.26E+00	2.91E+01	8.61E+01	2.22E+00	3.19E+01	8.70E+01
	622	6.29E+00	1.66E+01	5.40E+01	3.92E+00	1.82E+01	5.45E+01
	576	4.56E+00	1.18E+01	3.80E+01	2.87E+00	1.30E+01	3.84E+01
	500	3.52E+00	7.98E+00	2.54E+01	2.36E+00	8.79E+00	2.56E+01
	434	2.70E+00	5.77E+00	1.77E+01	1.86E+00	6.35E+00	1.79E+01
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Europio Z=63	708	6.26E+00	1.62E+01	5.54E+01	4.24E+00	1.76E+01	5.59E+01

SECCIONES DE IONIZACION DE CAPAS L POR INCIDENCIA DE PROTONES

		RAYBURN Y SCOFIELD 1974			RAYBURN Y SALEM 1974		
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Gadolinio Z=64	676	4.71E+00	1.82E+01	5.61E+01	2.45E+00	1.98E+01	5.67E+01
	630	4.24E+00	1.28E+01	4.05E+01	2.63E+00	1.39E+01	4.08E+01
	567	3.64E+00	8.74E+00	2.84E+01	2.53E+00	9.51E+00	2.86E+01
	567	3.67E+00	9.28E+00	2.96E+01	2.49E+00	1.01E+01	2.99E+01
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Dysprosio Z=66	681	2.68E+00	1.00E+01	3.21E+01	1.90E+00	1.06E+01	3.23E+01
	640	2.55E+00	7.94E+00	2.58E+01	1.92E+00	8.37E+00	2.59E+01
	610	2.22E+00	6.09E+00	1.97E+01	1.74E+00	6.43E+00	1.98E+01
	534	1.84E+00	4.31E+00	1.40E+01	1.49E+00	4.55E+00	1.40E+01
	533	1.90E+00	4.49E+00	1.46E+01	1.54E+00	4.74E+00	1.47E+01
	476	1.54E+00	2.68E+00	8.73E+00	1.32E+00	2.84E+00	8.79E+00
	420	1.23E+00	1.62E+00	5.36E+00	1.09E+00	1.72E+00	5.39E+00
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Holmio Z=67	679	2.56E+00	8.74E+00	2.91E+01	1.97E+00	9.14E+00	2.92E+01
	640	2.34E+00	5.46E+00	1.92E+01	1.97E+00	5.72E+00	1.93E+01
	610	2.26E+00	5.24E+00	1.82E+01	1.89E+00	5.49E+00	1.82E+01
	571	1.67E+00	4.32E+00	1.42E+01	1.38E+00	4.52E+00	1.43E+01
	534	1.77E+00	3.19E+00	1.13E+01	1.54E+00	3.34E+00	1.13E+01
	476	1.36E+00	2.32E+00	7.68E+00	1.20E+00	2.43E+00	7.72E+00
	420	1.17E+00	1.39E+00	5.04E+00	1.07E+00	1.46E+00	5.07E+00
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Erbio Z=68	681	2.12E+00	6.51E+00	2.11E+01	1.77E+00	6.75E+00	2.12E+01
	640	1.14E+00	5.58E+00	1.70E+01	8.46E-01	5.78E+00	1.70E+01
	610	1.83E+00	4.85E+00	1.60E+01	1.57E+00	5.02E+00	1.61E+01
	571	1.06E+00	4.18E+00	1.25E+01	8.39E-01	4.34E+00	1.25E+01
	532	1.18E+00	2.65E+00	8.58E+00	1.04E+00	2.75E+00	8.61E+00
	476	1.37E+00	1.94E+00	6.76E+00	1.26E+00	2.02E+00	6.79E+00
	410	8.14E-01	1.05E+00	3.52E+00	7.53E-01	1.09E+00	3.53E+00

SECCIONES DE IONIZACION DE CAPAS L POR INCIDENCIA DE PROTONES

		RAYBURN Y SCOFIELD 1974			RAYBURN Y SALEM 1974		
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Tulio Z=69	680	9.46E-01	7.20E+00	2.14E+01	6.57E-01	7.40E+00	2.14E+01
	640	1.12E+00	4.29E+00	1.35E+01	9.44E-01	4.41E+00	1.36E+01
	610	1.87E+00	4.26E+00	1.42E+01	1.69E+00	4.38E+00	1.42E+01
	571	1.56E+00	2.80E+00	9.71E+00	1.44E+00	2.88E+00	9.73E+00
	533	1.17E+00	2.27E+00	7.66E+00	1.07E+00	2.33E+00	7.68E+00
	476	9.46E-01	1.49E+00	5.02E+00	8.81E-01	1.53E+00	5.04E+00
	410	8.47E-01	8.10E-01	3.07E+00	8.09E-01	8.37E-01	3.07E+00
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Yterbio Z=70	723	1.16E+00	6.84E+00	2.12E+01	9.63E-01	6.98E+00	2.13E+01
	681	7.34E-01	6.39E+00	1.79E+01	5.55E-01	6.52E+00	1.80E+01
	681	9.97E-01	6.25E+00	1.86E+01	8.21E-01	6.38E+00	1.86E+01
	640	5.57E-01	4.24E+00	1.28E+01	4.38E-01	4.32E+00	1.28E+01
	610	7.00E-01	4.58E+00	1.30E+01	5.71E-01	4.67E+00	1.30E+01
	534	6.66E-01	2.65E+00	7.60E+00	5.90E-01	2.70E+00	7.62E+00
	534	5.13E-01	2.58E+00	7.26E+00	4.40E-01	2.63E+00	7.28E+00
Elemento	Energia (KeV)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)	Sec. L1 (barns)	Sec. L2 (barns)	Sec. L3 (barns)
Lutecio Z=71	681	2.19E+00	3.86E+00	1.44E+01	2.06E+00	3.95E+00	1.44E+01
	640	1.79E+00	2.43E+00	9.88E+00	1.71E+00	2.49E+00	9.90E+00
	610	1.08E+00	2.18E+00	7.82E+00	1.01E+00	2.23E+00	7.83E+00
	534	1.12E+00	1.35E+00	5.13E+00	1.07E+00	1.39E+00	5.14E+00
	476	1.08E+00	6.61E-01	3.31E+00	1.05E+00	6.79E-01	3.31E+00

## REFERENCIAS

- [AASK88] K. Aashamar and P. A. Admundsen, *J. Phys. B* **21** (1988) 2709.
- [AASO76] O. Aashamar and L. Kocbach, *Z. Phys. A* **279** (1976) 237.
- [ABRM65] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York, 1965.
- [AMUP77] P. A. Amundsen, *J. Phys. B* **10** (1977) 1097.
- [ANDJ76] J. U. Andersen, E. Laegsgaard, M. Lund and C. D. Mark, *Nucl. Instr. and Meth.* **132** (1976) 507.
- [ANDJ82] J. U. Andersen, E. Laegsgaard and M. Lund, *Nucl. Instr. and Meth.* **192** (1982) 79.
- [ASHL72] J. C. Ashley, R. H. Ritchie and W. Brandt, *Phys. Rev. B* **5** (1972) 2392.
- [BAMW72] W. Bambynek, B. Craseman, R. W. Fink, H. U. Freud, H. Mark, C. D. Swift, R.E. Price and P. V. Rao, *Rev. Mod. Phys.* **44** (1972) 716.
- [BANG59] J. Bang and J. M. Hansteen, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **31** (1959) 1.
- [BASG73] G. Basbas, W. Brandt and R. H. Ritchie, *Phys. Rev. A* **7** (1973) 1971.
- [BASG73b] G. Basbas, W. Brandt and R. Laubert, *Phys. Rev. A* **7** (1973) 983.
- [BASG78] G. Basbas, W. Brandt and R. Laubert, *Phys. Rev. A* **17** (1978) 1655.
- [BENO78] O. Benka and A. Kropf, *At. Data Nucl. Data Tables*, **22** (1978) 219.
- [BENO87] O. Benka, M. Geretschläger and H. Paul, *J. Physique* **C9** (1987) 251.
- [BERD78] D. Berényi, G. Hock, S. Ricz, B. Schlenk and A. Valek, *J. Phys. B* **11** (1978) 769.
- [BERE78] E. G. Berezhko, N. M. Kabachnick and V. V. Sizov, *J. Phys. B* **11** (1978) 421.
- [BERM87] M. J. Berger and J. H. Hubbell, National Bureau of Standards, Raport NBSIR 87-3597, 1987.
- [BETH30] H. A. Bethe, *Ann Physik*, **5** (1930) 325.
- [BETH57] H. A. Bethe and Merzbacher, en *Handbuch der Physik*, Editado por S. Flügge, Springer, Berlín, Vol. 35 (1957) 88.
- [BEVP69] P. R. Bevington, *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*,

McGraw-Hill, New York, 1969.

- [BRAE88] E. Braziewicz and J. Braziewicz, *J. Phys. B* **21** (1988) 1537.
- [BRAJ92] J. Braziewicz, E. Braziewicz, M. Pajek, T. Czyzewski, L. Glowacka, M. Jaskola, A. P. Kobzev and W. Kretschmer, Raport SINS 2129/I, Soltan Institute for Nuclear Studies, Poland, 1992.
- [BRAN74] W. Brandt and G. Lapicki, *Phys. Rev. A* **10** (1974) 474.
- [BRAN79] W. Brandt and G. Lapicki, *Phys. Rev. A* **20** (1979) 465.
- [BRAN81] W. Brandt and G. Lapicki, *Phys. Rev. A* **23** (1981) 1717.
- [BROE86] E. Browne and R. B. Firestone, *Table of Radioactive Isotopes*, John Wiley & Sons, New York, 1986.
- [CAMJ84] J. L. Campbell, R. G. Leight and W. J. Teesdale, *Nucl. Instr. and Meth. B* **5** (1984) 39.
- [CAMJ86] J. L. Campbell and P. L. McGhee, *Nucl. Instr. and Meth. A* **248** (1986) 393.
- [CAMJ90] J. L. Campbell, *Nucl. Instr. and Meth. B* **49** (1990) 115.
- [COHD80] D. D. Cohen, *J. Phys. B* **13** (1980) 2953
- [COHD81a] D. D. Cohen, *Nucl. Instr. and Meth.* **191** (1981) 551.
- [COHD81b] D. D. Cohen, *J. Phys. B* **14** (1981) 2037.
- [COHD82] D. D. Cohen, *Nucl. Instr. and Meth.* **193** (1982) 15.
- [COHD84] D. D. Cohen, *J. Phys. B* **17** (1984) 3913.
- [COHD85] D. D. Cohen and M. Harrigan, *At. Data Nucl. Data Tables*, **33** (1985) 255.
- [COHD89] D. D. Cohen, *At. Data Nucl. Data Tables*, **41** (1989) 287.
- [CHEM80] M. H. Chen, B. Crasemann and H. Mark, *Phys. Rev. A* **21** (1980) 436.
- [CHEM81] M. H. Chen, B. Crasemann and H. Mark, *Phys. Rev. A* **24** (1981) 177.
- [CHEM85] M. H. Chen and B. Crasemann, *At. Data Nucl. Data Tables* **33** (1985) 217.
- [CHEM89] M. H. Chen and B. Crasemann, *At. Data Nucl. Data Tables* **41** (1989) 257.
- [CHOI71] B. H. Choi, *Phys. Rev. A* **4** (1971) 1002.
- [CHOI73] B. H. Choi, *Phys. Rev. A* **7** (1973) 2056.
- [CHOI73b] B. H. Choi, E. Merzbacher and G. S. Khandelwal, *At. Data* **5** (1973) 291.
- [CHOI75] B. H. Choi, *Phys. Rev. A* **11** (1975) 2004.

- [CHUW78] W. K. Chu, J. M. Mayer and M. A. Nicolet, *Backscattering Spectrometry*, pg. 29, Academic Press, New York, 1978.
- [DATS74] S. Datz, J. L. Duggan, L. C. Feldman, E. Laegsgaard and J. U. Andersen, *Phys. Rev. A* **9** (1974) 192.
- [DOOL86] L. R. Doolittle, *Nucl. Instr. and Meth. B* **15** (1986) 227.
- [GALW74] W. J. Gallagher and S. J. Cippola, *Nucl. Instr. and Meth.* **122** (1974) 405.
- [GARJ68] J. D. Garcia, E. Gerjouy and J. E. Welker, *Phys. Rev.* **165** (1968) 66.
- [GARJ70] J. D. Garcia, *Phys. Rev. A* **1** (1970) 280.
- [GARJ73] J. D. Garcia, R. J. Fortner and T. M. Kavanagh, *Rev. Mod. Phys.* **45** (1973) 111.
- [GERE66] E. Gerjuoy, *Phys. Rev.* **148** (1966) 54.
- [GERM86] M. Geretschläger and O. Benka, *Phys. Rev. A* **34** (1986) 866.
- [GERM88] M. Geretschläger, Z. Smit and O. Benka, *J. Phys. B* **21** (1988) L603.
- [GERM90] M. Geretschläger, Z. Smit and O. Benka, *Phys. Rev.* **41** (1990) 123.
- [GRYM65] M. Gryzinski, *Phys. Rev. A* **138** (1965) 336.
- [HANJ73] J. S. Hansen, J. C. McGeorge, D. Nix, W. D. Schmidt-Ott, I. Unus and R. W. Fink, *Nucl. Instr. and Meth.* **106** (1973) 365.
- [HANJ73b] J. S. Hansen, *Phys. Rev. A* **8** (1973) 822.
- [HANS70] J. M. Hansteen and O. P. Mosebekk, *Z. Phys.* **234** (1970) 281.
- [HANS73] J. M. Hansteen and O. P. Mosebekk, *Nucl. Phys. A* **201** (1973) 541.
- [HANS75] J. M. Hansteen, O. M. Johnson and L. Kocbach, *At. Data Nucl. Data Tables* **15** (1975) 305.
- [HANS85] J. M. Hansteen, L. Kocbach and A. Graue, *Phys. Scripta*, **31** (1985) 63.
- [HANS85] J. M. Hansteen, *Nucl. Instr. and Meth. B* **42** (1989) 426.
- [HARM84] M. F. Harrigan, B. M. Spicer and D. D. Cohen, *Aust. J. Phys.* **37** (1984) 475.
- [HILK74] K. W. Hill and E. Merzbacher, *Phys. Rev. A* **9** (1974) 156.
- [HUTE85] E. Huttel, W. Arnold, H. Baumgart and G. Clausnitzer, *Nucl. Instr. and Meth. B* **12** (1985) 193.
- [ISHK74] K. Ishii, S. Morita, H. Tawara, H. Kaji and T. Shiokawa, *Phys. Rev. A* **10** (1974) 774.

- [ISHK90] K. Ishii and S. Morita, *I. J. PIXE* **1** (1990) 1.
- [JAKA84] A. Jacob, D. Trautmann, F. Rosel, and G. Baur, *Nucl. Instr. and Meth. B* **4** (1984) 218
- [JITW83] W. Jitshin, R. Hippler, K. Finck, R. Schuch and H. O. Lutz, *J. Phys. B* **16** (1983) 4405.
- [JITW85] W. Jitschin, G. Martelik, U. Werner and P. Funke, *J. Phys. B* **18** (1985) 1139.
- [JITW89] W. Jitschin, G. Grose and P. Röhl, *Phys. Rev. A* **39** (1989) 103.
- [JOHD79] D. E. Johnson, G. Basbas and F.D. McDaniels, *At. Data Nucl. Data Tables* **24** (1979) 1.
- [JOHG82] G. I. Johansson, *X-ray Spectrom.* **11** (1982) 194.
- [JOHS76] S. A. E. Johansson and T. B. Johansson, *Nucl. Instr. and Meth.* **137** (1976) 473.
- [JOHS88] S. A. E. Johansson and J. L. Campbell, *PIXE: A Novel Technique for Elemental Analysis*, John-Wiley and Sons, Chichester, 1988.
- [KHAG69] G. S. Khandelwal, B. H. Choi and E. Merzbacher, *At. Data* **1** (1969) 103.
- [KHAR80] Md. R. Khan and M. Karimi, *X-Ray Spectrom.* **9** (1980) 32.
- [KNOG89] G. F. Knoll, *Radiation Detection and Measurement*, Second Edition, John Wiley & Sons, New York, 1989.
- [KOCL76] L. Kocbach, *J. Phys. B* **9** (1976) 2269.
- [KOCL76b] L. Kocbach, *Z. Phys. A* **279** (1976) 233.
- [KRAM79] M. O. Krause, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **8** (1979) 307.
- [LANDAU1] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Mecánica, Curso de Física Teórica*, Vol. 1, Editorial Reverté, Barcelona, 1978.
- [LANDAU3] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Mecánica Cuántica No Relativista, Curso de Física Teórica*, Vol. 3, Editorial Reverté, Barcelona, 1983.
- [LAPG70] G. Lapicki and W. Losonsky, *Phys. Rev. A* **20** (1979) 481.
- [LECJ79] J. L. L'Ecuyer, J. A. Davies and N. Matsunami, *Nucl. Instr. and Meth.* **160** (1979) 337.
- [LENW79] W. N. Lennard and D. Phillips, *Nucl. Instr. and Meth.* **166** (1979) 521.

- [MADD75] D. H. Madison and E. Merzbacher, en *Atomic Inner-Shell Processes*. Vol. I, Ed. by B. Craseman. Academic Press, New York, 1975.
- [MANS73] S. T. Manson, *Phys. Rev. A* **6** (1973) 1013.
- [MAYJ77] J. W. Mayer and E. Rimini, *Ion Beam Handbook for Material Analysis*, Academic Press, New York, 1977.
- [MCDO70] M. R. C. McDowell y J. P. Coleman, *Introduction to the Theory of Ion-Atom Collisions*, North-Holland, Amsterdam, 1970.
- [MERE58] E. Merzbacher and H. W. Lewis, en *Handbuch der Physik*, Editado por S. Flügge, Springer, Berlín, Vol. 34 (1958) 166.
- [MIRJ88] J. Miranda and A. Oliver, *Nucl. Instr. and Meth. B* **34** (1988) 362.
- [MONE85] E. C. Montenegro, A. Oliver and F. Aldape, *Nucl. Instr. and Meth. B* **12** (1985) 453.
- [MUKT91] T. Mukoyama, *I. J. PIXE*, **1** (1990) 209.
- [OLIA87] A. Oliver and J. Miranda, *Nucl. Instr. and Meth. B* **29** (1987) 521.
- [ORLI93] I. Orlic, K. K. Loh, C. H. Sow, S. M. Tang and P. Thong, *Nucl. Instr. and Meth. B* **74** (1993) 352.
- [PAJM89] M. Pajek, A. P. Kobzev, R. Sandrik, R. A. Ilkhamov and S. H. Khosmurudov, *Nucl. Instr. and Meth. B* **42** (1989) 346.
- [PAUH82] H. Paul, *Nucl. Instr. and Meth.* **192** (1982) 11.
- [PAUH84] H. Paul, *Nucl. Instr. and Meth. B* **4** (1984) 211.
- [PAUH86] H. Paul and J. Muhr, *Phys. Rep.* **135** (1986) 47.
- [PAUH89] H. Paul and J. S. Sacher, *At. Data Nucl. Data Tables* **42** (1989) 105
- [PAUM78] M. Pauli and D. Trautmann, *J. Phys. B* **11** (1978) 667.
- [PAUM78b] M. Pauli, F. Rösel and D. Trautmann, *J. Phys. B* **11** (1978) 2511.
- [PERE86] E. Perillo, G. Spadaccini, M. Vigilante and P. Cuzzocrea, *J. Phys. B* **19** (1986) 4161.
- [PERE87] E. Perillo, G. Spadaccini, M. Vigilante, P. Cuzzocrea and N. De Cesare, *Il Nuovo Cim. D* **9** (1987) 71.
- [PERE87b] E. Perillo, P. Cuzzocrea, N. De Cesare, G. Spadaccini and M. Vigilante, *J. Phys. B* **20** (1987) 6079.

- [PERE90] E. Perillo, P. Cuzzocrea, N. De Cesare, F. Murolo, G. Spadaccini and M. Vigilante, Nucl. Instr. and Meth. A **299** (1990) 399.
- [RAYL83] L. A. Rayburn, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-30 (1983) 964.
- [RAYL85] L. A. Rayburn and R. Mehta, Nucl. Instr. and Meth. B **10/11** (1985) 175.
- [REES72] S. J. B. Reed and N. G. Ware, J. Phys. E **5** (1972) 582.
- [RICJ90] J. Rickards, A. Oliver, J. Miranda and E. P. Zironi, Appl. Surf. Sci. **45** (1990) 155.
- [ROSM54] M. E. Rose and T. A. Welton, Phys. Rev. **86** (1952) 432.
- [ROSE83a] E. Rosato, Phys. Rev. A **28** (1983) 2757. % REVISAR LOS AUTORES
- [ROSE83b] E. Rosato, P. Cuzzocrea, N. De Cesare, E. Perillo and G. Spadaccini, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-30 (1983) 967.
- [RUTC73] C. H. Rutledge and R. L. Watson, At. Data Nucl. Data Tables **12** (1973) 195.
- [SALS74] S. I. Salem, S. L. Panossian and R. A. Krause, At. Data Nucl. Data Tables, **14** (1974) 91.
- [SARL86] L. Sarkadi, J. Phys. B **19** (1986) 2519.
- [SARL88] L. Sarkadi and T. Mukoyama, Phys. Rev. A **37** (1988) 4540.
- [SCOJ74] J. H. Scofield, At. Data Nucl. Data Tables **14** (1974) 121.
- [SCOJ74b] J. H. Scofield, Phys. Rev. A **9** (1974) 1041.
- [SCOJ74c] J. H. Scofield, Phys. Rev. A **10** (1974) 1507.
- [SCHI68] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3. Edition, McGraw-Hill, 1968.
- [SHIK80] K. Shima, K. Umetani and T. Mikuno, J. Appl. Phys. **51** (1980) 846.
- [SMIT89] Z. Smit, Nucl. Instr. and Meth. B **36** (1989) 254.
- [SOKR81] R. S. Sokhi and D. Crumpton, Nucl. Instr. and Meth. **181** (1981) 5.
- [TAUK72] K. Taulbjerg and P. Sigmund, Phys. Rev. A **5** (1972) 1285.
- [TAWH74] H. Tawara, K. Ishii, S. Morita, H. Kaji, C. N. Hsu and T. Shiokawa, Phys. Rev. A **9** (1974) 1617.
- [THOB69] B. K. Thomas and J. D. Garcia, Phys. Rev. **179** (1969) 94.
- [TRAD80] D. Trautmann and F. Rösel, Nucl. Instr. and Meth. **169** (1980) 259.
- [VANP79] P. Van Espen, H. Nullens and W. Maenhaut, en *Microbeam Analysis 1979*, Editado por Newbury San Francisco Press, San Francisco, 1979

[VIGM90] M. Vigilante, P. Cuzzocrea, N. De Cesare, F. Murolo, E. Perillo and G. Spadacini, Nucl. Instr. and Meth. B 51 (1990) 232.

[WALM56] M. C. Walske, Phys. Rev. 101 (1956) 940.

[WERU88] U. Werner and W. Jitschin, Phys. Rev. A 38 (1988) 4009.

[WILU86] U. Wille and R. Hippler, Phys. Rep. 132 (1986) 129.

[ZIEJ85] J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Vol. 1, Pergamon Press, New York, 1985.