

**Universidade de São Paulo**  
Instituto de Física

**Medidas das seções de choque de ionização da  
camada  $K$  de Au e Bi por impacto de elétrons**

**Viktor Jahnke**

Dissertação de mestrado apresentada  
ao Instituto de Física da  
Universidade de São Paulo  
para a obtenção do título  
de mestre em ciências

Orientador:

Prof. Dr. Vito Roberto Vanin

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Vito Roberto Vanin - IFUSP

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Elisabeth Mateus Yoshimura - IFUSP

Prof. Dr. Johnny Ferraz Dias - UFRGS

São Paulo  
2012

## **FICHA CATALOGRÁFICA**

**Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação  
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo**

Jahnke, Viktor

Medida das seções de choque de ionização da camada K  
de Au e Bi por impacto de elétrons. - São Paulo, 2012.

Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo.  
Instituto de Física, Depto. Física Experimental

Área de Concentração: Física geral

Unitermos: 1. Física experimental; 2. Interação da  
radiação com a matéria; 3. Espectrometria de raios X;  
4. Espectrometria de raios gama; 5. Microtron.

USP/IF/SBI-086/2012

# Resumo

Mediu-se a seção de choque de ionização da camada  $K$  de átomos de Au e Bi por impacto de elétrons com energias entre os respectivos potenciais de ionização (80 e 90 keV) e 100 keV. Filmes finos de Au e Bi, evaporados em suportes de filmes finos de C, foram posicionados numa câmara de vácuo perpendicularmente ao feixe de elétrons do sistema injetor do Mícrotron da Universidade de São Paulo, Brasil. Os raios x emitidos num ângulo de  $120^\circ$  em relação à direção do feixe de elétrons foram observados com um detetor de HPGe planar, cuja eficiência total de pico foi determinada com fontes radioativas de atividades conhecidas. Para cada energia de feixe, a seção de choque experimental de produção de raios x foi determinada com base nas áreas dos picos  $K\alpha_{2,1}$  característicos, na área do espectro de bremsstrahlung próxima ao “tip” e na seção de choque duplamente diferencial de produção de bremsstrahlung teórica. Valores tabelados de *fluorescence yield* e taxa de emissão de raios x foram empregados para converter seções de choque de produção de raios x em seções de choque de ionização. Os resultados experimentais obtidos são ligeiramente maiores do que os resultados de cálculos recentes baseados na aproximação de Bohr com ondas distorcidas. No caso do Au, os poucos resultados encontrados na literatura para energias próximas ao limiar de ionização diferem entre si quase por um fator 4 a 100 keV, e a seção de choque obtida neste trabalho se encontra próxima do valor médio desses dados. Por outro lado, este experimento fornece as primeiras medições da seção de choque de ionização da camada  $K$  do Bi para energias menores que 2 MeV.

# Abstract

The cross sections for the ionization of the  $K$  shells of Au and Bi atoms by electrons with energies from 100 keV down to the respective thresholds (80 and 90 keV) were measured. To this end, thin films of Au and Bi, evaporated on very thin C backings, were positioned in a vacuum chamber perpendicularly to the electron beam delivered by the microtron injector at the Universidade de São Paulo, Brazil. The x-rays emitted at an angle of  $120^\circ$  relative to the beam direction were observed with a planar HPGe detector, whose full-energy peak efficiency curve had been determined using radioactive sources of known activities. For each beam energy, the experimental x-ray production cross section was determined using the area of the characteristic  $K\alpha_{2,1}$  peaks, the area of the spectrum in an energy interval close to the bremsstrahlung tip and the theoretical doubly-differential bremsstrahlung cross section. Tabulated fluorescence yields and x-ray emission rates were employed to convert x-ray production to ionization cross sections. The obtained experimental values for the  $K$  shells of the studied atoms are slightly larger than that of recent calculations carried out within the distorted-wave Born approximation. In the case of Au, the few measurements reported in the literature at energies close to the threshold differ by almost a factor of 4 at 100 keV, and our cross sections lie between those older data. On the other hand, the present experiment provides the first cross section measurements for the  $K$  shell ionization of Bi below 2 MeV.

# Agradecimentos

Agradeço aos meus pais, Horst Reinhold Jahnke e Gilda Timóteo Leite, por me educarem com muito amor e dedicação. Em especial, agradeço à minha mãe pelo apoio incondicional ao longo de minha vida.

Agradeço à minha irmã, Cristiane, pelo companheirismo e pela imensa ajuda na realização deste trabalho. Sua seriedade e competência me inspiram.

Ao meu irmão, Max, agradeço pelos ensinamentos de matemática pura e pelos conselhos profissionais, em especial, por me motivar a seguir a carreira acadêmica.

Agradeço à mulher de minha vida, Joyce, pelo carinho, companheirismo e paciência ao longo dos anos em que estamos juntos. Sua força de vontade e vigor me motivam nos momentos difíceis. Também agradeço a toda sua família, que sempre me tratou muito bem.

Ao Tiago Fiorini, agradeço pela grande prestimosidade. Em particular, agradeço pelas discussões sobre os aspectos experimentais desse trabalho e pela ajuda com o Latex e o MatLab.

Ao meu orientador, Vito, agradeço por me fornecer pleno apoio no desenvolvimento deste trabalho, pela ajuda em numerosas questões acadêmicas e pela infinita paciência comigo ao longo de todos esses anos. Com ele tive a oportunidade de aprender muito sobre física e estatística.

Agradeço à professora Nora pelo grande auxílio em diversas atividades associadas a esse trabalho. Em especial, agradeço por sua ajuda no planejamento e execução dos experimentos.

Agradeço a Wanda G. P. Engel, pela preparação dos alvos e à Marcia Rizutto, pelas medições por RBS.

Ao professor José María Fernández-Varea, idealizador desse projeto, agradeço pela contribuição nas atividades experimentais e de análise de dados. Sua experiência profissional trouxe grandes benefícios a este trabalho.

Ao professor Marcos Nogueira Martins, agradeço pelo auxílio em questões técnicas e discussões esclarecedoras.

Também agradeço o auxílio de todos os outros professores do LAL, em

especial, agradeço ao professor Otaviano, cuja ética e profissionalismo tomo com exemplo em minha vida.

Agradeço à toda a equipe técnica do Mícrotron: Alex Silva, Alexandre Malafrente, Alfredo Bonini, Luciano Portante, Marcelo Lucena e Roberto da Rocha Lima por manterem o acelerador funcionando. Em especial, agradeço ao Alexandre e ao Alfredo pelas dezenas de horas passadas na sala de controle fazendo medidas e pelo auxílio técnico, sem o qual este projeto não seria possível.

Também agradeço o apoio técnico do pessoal da eletrônica: KK, Eduardo e Renato.

Agradeço à Juliana e à Bianca, secretárias do LAL, pelo apoio e amizade.

Ao Korogui, agradeço pela ajuda em informática e pelos animes compartilhados.

Agradeço ao pessoal da CPG: Cláudia, Cristiano, Éber e Maria Izabel pela grande prestatividade e profissionalismo.

Agradeço aos meus amigos, Ícaro, Lelas, Caio Laganá, Stefano e Brunão, pelas inúmeras discussões esclarecedoras sobre a vida, o Universo e tudo mais. Em especial, agradeço ao Lelão, por me ajudar a entender um modelo clássico de ionização.

Agradeço à Suelen, que ajudou a tornar esta dissertação mais clara.

Aos meus amigos LM, Felis e Filipu, agradeço pelo ajuda com o MatLab, com o Latex e pelos gibis e mangás emprestados.

Agradeço o companheirismo da galera do xadrez: Rafael, Jéssica, Smurf, Adolfo, Marco, Renato, Cubo, Scarface, René, etc.

Também agradeço pelo entretenimento proporcionado pelo pessoal da equipe de Taekwondo da Poli: Diego, Paula, Vitor, Jorge, Carlão, etc.

Agradeço aos meus colegas: Schock, Aline, Tatiane “Soundtrack”, Bruno Franzon, Diego, Dani, Zwinglio, Danilo, Denise, Exponencienus, Leika, Iginio, Josi, Celi, Neivy, Camilo e Juan, pela amizade e momentos compartilhados.

Por fim, agradeço à FAPESP, ao CNPq e à CAPES pelo apoio financeiro.

À Joyce.





# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Motivação . . . . .	1
1.2	Organização desta dissertação . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Teoria de ionização por impacto de elétrons</b>	<b>5</b>
2.1	Considerações gerais . . . . .	5
2.2	Aproximação de Bohr com ondas planas . . . . .	8
2.3	Aproximação de Bohr com ondas distorcidas . . . . .	11
2.4	Modelos semi-empíricos . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Método Experimental</b>	<b>15</b>
3.1	Arranjo experimental . . . . .	15
3.1.1	Linha de baixa energia do Microtron do IFUSP . . . . .	15
3.1.2	Arranjo para a detecção de raios x . . . . .	18
3.1.3	Alvos, suportes, fontes de calibração e blindagem . . . . .	18
3.2	Procedimento experimental . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Calibração do sistema de medida</b>	<b>25</b>
4.1	Calibração de energia . . . . .	25
4.2	Calibração de largura . . . . .	27
4.3	Calibração de eficiência . . . . .	30
4.4	Calibração da função resposta . . . . .	34
<b>5</b>	<b>Análise de dados</b>	<b>39</b>
5.1	Caracterização do feixe de elétrons . . . . .	39
5.1.1	Estimativa da energia do feixe . . . . .	40
5.1.2	Determinação da energia e dispersão do feixe . . . . .	41
5.1.3	Modelos para o contínuo de bremsstrahlung . . . . .	45
5.1.4	Mapeamento de $Q(E_e, \sigma_e)$ . . . . .	47
5.2	Seção de choque de ionização . . . . .	48

<b>6</b>	<b>Resultados e discussão</b>	<b>53</b>
<b>7</b>	<b>Conclusão</b>	<b>61</b>

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Motivação

Desde meados do século XIX até os dias atuais, a ionização de átomos por impacto de elétrons tem sido objeto de estudo dos físicos. O conhecimento da seção de choque desse processo é indispensável para uma compreensão quantitativa de uma variedade de fenômenos físicos, que aparecem na física atômica e molecular, na física de plasmas, na astrofísica e também em diversas aplicações tecnológicas como microanálise por sonda eletrônica, espectroscopia de elétrons Auger, aparelhos de raios x, tecnologias de fusão, etc.

Há muitos modelos teóricos que procuram descrever o processo de ionização. Nos trabalhos mais recentes, as funções de onda dos elétrons atômicos e do projétil são autofunções da equação de Dirac e a seção de choque de ionização é calculada usando-se teoria de perturbação em primeira ordem. Para altas energias, o processo é bem descrito pela aproximação de Born de ondas planas (PWBA-*plane wave Born approximation*). Para baixas energias, no entanto, acredita-se que o processo encontre uma boa descrição na aproximação de Born de ondas distorcidas (DWBA-*distorted wave Born approximation*). Recentemente, Bote e Salvat [1] desenvolveram um esquema de cálculo no qual usam PWBA em altas energias e DWBA a baixas energias para calcular a seção de choque de ionização de camadas atômicas internas

por impacto tanto de elétrons quanto de pósitrons. Eles obtiveram resultados para elementos com número atômico  $Z$  entre 1 e 99 e projéteis com energias que vão desde o limiar de ionização até energias arbitrariamente grandes.

Do ponto de vista experimental, o processo ainda precisa ser estudado. Dados relativos à ionização da camada  $K$  obtidos até dezembro de 1999 foram compilados por Liu e colaboradores [2] e apenas algumas medições foram feitas desde então. Segundos esses autores, o conjunto de dados disponíveis para a camada  $K$  são escassos ou mesmo inexistentes em várias intervalos de energia  $e$ , além disso, em muitos casos os resultados obtidos por diferentes laboratórios são incompatíveis. Esta escassez de dados é ainda maior para as camadas  $L$  e  $M$ .

O Laboratório do Acelerador Linear do Instituto de Física da Universidade de São Paulo está construindo um acelerador do tipo race-track microtron. O sistema injetor desse acelerador está pronto e fornece um feixe de elétrons com energia de 1,9 MeV. Foi construída uma linha de feixe associada a uma câmara de irradiação para a realização de experimentos com esse feixe. Desligando-se as cavidades aceleradoras do acelerador, também é possível trabalhar com feixes de energia entre 50 e 100 keV.

Nesse contexto, este trabalho tem por objetivo medir a seção de choque de ionização da camada  $K$  por impacto de elétrons com energia entre o potencial de ionização e 100 keV para alvos de Au e Bi. A escolha desses alvos se deu por dois fatores: a necessidade de se testar os mais recentes trabalhos teóricos para energias próximas ao potencial de ionização da camada  $K$  e pela escassez e/ou incompatibilidade dos dados nessa faixa de energia.

## 1.2 Organização desta dissertação

No capítulo 2 serão apresentados os principais modelos teóricos usados para calcular a seção de choque de ionização atômica por impacto de elétrons.

No capítulo 3 é feita uma descrição técnica do experimento, apresentando-se os equipamentos usados e o procedimento experimental.

No capítulo 4 detalha-se a calibração do sistema de aquisição, em particular, os modelos usados para a função resposta e curva de eficiência do

detetor de fótons.

No capítulo 5 é detalhada a análise de dados. Explica-se como é feita a caracterização do feixe de elétrons e a determinação da seção de choque de ionização.

No capítulo 6 os resultados obtidos são apresentados e discutidos e a conclusão deste trabalho é feita no capítulo 7.



## Capítulo 2

# Teoria de ionização por impacto de elétrons

Neste capítulo são apresentados os principais modelos teóricos desenvolvidos para descrever o processo de ionização por impacto de elétrons. A princípio é feita uma breve introdução aos formalismos *ab initio* PWBA e DWBA, a partir dos quais se determina a seção de choque de ionização usando-se teoria de perturbação em mecânica quântica relativística. Como esses métodos são baseados na determinação de grandezas atômicas cujo cálculo exige grande tempo de computação numérica, convém usar modelos simplificados, de menor complexidade numérica, mas que exigem a utilização de parâmetros empíricos. Por isso apresenta-se em seguida os modelos semi-empíricos de Kolbenstvedt, Hippler e RBEB.

### 2.1 Considerações gerais

Considere a colisão de um elétron com um átomo neutro, de número atômico  $Z$ . Se o elétron incidente tem quantidade de movimento  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  antes da colisão, sua energia cinética  $E$  e velocidade  $\vec{v}$  ficam, então, definidas pelas

relações

$$E = \sqrt{(\mathbf{p}c)^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2,$$

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}c^2}{E}$$

onde  $m_e$  é a massa do elétron e  $c$  é a velocidade da luz no vácuo. Sejam  $\mathbf{p}' = \hbar \mathbf{k}'$ ,  $E'$  e  $\mathbf{v}'$  as mesmas grandezas após a colisão. Define-se a perda de energia,  $W$ , e a energia de retrocesso,  $Q$ , como

$$W = E - E', \quad (2.1)$$

$$Q = \sqrt{(\hbar \mathbf{q}c)^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2, \quad (2.2)$$

onde  $\hbar \mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$  é a quantidade de movimento transferida na colisão.

Convém fazer algumas observações acerca de nomenclatura. Após a ionização, o estado final contém dois elétrons livres, que são indistinguíveis. Nos cálculos de transferência de energia, adota-se o elétron mais energético como elétron incidente, que também será chamado de *elétron projétil*. O outro elétron será chamado de *elétron secundário*.

O hamiltoniano total do sistema (projétil + átomo) é dado por

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_P + \mathcal{H}_A + \mathcal{H}'$$

onde  $\mathcal{H}_P$  e  $\mathcal{H}_A$  são os hamiltonianos do projétil e do átomo, respectivamente, e  $\mathcal{H}'$  é o hamiltoniano de interação entre ambos.

Considera-se  $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_P + \mathcal{H}_A$  como o hamiltoniano do sistema não perturbado e trata-se  $\mathcal{H}'$  como uma perturbação. Vale notar que  $\mathcal{H}'$  só pode ser tratado como uma perturbação se a energia do elétron incidente for bem maior que a energia média dos elétrons atômicos, caso contrário, a teoria de perturbação em primeira ordem não é aplicável [1].

Os formalismos PWBA e DWBA diferem na escolha de  $\mathcal{H}_P$  e  $\mathcal{H}'$ . No entanto, em ambos os casos o átomo é modelado da mesma forma, conforme se descreve a seguir.

Adotando a origem do sistema de coordenadas no centro do núcleo atômico,



pode-se escrever o hamiltoniano do átomo como

$$\mathcal{H}_A = \sum_{i=1}^Z \left[ \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + c\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{p}_i + (\boldsymbol{\beta}_i - 1)m_e c^2 \right] + \sum_{i<j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

onde  $\boldsymbol{\alpha}_i$ ,  $\boldsymbol{\beta}_i$  são as matrizes de Dirac e  $\mathbf{r}_i$  é o vetor posição do  $i$ -ésimo elétron atômico,  $r_i = |\mathbf{r}_i|$  e  $\epsilon_0$  é a permissividade elétrica do vácuo. A função de onda que descreve o átomo,  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_Z)$ , respeita a equação

$$\mathcal{H}_A \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_Z) = E_A \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_Z) \quad (2.3)$$

onde  $E_A$  é a energia mecânica total do átomo. Como a Eq. 2.3 não apresenta solução analítica, convém trabalhar com modelos atômicos simplificados. Em geral, o átomo é descrito usando a aproximação de elétrons independentes em um potencial central [3, 4], isto é, considera-se que os elétrons atômicos se movimentam de maneira independente uns dos outros e a energia potencial eletrostática nuclear e da nuvem eletrônica é substituída por um potencial central,  $V_T(r)$ , comum a todos os elétrons. Assim, o hamiltoniano atômico passa a ser dado por

$$\mathcal{H}_A = \sum_{i=1}^Z [c\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{p}_i + (\boldsymbol{\beta}_i - 1)m_e c^2 + V_T(r_i)]$$

e a função de onda atômica,  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_Z)$ , é dada por

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_Z) = \frac{1}{\sqrt{Z!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \psi_1(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_1(\mathbf{r}_Z) \\ \psi_2(\mathbf{r}_1) & \psi_2(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_2(\mathbf{r}_Z) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_Z(\mathbf{r}_1) & \psi_Z(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_Z(\mathbf{r}_Z) \end{vmatrix}$$

onde  $\psi_i(\mathbf{r}_j)$  é a função de onda do  $i$ -ésimo orbital atômico. Nessa aproximação a função de onda de cada um dos orbitais atômicos satisfaz a equação

$$[c\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \mathbf{p}_j + (\boldsymbol{\beta}_j - 1)m_e c^2 + V_T(r_j)] \psi_i(\mathbf{r}_j) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}_j)$$

onde  $\epsilon_i$  é a energia mecânica correspondente ao  $i$ -ésimo orbital atômico.

## 2.2 Aproximação de Bohr com ondas planas

Nesta seção são apresentadas as principais ideias subjacentes à PWBA. Apresentamos o esquema de cálculo tal como desenvolvido por Bote e Salvat [5].

Na PWBA, escolhe-se  $\mathcal{H}_P$  como sendo o hamiltoniano livre de Dirac, isto é, o elétron projétil respeita a equação de Dirac para elétrons livres

$$\mathcal{H}_P \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0) = [c\boldsymbol{\alpha}_0 \cdot \mathbf{p} + (\beta_0 - 1)m_e c^2] \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0) = E \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0)$$

onde  $\boldsymbol{\alpha}_0$  e  $\beta_0$  são matrizes de Dirac e  $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0)$  é uma onda plana de Dirac.

O hamiltoniano de interação,  $\mathcal{H}'$ , é dado pela interação eletromagnética entre o projétil e os elétrons atômicos somada com a interação eletrostática com o núcleo atômico, assim

$$\mathcal{H}' = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} + \sum_{i=1}^Z \mathcal{H}_{int}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_i)$$

onde  $\mathbf{r}_0$  é o vetor posição do projétil e  $\mathcal{H}_{int}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_i)$  descreve sua interação com os elétrons atômicos. A perturbação  $\mathcal{H}'$  induz transições entre os autoestados de  $\mathcal{H}_0$ .

Sejam  $|i\rangle = |\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0), \Psi_a\rangle$  e  $|f\rangle = |\phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}_0), \Psi_b\rangle$  os auto-estados inicial e final de  $\mathcal{H}_0$ , respectivamente, onde  $\Psi_a$  representa o átomo em seu estado fundamental e  $\Psi_b$  diz respeito ao átomo ionizado. A seção de choque de ionização é proporcional a taxa de transição entre os estados  $|i\rangle$  e  $|f\rangle$ , que é dada por [6]

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \mathcal{H}' | i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f)$$

onde  $E_i$  e  $E_f$  são a energia mecânica inicial e final do sistema, respectivamente.

O elemento de matriz  $\langle f | \mathcal{H}' | i \rangle$  pode ser escrito como

$$\langle f | \mathcal{H}' | i \rangle = \langle f | \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} | i \rangle + \langle f | \sum_{i=1}^Z \mathcal{H}_{\text{int}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_i) | i \rangle$$

Note que

$$\langle \phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}_0), \Psi_b | \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} | \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0), \Psi_a \rangle = \langle \phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}_0) | \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} | \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0) \rangle \langle \Psi_b | \Psi_a \rangle = 0$$

devido à ortogonalidade entre os estados atômicos inicial e final  $\langle \Psi_b | \Psi_a \rangle = 0$ . Além disso, de acordo com as regras de Slater-Condon, o elemento de matriz de  $\mathcal{H}_{\text{int}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_i)$  é nulo se os estados atômicos inicial e final forem diferentes em mais de um orbital, o que implica que somente um elétron atômico participa efetivamente na interação, enquanto os outros permanecem como espectadores[3, 5]. Tendo isso em vista, o elemento de matriz de  $\mathcal{H}'$  se simplifica, passando a ser dado por

$$\langle f | \mathcal{H}' | i \rangle = \langle \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0), \psi_a(\mathbf{r}_k) | \mathcal{H}_{\text{int}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_k) | \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0), \psi_b(\mathbf{r}_k) \rangle$$

onde  $\psi_a(\mathbf{r}_k)$  e  $\psi_b(\mathbf{r}_k)$  são as funções de onda do  $k$ -ésimo elétron atômico, o qual se supõe ser o elétron ativo.

No calibre de Coulomb, a hamiltoniana de interação entre dois elétrons pode ser decomposta em uma parte longitudinal, que corresponde a interação eletrostática instantânea de Coulomb, e uma parte transversal, que representa a troca de fótons virtuais entre o elétron incidente e o elétron atômico ativo [7]. Assim

$$\mathcal{H}_{\text{int}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_k) = \mathcal{H}^{\text{L}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_k) + \mathcal{H}^{\text{T}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_k)$$

onde

$$\mathcal{H}^{\text{L}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_k) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_k|}$$

e

$$\mathcal{H}^{\text{T}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_k) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3\mathbf{q} \left( -\frac{\boldsymbol{\alpha}_0 \cdot \boldsymbol{\alpha}_k - (\boldsymbol{\alpha}_0 \cdot \hat{\mathbf{q}})(\boldsymbol{\alpha}_k \cdot \hat{\mathbf{q}})}{q^2 - (W/\hbar c)^2} \right) \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_k)]$$

onde  $\alpha_0$  e  $\alpha_k$  são matrizes de Dirac correspondentes ao elétrons incidente e atômico e  $\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{q}/q$ .

Pode-se demonstrar que a seção de choque duplamente diferencial em  $Q$  e  $W$  é dada por [5]

$$\frac{d^2\sigma}{dW dQ} = \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{2\pi}{m_e v^2} \frac{1}{W^2} [F(W, Q) + G(W, Q)] \quad (2.4)$$

onde

$$F(W, Q) \propto \langle \psi_b(\mathbf{r}_k) | \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_k) | \psi_a(\mathbf{r}_k) \rangle$$

é proporcional à intensidade de oscilador generalizada do átomo, enquanto que

$$G(W, Q) \propto \langle \psi_b(\mathbf{r}_k) | \alpha_k \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_k) | \psi_a(\mathbf{r}_k) \rangle$$

é proporcional à intensidade de oscilador generalizada transversal do átomo (para mais detalhes sobre a forma funcional dessas funções, veja [5], pag. 23 e 24). O fator fora das chaves na Eq. 2.4 corresponde à seção de choque de Rutherford, diferencial na perda de energia, para o espalhamento de dois elétrons livres. As funções  $F(W, Q)$  e  $G(W, Q)$  representam desvios em relação à seção de choque de Rutherford, devidos à estrutura atômica e a efeitos relativísticos. A seção de choque total é obtida integrando-se  $d^2\sigma/dW dQ$  em  $W$  e  $Q$

$$\sigma = \int_0^{W_{\max}} dW \int_{Q_-}^{Q_+} dQ \frac{d^2\sigma}{dW dQ}$$

onde  $W_{\max} = E/2$  é a máxima perda de energia e  $Q_-$  e  $Q_+$  são, respectivamente, a mínima e máxima energia de recuo, dadas por

$$Q_{\pm} = \sqrt{(cp \pm cp')^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2$$

Note que este formalismo pode descrever tanto ionizações como excitações atômicas, dependendo da seleção do estado atômico final  $\Psi_b$ . No caso de ionizações da camada  $K$ , o estado atômico inicial é descrito por um elétron no orbital  $1s_{1/2}$ , e o estado atômico final por uma onda plana distorcida pelo potencial coulombiano.

Como já foi dito anteriormente, o modelo só deve funcionar para elétrons incidentes com energia bem maior que o potencial de ionização, uma vez que, para energias próximas ao limiar de ionização, a hamiltoniana de interação não pode ser tratada como uma perturbação. Além disso, esse modelo ignora os efeitos de indistinguibilidade entre os elétrons incidente e secundário. A próxima seção descreve uma maneira de contornar estes problemas, tornando possível que se lide com elétrons incidentes com energias próximas ao limiar de ionização.

## 2.3 Aproximação de Bohr com ondas distorcidas

A aproximação de Bohr com ondas distorcidas consiste num mecanismo de se reduzir a perturbação, de forma que ainda seja possível usar teoria de perturbação em primeira ordem. O preço que se paga é que as ondas planas precisam ser substituídas por ondas distorcidas. A DWBA consiste em se escrever o hamiltoniano total como

$$\mathcal{H} = [\mathcal{H}_A + \mathcal{H}_P + V(r_0)] + [\mathcal{H}' - V(r_0)],$$

supor que o hamiltoniano não perturbado é dado por  $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_P + V(r_0)$ , e tratar  $\mathcal{H}'' = \mathcal{H}' - V(r_0)$  como uma perturbação. Nesse caso, o elétron projétil passa a respeitar a equação de Dirac com um potencial  $V(r_0)$ , isto é,

$$[c\boldsymbol{\alpha}_0 \cdot \mathbf{p} + (\boldsymbol{\beta}_0 - 1)m_e c^2 + V(r_0)] \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0) = E \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0)$$

cujas soluções  $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0)$  são ondas planas distorcidas. As funções de onda atômicas não se modificam, pois o potencial  $V(r_0)$  introduzido só depende das variáveis do projétil.

Com uma escolha criteriosa de  $V(r_0)$ , pode-se fazer a nova perturbação,  $\mathcal{H}' - V(r_0)$ , bem menor que a perturbação original,  $\mathcal{H}'$ . Em geral, adota-se  $V(r_0) = V_T(r_0)$ , o potencial auto-consistente que se adota na hamiltoniana do átomo neutro. Isso corresponde a levar em conta que o elétron projétil

também sente o efeito do potencial nuclear.

A introdução de ondas planas distorcidas causa problemas de natureza numérica para se lidar com o termo de interação transversal,  $\mathcal{H}^T$ , da hamiltoniana de interação. Por isso, é usual que se adote [5, 1]

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_k) \approx \mathcal{H}^L(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_k)$$

nos cálculos com DWBA. Feitas essas modificações, determina-se a seção de choque de ionização da mesma forma que na PWBA.

Ignorar  $\mathcal{H}^T$  se justifica, pois, cada matriz de Dirac no termo de interação transversal dá origem a um fator de  $v/c$ , onde  $v$  é a velocidade da partícula em questão, de forma que este termo só tem relevância se tanto o elétron atômico quanto o elétron incidente tiverem velocidades relativísticas [5]. Como a DWBA é usada para determinar a seção de choque de ionização para elétrons com energia próxima ao limiar de ionização, essa condição é satisfeita no caso da ionização de elementos de número atômico baixo, para os quais os elétrons das camadas mais internas não são relativísticos. Conclui-se, portanto, que o formalismo baseado em DWBA pode, em princípio, não fornecer bons resultados para se calcular a seção de choque de ionização de camadas internas de elementos pesados, para os quais os elétrons mais fortemente ligados possuem velocidades relativísticas e, além disso, possuem energia de ligação que requer que o projétil seja relativístico para que haja ionização.

Outros problemas de natureza numérica limitam a aplicação do formalismo DWBA para elétrons com grandes energias. Em geral, os cálculos baseados em DWBA limitam-se a energias do elétron incidente que não excedem 10 vezes a energia de ionização da camada em questão [1].

Os resultados do trabalho de Bote e Salvat podem ser aproximados por fórmulas analíticas simples, com parâmetros que dependem de  $Z$  e da camada atômica ionizada [8].

## 2.4 Modelos semi-empíricos

Nesta seção é feita uma brevíssima discussão de alguns modelos semi-empíricos usados para determinar a seção de choque de ionização da camada  $K$  de um átomo qualquer. Apresentamos os modelos de Kolbenstvedt, Hippler e RBEB.

O modelo de Hippler [9] considera a ionização da camada  $K$  e é baseado na PWBA. Ele desconsidera a troca de fótons virtuais e faz um cálculo não relativístico para um átomo hidrogenóide, para o qual a intensidade de oscilador generalizada longitudinal é analítica e depende da energia de ligação da camada  $K$ . Para aplicar os resultados a um átomo qualquer, substitui-se a energia de ligação da camada  $K$  do átomo hidrogenóide pela energia de ligação empírica da camada  $K$  do elemento em questão. Além disso, Hippler introduz modificações empíricas para levar em conta efeitos de indistinguibilidade entre os elétrons projétil e secundário. Este modelo também leva em conta os efeitos de distorção, que surgem quando o elétron projétil é acelerado pelo potencial eletrostático do núcleo atômico. A correção introduzida para levar em conta os efeitos de distorção é conhecida como *correção de Coulomb*. Por conta das modificações introduzidas no formalismo PWBA, o modelo de Hippler é conhecido na literatura como PWBA-C-Ex, onde a letra C indica a correção de Coulomb e Ex indica a correção relativa aos efeitos de indistinguibilidade (exchange). A intensidade de oscilador generalizada de um átomo hidrogenóide, apesar de analítica, é bastante complexa, de forma que o cálculo da seção de choque de ionização requer uma dupla integração numérica, nas variáveis  $W$  e  $Q$ , definidas pela Equações 2.1 e 2.2, respectivamente.

Kolbenstvedt desenvolveu um modelo simples [10] para calcular a seção de choque de ionização da camada  $K$ . Ele divide as colisões entre próximas e distantes, de acordo com o parâmetro de impacto da colisão. Para colisões próximas, nas quais há grande transferência de energia, ele calcula a seção de choque de ionização com base na fórmula de Møller para o espalhamento de dois elétrons livres. No caso de colisões distantes, Kolbenstvedt usa o método de fótons virtuais, no qual o campo eletromagnético do elétron incidente é

substituído por um espectro de fótons virtuais, que ionizam o átomo por efeito fotoelétrico. Essa ionização devida a fótons virtuais corresponde às transições devidas ao termo de interação transversal presente nos modelos *ab initio*. Em seu modelo, Kolbenstvedt usa a seção de choque de efeito fotoelétrico da camada  $K$  do átomo de hidrogênio. A generalização para um átomo qualquer é feita substituindo-se a energia de ligação da camada  $K$  pela energia de ligação experimental da camada  $K$  do átomo em questão. A seção de choque total é obtida somando as contribuições das colisões próximas e distantes. O resultado é uma fórmula analítica simples, que necessita como parâmetro apenas a energia de ligação da camada  $K$  do átomo em questão.

Usando um modelo de encontro binário, conhecido pela sigla RBEB (*relativistic binary-encounter Bethe*), Kim e colaboradores [11] desenvolveram uma fórmula analítica simples para a seção de choque de ionização por impacto de elétrons. Essa fórmula recebe como parâmetro apenas a energia de ionização e a energia cinética média da camada ionizada. Tal como o modelo de Kolbenstvedt, o modelo de encontro binário divide as colisões entre próximas, nas quais há grande transferência de energia, e distantes, nas quais há pouca transferência de energia. Para elétrons incidentes com energia próxima ao limiar de ionização, a contribuição dominante à seção de choque provém das colisões próximas, que podem ser modeladas usando-se a seção de choque de Møller [11]. Quando a energia do elétron incidente é bem maior que o potencial de ionização, a contribuição dominante à seção de choque é devida ao termo de interação transversal (troca de fótons virtuais), cuja contribuição à seção de choque diferencial (SCD) na perda de energia foi calculada por Bethe [11]. No modelo de encontro binário, a SCD na perda de energia é calculada como uma média ponderada entre as SCD de Møller e de Bethe, onde os fatores de ponderação, que dependem da energia do elétron incidente, são escolhidos de forma que a seção de choque total possua valores assintóticos consistentes com os cálculos de Bethe e Møller. A vantagem em relação aos modelos de Hippler e Kolbenstvedt consiste no fato de esse modelo também servir, pelo menos em princípio, para calcular a seção de choque de ionização de outras camadas atômicas, além da  $K$ .



# Capítulo 3

## Método Experimental

O experimento foi realizado no acelerador de elétrons do Laboratório de Acelerador Linear do IFUSP. Para tanto, foi usada a recém construída linha de 1,9 MeV deste acelerador, cujo objetivo era justamente a realização de estudos sobre a interação de elétrons com a matéria. A detecção dos raios x emitidos por conta da ionização foi feita com detectores semicondutores de germânio hiperpuro projetados para uso com fótons nessa faixa de energia.

Este capítulo descreve o arranjo experimental e os procedimentos usados para a determinação de  $\sigma_K$  do Au e Bi para elétrons com energia entre os respectivos potenciais de ionização e 100 keV. A seção 3.1 contém uma breve descrição do arranjo experimental e a seção 3.2 descreve a metodologia empregada.

### 3.1 Arranjo experimental

#### 3.1.1 Linha de baixa energia do Microtron do IFUSP

O sistema injetor do microtron do IFUSP fornece um feixe de elétrons de 1,9 MeV. Um dipolo magnético, com câmara de vácuo em forma de Y, permite inserir o feixe no microtron *booster*, onde sua energia é elevada até 5 MeV, ou ser desviado para a linha de 1,9 MeV, onde há uma câmara de alvos, que permite a realização de experimentos envolvendo a interação de elétrons com a matéria. A Figura 3.1 mostra um esquema da linha de feixe de baixa

energia. Ela é composta de um tubo de aço que passa por cinco quadrupolos magnéticos, o dipolo magnético seletor, dois monitores de posição, uma fenda de Al associada a uma blindagem de chumbo e uma câmara de irradiação com um copo de Faraday.

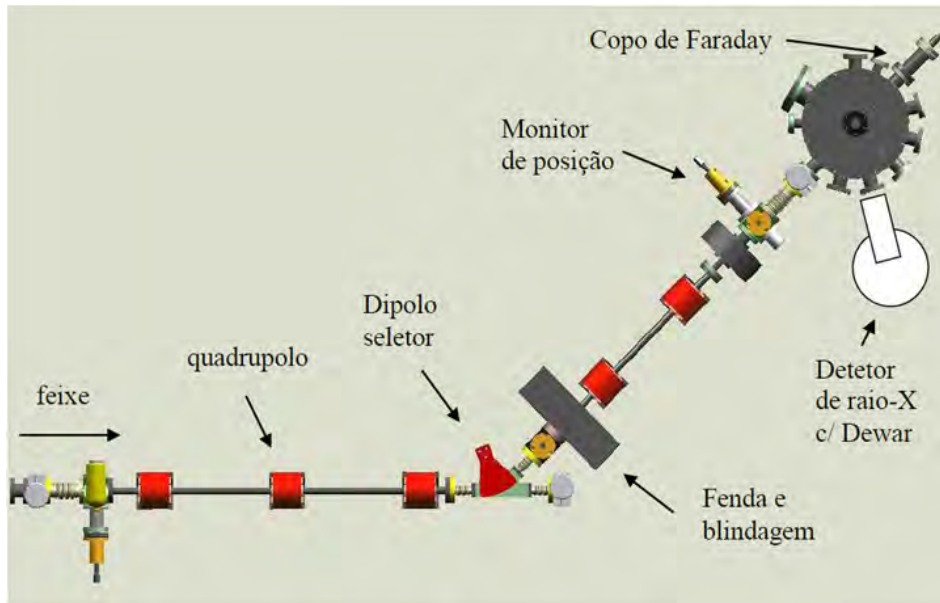


Figura 3.1: Esquema da linha de feixe de baixa energia do Mícrotron do IFUSP. Um dipolo magnético permite escolher se o feixe irá para a linha de baixa energia ou para o Microtron *booster*. Uma vez na linha de baixa energia, o uso de dois quadrupolos magnéticos permite que o feixe seja focalizado no centro de uma câmara de irradiação. Maiores detalhes podem ser encontrados na referência [12].

A princípio, o feixe, proveniente do sistema injetor, é devidamente focalizado com o uso de um triplo de quadrupolos magnéticos; a seguir, ele pode ser inserido no microtron *booster* ou ser desviado pelo dipolo magnético para a linha de baixa energia. Uma vez na linha de 1,9 MeV, o feixe passa por uma fenda de Al, depois por mais dois quadrupolos focalizadores até finalmente atingir a câmara de irradiação. Um monitor de posição permite a observação do feixe antes de ele entrar na câmara de irradiação. A tampa da câmara de irradiação contém um suporte para os alvos e um monitor de posição. Um dispositivo pneumático permite que o alvo ou o monitor de posição seja colocado no centro da câmara, onde podem ser atingidos pelo feixe, ou que ambos fiquem suspensos, permitindo que o feixe passe livre-

mente pela câmara, situação em que ele é quase completamente coletado pelo copo de Faraday. No entanto, quando o alvo está no centro da câmara, o feixe diverge ligeiramente ao atravessá-lo e apenas uma fração de sua carga é coletada no copo de Faraday.

O copo de Faraday em questão foi projetado com o objetivo de minimizar a produção de radiação de freamento. A blindagem de chumbo no entorno da fenda de Al, posicionada logo após o dipólo magnético, é necessária para absorver a radiação de freamento emitida pelos elétrons caso colidam com a fenda.

O canhão deste acelerador foi projetado para fornecer um feixe com energia de 100 keV ao sistema injetor que, com uso de um sistema de picotamento e empacotamento e duas estruturas aceleradoras, é responsável por elevar a energia dos elétrons até 1,9 MeV. Os dipolos e quadrupolos são configurados de maneira a se focalizar o feixe de 1,9 MeV no centro da câmara de irradiação.

Com as cavidades aceleradoras desligadas, quando os elétrons têm apenas a energia fornecida pelo canhão, pode-se reconfigurar as correntes nos quadrupolos e dipolos de maneira a focalizar o feixe no centro da câmara de irradiação<sup>1</sup>. Nesse caso, o acelerador pode fornecer um feixe com energia entre 50 e 100 keV, dependendo da tensão aceleradora a que o feixe é submetido antes de entrar no sistema injetor.

Além da tampa que permite o posicionamento do alvo em seu centro, a câmara de irradiação tem uma outra, na qual está anexado um suporte para as fontes de calibração, permitindo o posicionamento delas no seu centro.

A câmara de irradiação contém janelas de alumínio que permitem a colocação de detectores em ângulos de 15, 30, 45, 60, 90 e 120 graus em relação à direção do feixe de elétrons.

A corrente de feixe pode ser variada desde 0,1 nA até cerca de 1  $\mu$ A.

---

<sup>1</sup>A linha de baixa energia do microtron do IFUSP foi construída para a realização de experimentos com um feixe de 1,9 MeV, proveniente do sistema injetor. Com as cavidades aceleradoras desligadas, a configuração dos dipolos e quadrupolos deve ser alterada, caso contrário o feixe não é focalizado no centro da câmara de irradiação.

### 3.1.2 Arranjo para a detecção de raios x

O arranjo para a medição dos raios x consiste no detetor de estado sólido, associado a módulos eletrônicos e a um micro-computador. O detetor consiste de um cristal de germânio hiperpuro submetido a um campo elétrico. Quando um fóton de raio x ou gama chega ao detetor, ele pode interagir com um dos elétrons do cristal, gerando um sinal elétrico cuja amplitude depende da energia do fóton incidente.

Uma fonte de tensão fornece a diferença de potencial necessária para o funcionamento do detetor, -1 kV. Os sinais provenientes do detetor passam por um pré-amplificador, presente na cápsula do detetor, e por um amplificador, até serem enviados para o Conversor Analógico Digital (CAD), que é responsável pela digitalização e histogramação dos sinais elétricos, feita de acordo com a voltagem de pico do sinal. Por fim, um micro-computador associado a um software é responsável por armazenar o histograma na forma de um arquivo. A Figura 3.2 mostra um esquema do sistema de aquisição.

A detecção dos raios x foi feita com uso de um detetor HPGe (ORTEC, 1000 Series Low Energy Photon Spectrometer), de 5 cm<sup>2</sup> de área e 1 cm de espessura. Foi usado um amplificador de espectrometria (modelo 572 da ORTEC) com 2  $\mu$ s de tempo de formação de pulso, rejeição de empilhamento e um CAD (modelo 927 da ORTEC) com 1,25  $\mu$ s de tempo de conversão. O software MAESTRO foi usado, em conjunto com o CAD, para a geração dos espectros, que foram obtidos como arquivos de extensão CHN. Um pulsador de 60 Hz foi usado para controlar o tempo de contagem. Simultaneamente à aquisição do espectro, a carga coletada pelo copo de Faraday era integrada e gravada num contador.

### 3.1.3 Alvos, suportes, fontes de calibração e blindagem

Foram usados alvos auto-suportáveis de Au, Bi e Ag produzidos no Laboratório de Produção de Alvos do Pelletron. Eles foram feitos por evaporação metálica sobre filmes finos de carbono de 10  $\mu$ g/cm<sup>2</sup>. Os filmes foram montados em molduras de fibra de carbono de 0,8 mm de espessura que foram suspensas no centro da câmara de irradiação pelo suporte de alumínio.

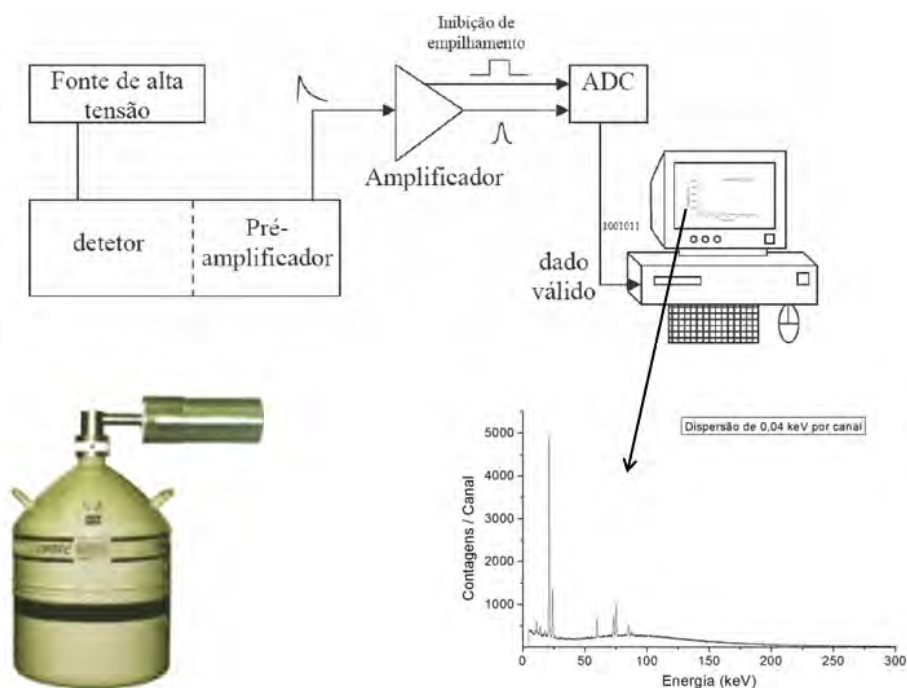


Figura 3.2: Diagrama esquemático do sistema de aquisição com um exemplo de espectro e uma fotografia de um detector HPGe de raios x. O sinal proveniente do detector passa pelo pré-amplificador, pelo amplificador e é enviado ao conversor analógico digital, que faz a histogramação dos sinais. Um micro-computador associado a um software gera o histograma na forma de um arquivo.

A calibração do sistema de aquisição foi feita com uso das seguintes fontes radioativas:  $^{241}\text{Am}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{133}\text{Ba}$ ,  $^{152}\text{Eu}$ ,  $^{207}\text{Bi}$ . As fontes de Césio e Amerício foram produzidas no IPEN e calibradas no Laboratório de Metrologia Nuclear, as demais são do fabricante Amersham. A Figura 3.3 mostra a fonte de  $^{241}\text{Am}$ , o alvo de Bi e seus respectivos suportes.

Para quantificar corretamente a área dos picos de raios x característicos emitidos no processo de ionização, é necessário reduzir ao máximo a radiação de fundo que chega no detector. No presente caso, a maior parte do fundo é radiação de freamento (bremsstrahlung) emitida quando os elétrons são inseridos na linha de baixa energia, quando eles atingem o alvo e quando eles atingem o copo de Faraday. A radiação proveniente do alvo é usada em nossa análise, mas a radiação que não provém do alvo é fundo, que deve ser reduzido ao máximo. Este é o propósito da blindagem. O fundo que a

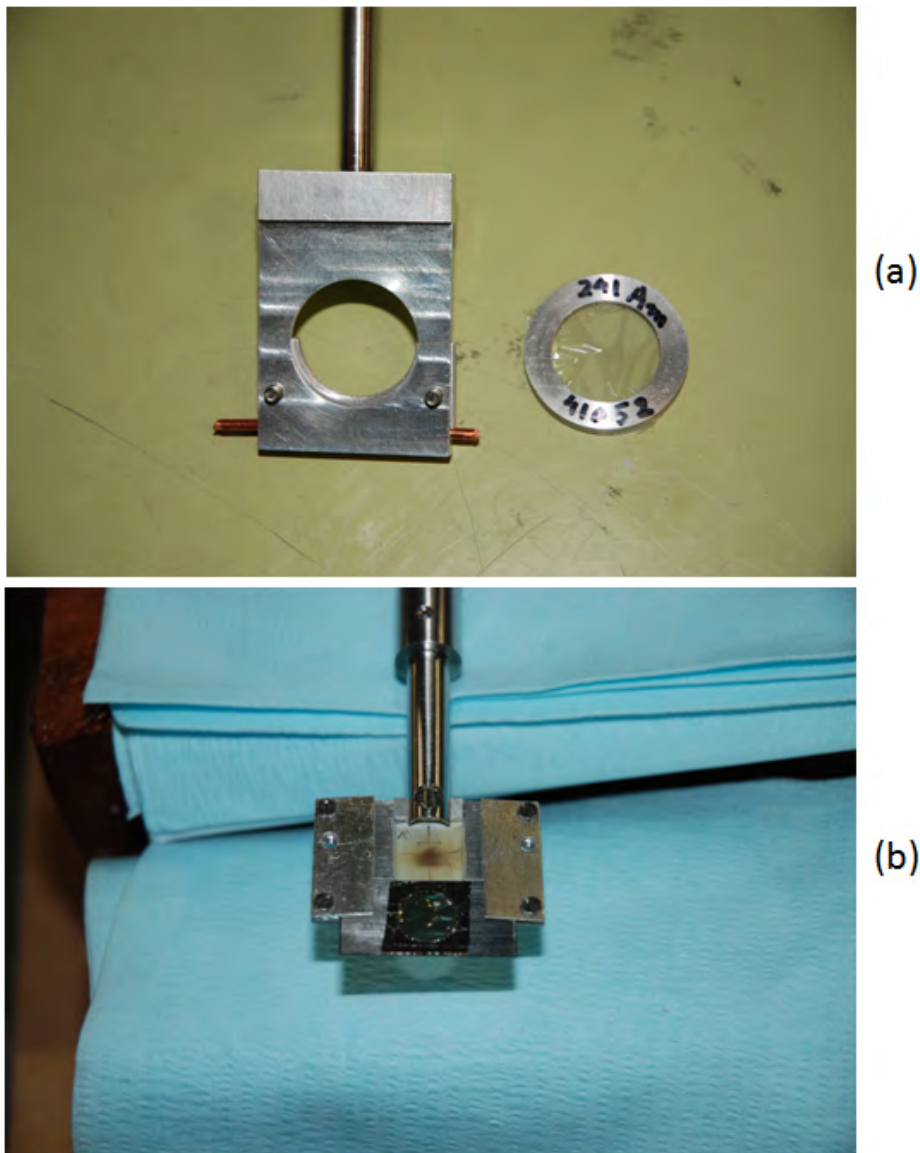


Figura 3.3: (a) Fonte de calibração de  $^{241}\text{Am}$  (produzida no IPEN) e seu suporte de Al. (b) Alvo de Bi montado na moldura de fibra de carbono, que é suspensa pelo suporte de Al. O material na parte superior do suporte é BeO. Ele emite luz quando atingido pelos elétrons, permitindo a verificação da focalização do feixe.

blindagem não consegue evitar deve ser subtraído do espectro antes de sua análise.

A blindagem do detetor foi feita com uma peça de cobre, que cobria o cristal de Ge do detetor, e diversos blocos de chumbo ao redor. A peça

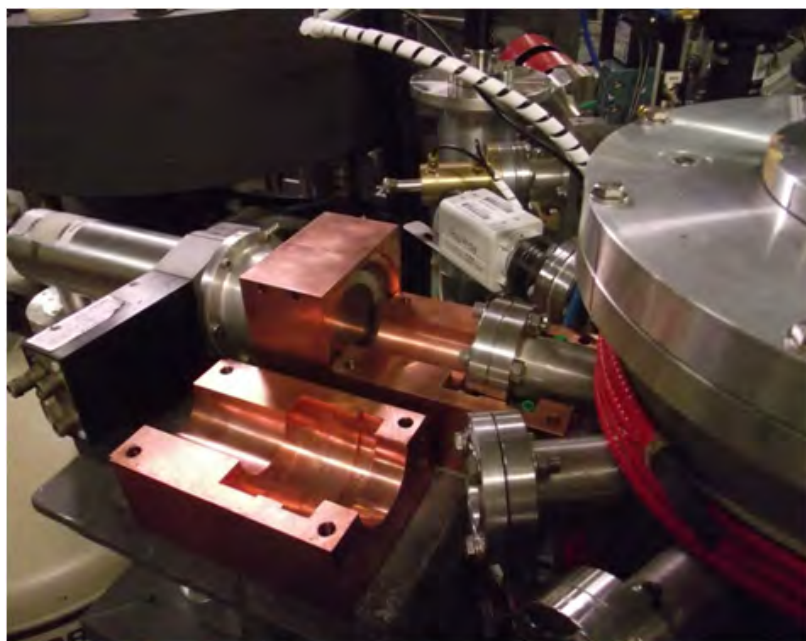
de cobre foi especialmente desenhada para blindar o detetor dos raios x do chumbo provenientes de fotoexcitação do material da blindagem. A Figura 3.4 mostra a blindagem parcialmente montada, onde se pode ver a peça de cobre que envolve o detetor, e também a blindagem completa, na qual o detetor e o bloco de cobre estão totalmente encobertos pelos blocos de chumbo.

Como a maior parte dos elétrons do feixe atinge o copo de Faraday, há grande produção de bremsstrahlung nesse componente, sendo necessário blindá-lo. Isso foi feito colocando-se blocos de chumbo ao seu redor. A Figura 3.4 (b) mostra a blindagem de chumbo envolvendo o copo de Faraday.

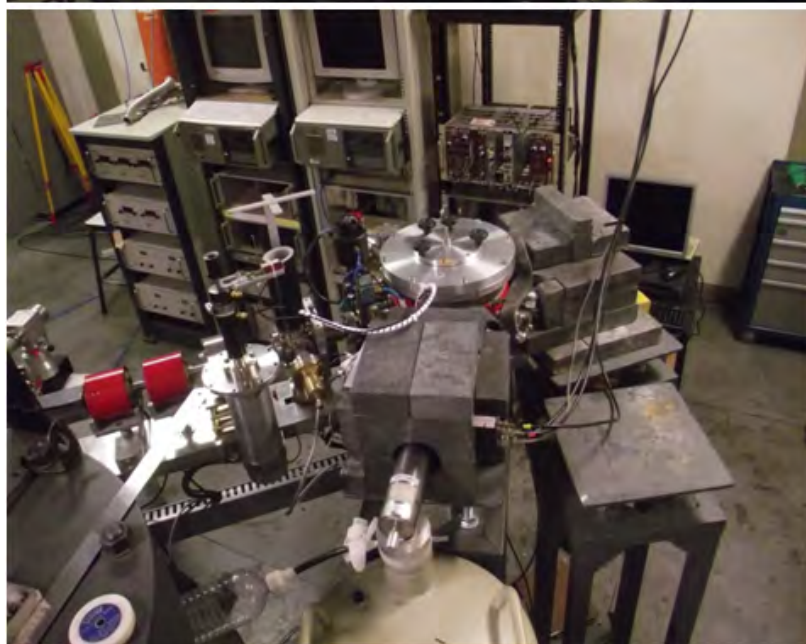
Ao atravessar o alvo, o feixe diverge (com abertura angular de cerca de 5 %) e uma fração dele atinge as paredes (de aço) do interior da câmara, produzindo bremsstrahlung. Para reduzir este efeito uma estrutura de carbono foi instalada junto ao copo de Faraday, de forma que os elétrons que antes atingiam a parede de aço da câmara passam a atingir a estrutura de carbono. A produção de bremsstrahlung cai porque o número atômico do carbono ( $Z = 6$ ) é bem menor que o do ferro ( $Z = 26$ ), e a seção de choque de produção de bremsstrahlung é proporcional à  $Z^2$ . A Figura 3.5 mostra um corte transversal da estrutura de carbono instalada junto ao copo de Faraday.

## 3.2 Procedimento experimental

Os alvos foram posicionados no centro da câmara de irradiação e bombardeados pelo feixe de elétrons com correntes que variavam entre 150 e 250 nA, sempre mantendo o tempo morto do sistema de aquisição menor que 8 % do tempo de contagem. Antes de cada irradiação, verificava-se a focalização do feixe no centro da câmara com o monitor de posição. Os tempos de irradiação variaram entre 20 e 80 minutos e foram escolhidos de forma a se obter espectros com cerca de 10 mil contagens nas regiões de pico. Os raios x emitidos durante a irradiação foram medidos posicionando-se o detetor de raios x na janela de 120° da câmara. A escolha desse ângulo foi feita tendo-se em vista que a emissão de bremsstrahlung é sempre baixa para ângulos traseiros. Para reduzir a atenuação pelo Al, foi construída uma janela de apenas 50  $\mu\text{m}$  de



(a)



(b)

Figura 3.4: Blindagem do detetor de raios x. (a) Vista lateral da blindagem parcialmente montada. Nota-se a presença da peça de cobre blindando o cristal de Ge do detetor. (b) Vista superior da blindagem completamente montada. É possível ver a câmara de irradiação e parte da linha de feixe.



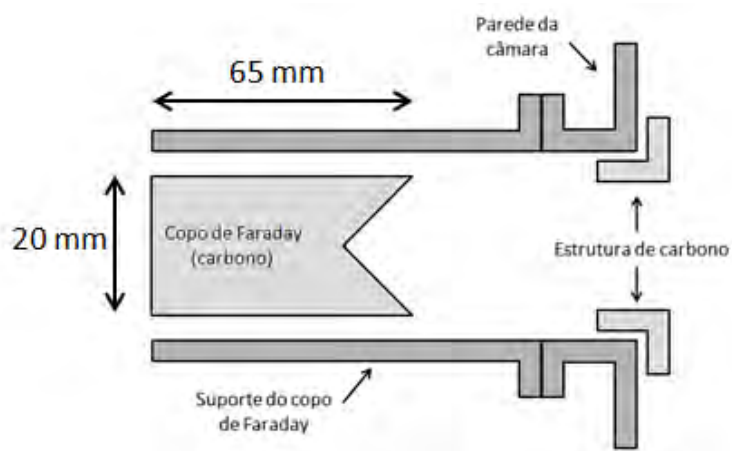


Figura 3.5: Representação do copo de Faraday e da estrutura de carbono usada para reduzir a produção de bremsstrahlung. Essa estrutura consiste numa espécie de anel; a figura mostra um corte ao longo do eixo de simetria cilíndrica.

espessura, para a qual a atenuação para fótons com energias entre 50 e 100 keV pode ser ignorada. O controle da aquisição e a gravação dos espectros em arquivos de extensão CHN foi feita com o uso do software MAESTRO associado ao sistema de CAD. Os parâmetros do acelerador, tais como a corrente e energia do feixe, foram monitorados a partir da sala de controle do acelerador, onde também estava o micro-computador usado para a aquisição dos espectros.

Para cada alvo, foram feitas irradiações variando-se a energia do feixe entre 2 keV acima dos respectivos potenciais de ionização e 100 keV, isto é, irradiou-se o alvo de Au com feixes de energias entre 82 keV e 100 keV, de 2 em 2 keV, e o alvo de Bi com energias entre 92 e 100 keV, também de 2 em 2 keV. É importante ressaltar que esses valores de energia correspondem à *energia nominal* do feixe, selecionados na sala de controle do acelerador, sendo sujeitos a diferenças de até 500 eV em relação a energia média do feixe. No capítulo de análise de dados é feita a descrição de como se determinou a energia de feixe.

Por fim, foram feitas uma série de medições com as fontes radioativas, a fim de obter a curva de eficiência e função resposta do sistema de aquisição. A energia foi calibrada com os espectros obtidos durante as irradiações e o

parâmetro de largura da gaussiana que descreve a forma dos picos de raios x com os espectros obtidos com as fontes de radioativas e durante as irradiações. Os tempos de medição variaram entre algumas horas a até alguns dias, dependendo da atividade da fonte usada, tendo sido determinados de forma a se obter espectros que fornecessem picos cujas áreas tivessem incerteza menor que 1 %.

# Capítulo 4

## Calibração do sistema de medida

A análise quantitativa de histogramas multicanais obtidos em espectrometria de raios x e gama requer que o sistema de aquisição esteja devidamente calibrado. No presente trabalho, para essa finalidade, usou-se um conjunto de fontes radioativas e os próprios espectros obtidos durante as irradiações. As energias e as intensidades dos raios x e gama de interesse foram obtidas da base de dados do Laboratoire National Henri Becquerel [13].

Neste capítulo são detalhados os procedimentos para a calibração de energia, largura, eficiência e função resposta do detetor, bem como os resultados obtidos.

### 4.1 Calibração de energia

Os espectros obtidos em espectrometria de raios x e gama são histogramas multicanais. Um canal  $C$  desse histograma multicanal se relaciona com a energia,  $E$ , dos fótons detetados pela relação  $E = a + bC$ . O parâmetro  $a$  depende da voltagem da linha de base e  $b$  do ganho do amplificador. Dessa forma, a calibração de energia consiste em se atribuir um valor de energia para cada canal do espectro. No presente trabalho, a calibração de energia é importante não apenas para a identificação dos picos presentes nos espectros,

mas também para a caracterização do feixe de elétrons e para a determinação da intensidade do bremsstrahlung produzido durante as irradiações.

A calibração de energia foi feita usando-se os raios x  $L\alpha_1$ ,  $L\alpha_2$ ,  $K\alpha_1$  e  $K\alpha_2$  do Au e Bi e os raios x  $K\alpha_1$  e  $K\alpha_2$  da Ag<sup>1</sup>. Como os picos correspondentes às transições  $L\alpha_1$  e  $L\alpha_2$  não se separavam nos espectros do Au e Bi, e os picos  $K\alpha_1$  e  $K\alpha_2$  não se separavam nos espectros do Ag, usamos, nestes casos, a energia média correspondente às duas transições, obtida como a média das energias de cada transição, ponderada pela correspondente intensidade. Convém ressaltar que a calibração de energia não foi feita com os espectros das fontes radioativas para evitar que eventuais mudanças de ganho do amplificador pudessem alterar os resultados. Essas mudanças de ganho acontecem porque as condições de medida durante as irradiações são diferentes das condições de medidas feitas com as fontes de calibração, nas quais o acelerador está desligado. Em particular não seria recomendável fazer a calibração de energia com as fontes de calibração, pois os espectros obtidos com elas têm uma taxa média de 10 contagens por segundo, enquanto que, durante as irradiações, a taxa média de contagem variava entre  $10^3$  e  $10^4$  contagens por segundo. Essas grandes taxas de contagens podem introduzir pequenas variações de ganho, que introduziriam um erro na determinação da energia média do feixe [14, 15].

A posição dos picos foi obtida usando-se o programa Microvisual, desenvolvido no Laboratório do Acelerador Linear, que ajusta uma gaussiana numa região escolhida do espectro, fornecendo assim a posição e a largura do pico em questão. Para cada elemento: Au, Bi e Ag, trabalhou-se com a soma dos espectros correspondentes às diferentes energias de feixe, para que houvesse mais eventos na região de pico. A Tabela 4.1 mostra os dados usados na calibração de energia.

A princípio, a incerteza na posição em canal foi estimada como sendo  $\sigma_C = 1$  canal para todos os dados da Tabela 4.1. Essa incerteza na variável independente,  $C$ , foi transferida para a variável dependente,  $E$ , e foi realizado um ajuste de uma reta ao conjunto de dados de energia e canal usando o

---

<sup>1</sup>Nas atividades experimentais deste trabalho também se irradiou um alvo de Ag, mas os espectros obtidos foram usados apenas na calibração de energia.

Tabela 4.1: Transição e posição em canal correspondente a cada energia. As energias com suas respectivas incertezas foram obtidas do banco de dados do National Institute of Standards and Technology (NIST) [16].

Transição	$E / \text{keV}$	canal
Au- $L\alpha_{1,2}$	9,7047(4)	366,5
Au- $K\alpha_2$	66,99073(22)	2600,8
Au- $K\alpha_1$	68,80450(18)	2671,2
Bi- $L\alpha_{1,2}$	10,82793(25)	409,4
Bi- $K\alpha_2$	74,8162(9)	2906,1
Bi- $K\alpha_1$	77,1092(22)	2995,8
Ag- $K\alpha_{1,2}$	22,10308(4)	851,9

Método dos Mínimos Quadrados (MMQ). A seguir, foi feita uma estimativa não tendenciosa de  $\sigma_C$ , determinando seu valor como sendo aquele para o qual o  $\chi^2$  do ajuste era igual ao seu correspondente número de graus de liberdade. Foi obtido  $\sigma_C = 0,92$  canal. Essa incerteza, transferida a variável dependente, forneceu  $\sigma_E = 0,024$  keV. A figura 4.1 mostra o resultado do ajuste e um gráfico de resíduos reduzidos. Nota-se que o conjunto de pontos experimentais é bem descrito pelo modelo linear, justificando a sua utilização.

## 4.2 Calibração de largura

A forma dos picos presentes nos espectros de raios x e gama é razoavelmente bem descrito por uma distribuição de probabilidades gaussiana. No que segue, chama-se de *largura* o desvio padrão correspondente a essa gaussiana. A largura de um pico determina a resolução do detetor na correspondente faixa de energia. Neste trabalho, a calibração de largura é usada num modelo de função resposta do detetor.

A largura ao quadrado dos picos e suas correspondentes energias respeitam uma equação linear, dada por [17]  $s^2 = c + dE$ , onde  $c$  é um parâmetro que depende do ruído eletrônico e  $d$  depende das características do detetor usado. Como o ruído eletrônico varia entre medições, usamos as fontes de calibração para a determinação do parâmetro  $d$  citado acima que, suposta-

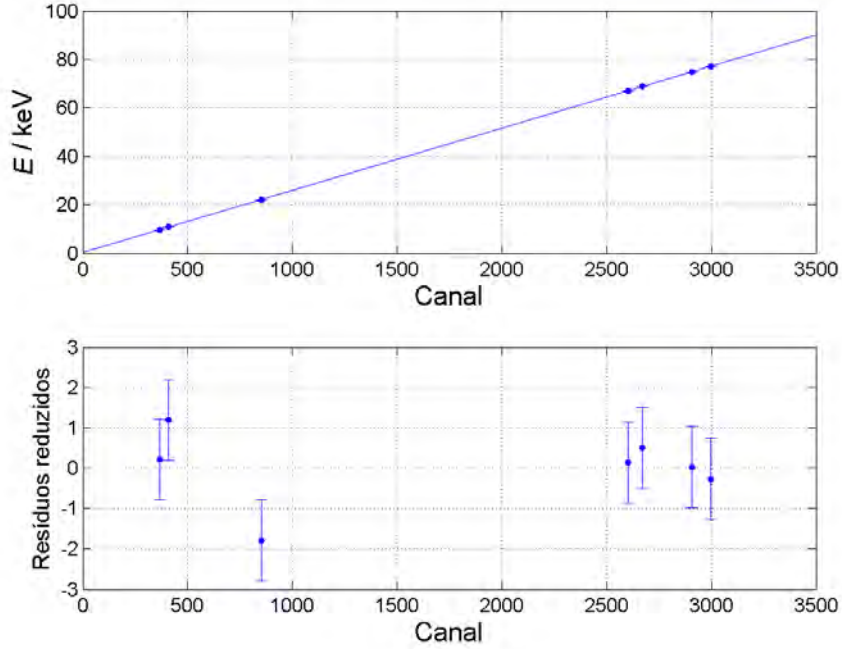


Figura 4.1: (a) Curva de calibração de energia. Foi obtido como resultado do ajuste:  $E / \text{keV} = 0,303(17) + 0,025640(8)C$ , onde  $C$  é o número do canal. (b) Diferença entre o valor ajustado e o experimental, normalizado pela incerteza experimental, como função da energia.

mente, não variou entre as medições. A seguir, usamos os espectros obtidos com os alvos de Au e Bi durante as irradiações para determinar o parâmetro  $c$ , que é diferente para cada um deles. A Tabela 4.2 apresenta os dados usados na calibração de largura.

A largura dos picos foi obtida usando-se o programa Microvisual. A Figura 4.2 mostra o resultado do ajuste com o correspondente gráfico de resíduos reduzidos. O ajuste foi feito somente com os dados obtidos com as fontes de calibração, isto é, não foram usados os raios  $x$   $K$  do Au e Bi. Foi obtido que  $c = 9,1(5) \times 10^{-2} \text{ keV}^2$  e  $d = 3,56(22) \times 10^{-4} \text{ keV}$ . A incerteza na largura ao quadrado,  $\sigma_{s^2}$ , foi estimada como sendo aquela para a qual o  $\chi^2$  do ajuste era igual ao seu correspondente número de graus de liberdade. Foi obtido  $\sigma_{\sigma^2} = 0,0107 \text{ keV}^2$ . Nota-se que o modelo linear para a relação entre  $s^2$  e  $E$  descreve bem o conjunto de pontos experimentais. Conforme dito

Tabela 4.2: Energia e  $s^2$  dos picos usados na calibração de largura. A descrição segue a seguinte notação: quando o raio x ou gama é proveniente de uma fonte de calibração, indica-se o núcleo pai e a energia do raio x ou gama emitido pelo núcleo filho, que não é indicado. No caso dos raios x provenientes dos alvos durante as irradiações, apenas se indica o nome do elemento irradiado (sem indicar a massa atômica) e a energia dos raios x.

Descrição	$E / \text{keV}$	$s^2 / \text{keV}^2$
$^{241}\text{Am} - \gamma$	26,3446(4)	0,0940
$^{241}\text{Am} - \gamma$	59,5409(10)	0,1036
$^{133}\text{Ba} - \gamma$	53,1622(6)	0,1141
$^{133}\text{Ba} - \gamma$	79,6142(12)	0,1246
$^{133}\text{Ba} - \gamma$	80,9979(11)	0,1246
$^{133}\text{Ba} - \gamma$	160,6121(16)	0,1333
$^{133}\text{Ba} - \gamma$	223,237(13)	0,2002
$^{133}\text{Ba} - \gamma$	276,3992(12)	0,1903
$^{133}\text{Ba} - \gamma$	302,8512(5)	0,1964
$^{133}\text{Ba} - \gamma$	356,0134(7)	0,2210
$^{133}\text{Ba} - \gamma$	383,8491(12)	0,2270
$^{207}\text{Bi} - K\alpha_2$	72,80542(24)	0,1208
$^{207}\text{Bi} - K\alpha_1$	74,97011(17)	0,1208
$^{152}\text{Eu} - \gamma$	121,7818(3)	0,1248
$^{152}\text{Eu} - \gamma$	244,6976(8)	0,1668
$^{152}\text{Eu} - \gamma$	344,2789(12)	0,2065
Au - $K\alpha_1$	68,80450(18)	0,1308
Bi - $K\alpha_1$	77,1092(22)	0,1916

anteriormente, o ajuste feito com as fontes de calibração foi usado apenas para fornecer o parâmetro  $d$  da calibração, que é característico do detetor. O parâmetro  $c$ , característico do nível de ruído eletrônico, foi determinado novamente, e separadamente, para os espectros de Au e Bi. Em cada caso,  $c$  foi determinado fazendo-se a reta  $s^2 = c + dE$ , com  $d$  fixado pelo ajuste anterior, passar pelo ponto  $(E_K, s_K^2)$ , onde  $E_K$  é a energia do raio x  $K\alpha_1$  e  $s_K^2$  sua largura em keV, isto é,  $c = s_K^2 - dE_K$ . Foram obtidos  $c = 0,107(11)$  keV<sup>2</sup> para o Au e  $c = 0,164(11)$  keV<sup>2</sup> para o Bi.

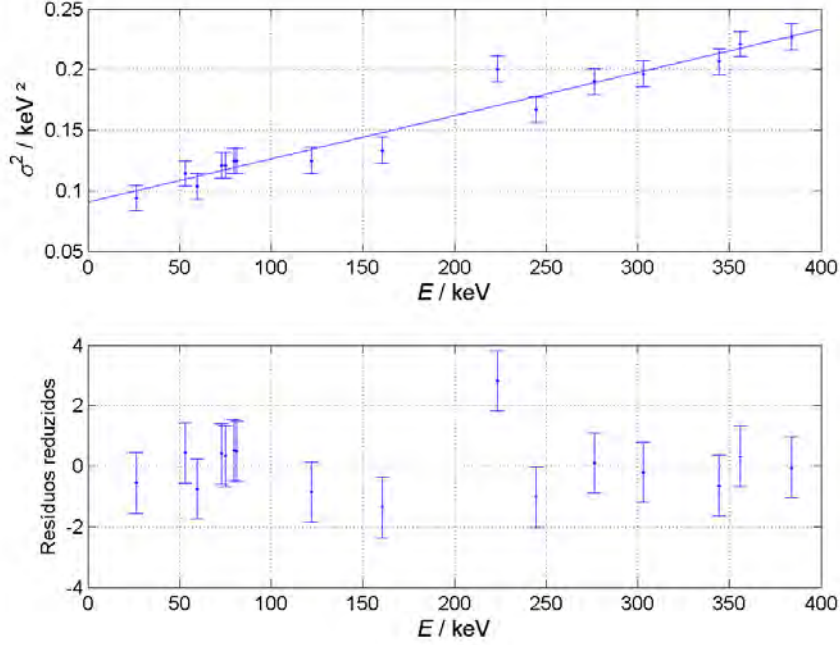


Figura 4.2: (a) Calibração do parâmetro de largura da gaussiana que descreve a forma dos picos. Como resultado do ajuste, foi obtido  $c = 9,1(5) \times 10^{-2} \text{ keV}^2$  e  $d = 3,56(22) \times 10^{-4} \text{ keV}$ .(b) Diferença entre o valor ajustado e o experimental, normalizado pela incerteza experimental, como função da energia.

### 4.3 Calibração de eficiência

A eficiência de detecção  $\varepsilon$  pode ser determinada com o uso de fontes de calibração, que têm atividade conhecida. Se uma dada fonte com atividade  $A$  e probabilidade de decair emitindo fótons  $\gamma$  dada por  $I_\gamma$  for colocada diante do detetor durante um tempo  $\Delta t$ , a eficiência de pico pode ser estimada como [17]

$$\varepsilon(E_\gamma) = \frac{N}{I_\gamma A \Delta t} \quad (4.1)$$

onde  $N$  é a área do pico de energia  $E_\gamma$ .

Um modelo simples para se determinar  $\varepsilon(E)$  consiste em supor que  $\varepsilon$  é dada por [18]

$$\varepsilon(E) = \frac{\Omega}{4\pi} T(E) A(E) \quad (4.2)$$



onde  $\Omega$  é o ângulo sólido entre a fonte de fótons (suposta puntiforme) e o detector,  $T(E)$  é a probabilidade de um fóton atravessar todos os materiais entre a fonte e o volume ativo do detector, e  $A(E)$  é a probabilidade desse fóton ser absorvido no volume ativo do detector.

A probabilidade de absorção é dada por  $A(E) = 1 - \exp(-\mu(E)x)$ , onde  $\mu(E)$  é o coeficiente de absorção do material que do detector para fótons com energia  $E$ , e  $x$  é a espessura média que os fótons atravessam no interior do volume ativo do detector. A probabilidade de o fóton atravessar todos materiais entre a fonte e o detector é dada por  $\prod_i \exp(-\mu_i(E)d_i)$ , onde  $\mu_i$  e  $d_i$  são o coeficiente de absorção e a espessura média do  $i$ -ésimo material localizado entre o detector e a fonte. Os coeficientes de absorção usados no modelo descrito acima foram obtidas do banco de dados do NIST [16].

A curva de eficiência de pico do detector de HPGe,  $\varepsilon(E)$ , foi determinada usando-se os raios x e  $\gamma$  emitidos pelas fontes de calibração relacionadas na Tabela 4.3, que também mostra a eficiência de pico obtida para cada raio x e gama usado na calibração. Os raios x do chumbo provenientes da fonte de  $^{207}\text{Bi}$  puderam ser empregados graças a presença da blindagem de cobre, que prevenia que os raios x provenientes de fotoionização na blindagem de chumbo chegassem ao detector.

Usualmente, as curvas de eficiência de detectores HPGe de raios x,  $\varepsilon(E)$ , são aproximadamente constantes para energias entre 30 e 70 keV, caindo para energias mais altas [17]. No entanto, no presente caso, a curva obtida apresenta um aspecto diferente, conforme é mostrado na Figura 4.3.

Este efeito pode ser explicado supondo-se uma heterogeneidade da espessura de camada morta na face frontal do detector. Foram feitas medidas [19] da camada morta do detector ao longo de sua face frontal e descobriu-se que, em sua região central (diâmetro de aproximadamente 16 mm) o detector apresenta uma camada morta de  $2 \mu\text{m}$ , enquanto que nas extremidades essa espessura chega a abranger todo o comprimento do detector. A Figura 4.4 mostra como a espessura de camada morta do detector varia ao longo de seu volume.

Tendo em vista as considerações feitas acima, o modelo para descrever  $\varepsilon(E)$  foi determinado supondo-se que a curva de eficiência era dada pela

Tabela 4.3: Eficiência de pico,  $\varepsilon$ , para diferentes energias  $E$ . Na descrição indica-se o núcleo pai e a energia do raio x ou gama emitido pelo núcleo filho, que não é indicado.

Descrição	$E / \text{keV}$	$\varepsilon \times 10^4$
$^{241}\text{Am} - \gamma$	13,928	1,16(22)
$^{241}\text{Am} - \gamma$	21,01	1,42(26)
$^{241}\text{Am} - \gamma$	26,3446	1,61(6)
$^{241}\text{Am} - \gamma$	59,5409	1,73(3)
$^{207}\text{Bi} - K\alpha_2$	72,8049	1,88(6)
$^{207}\text{Bi} - K\alpha_1$	74,97	1,90(6)
$^{207}\text{Bi} - K\beta_{3,1}$	84,937	1,92(6)
$^{207}\text{Bi} - K\beta_{2,4} + KO_{2,3}$	87,58	1,86(7)
$^{241}\text{Am} - \gamma$	30,86	1,65(3)
$^{241}\text{Am} - \gamma$	35,173	1,70(3)
$^{133}\text{Ba} - \gamma$	53,1622	1,76(4)
$^{133}\text{Ba} - \gamma$	80,998	1,97(3)
$^{241}\text{Am} - \gamma$	39,91	1,71(5)
$^{241}\text{Am} - \gamma$	45,68	1,72(5)
$^{152}\text{Eu} - \gamma$	121,782	1,53(5)
$^{152}\text{Eu} - \gamma$	244,6974	0,41(12)
$^{152}\text{Eu} - \gamma$	344,2785	0,22(6)
$^{133}\text{Ba} - K\alpha_{2,1}$	32,061	1,74(4)
$^{133}\text{Ba} - K\beta_{3,1}$	36,567	1,77(4)

soma das eficiências de dois detetores: um central, com um determinado parâmetro de ângulo sólido e uma espessura de camada morta, e um outro mais externo, com a forma de um cilindro oco (a cavidade preenchida pelo primeiro detector), com parâmetros de ângulo sólido e camada morta diferentes do primeiro detector. Levou-se em conta o efeito de escape do raio x  $K\alpha$  do Ge, que consiste basicamente em se multiplicar  $\varepsilon$  por  $1 - P(E_K)$ , onde  $P(E_K)$  é a probabilidade dos raios x  $K$  escaparem da região ativa do cristal [18]. Além disso, considerou-se a absorção dos fótons pelas janelas de Al e Be e pelo ar. O efeito dessa absorção é relevante para fótons com energia menor 50 keV.

Conforme mostra a Figura 4.3, esse modelo descreve bem o estranho comportamento da curva de eficiência. A fim de tornar o uso da calibração

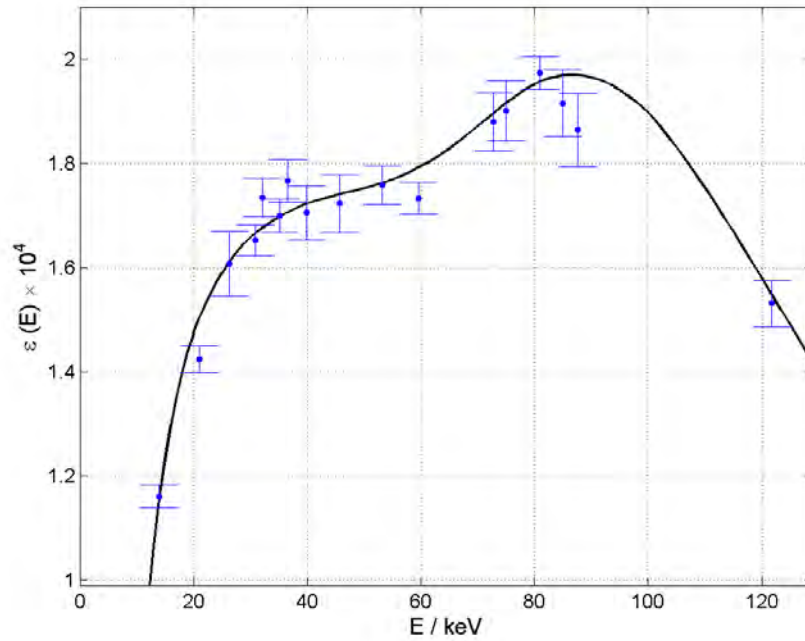


Figura 4.3: Calibração de eficiência. Dados experimentais e modelo.

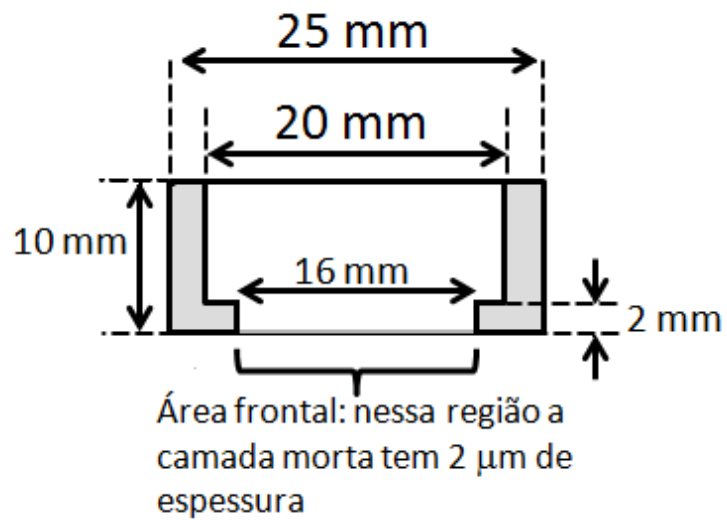


Figura 4.4: Esquema do cristal do detector de raios x mostrando a espessura de camada morta (em cinza) ao longo do volume do detector. A Figura mostra um corte transversal ao longo do eixo de simetria cilíndrica do detector.

de eficiência mais prático, utilizou-se o citado modelo para se determinar a eficiência de 60 até 110 keV, com passos de 1 keV e foram feitas interpolações lineares com estes dados para se obter  $\varepsilon(E)$  para qualquer valor de  $E$  nessa faixa de energia.

## 4.4 Calibração da função resposta

A função resposta do detetor,  $R(E, E_0)$ , nos permite saber o fluxo energético dos fótons que deram origem a um determinado espectro em um histograma multicanal. No presente trabalho, foi feito um modelo simples para a função resposta do detetor HPGe, baseado na observação de espectros de fontes de calibração. A Figura 4.5 mostra o espectro de uma fonte de  $^{152}\text{Eu}$ .

Nota-se que os fótons de 122 keV do Európio, além de formar um pico distribuído ao redor dessa energia, também dão origem a um fundo contínuo à esquerda do pico. A observação do espectro sugere o seguinte modelo para  $R(E, E_0)$

$$R(E, E_0) = \varepsilon(E_0) \left[ \frac{A}{\sqrt{2\pi} s} e^{-(E-E_0)^2/2s^2} + P(E, E_0) \right] \quad (4.3)$$

onde a função *pedestal*,  $P(E, E_0)$ , é dada por

$$P(E, E_0) = A \begin{cases} h, & \text{se } E < E_0 - d \\ h + m(E - E_0 + d), & \text{se } E_0 - d \leq E \leq E_0 \\ 0, & \text{se } E > E_0 \end{cases} \quad (4.4)$$

onde  $m$ ,  $h$  e  $d$  são parâmetros que dependem da energia e  $A$  e  $s$  são a área e a largura do pico em questão. Nesta seção será apresentada a calibração da função resposta com a utilização de fontes de calibração, isto é, a determinação de curvas  $m(E)$ ,  $h(E)$  e  $d(E)$  a partir de espectros experimentais. A Figura 4.5 indica estes parâmetros no espectro do  $^{152}\text{Eu}$ . Para realizar a calibração, foram usados os raios x e gama relacionados na Tabela 4.4, escolhidos por terem energias na região de interesse (entre 50 e 150 keV) e por apresentarem espectros nos quais os parâmetros da função  $P(E, E_0)$  podem

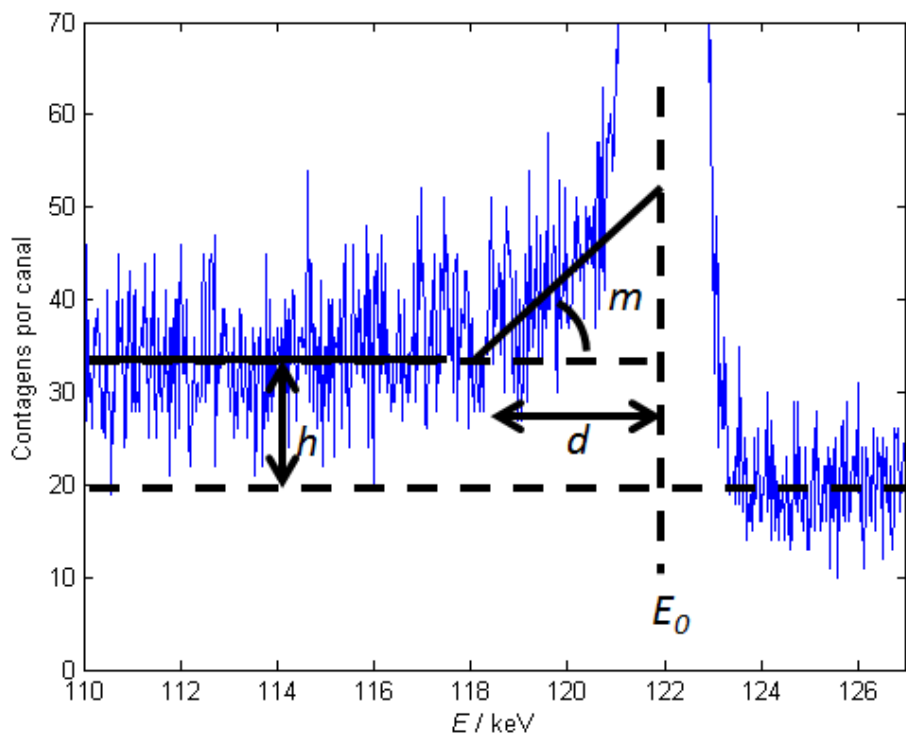


Figura 4.5: Modelo para a função resposta.

ser extraídos com facilidade.

Para a determinação de  $h$  correspondente a cada energia, ajustou-se uma constante na região à esquerda do pico. O parâmetro  $d$  foi determinado conforme é indicado na Figura 4.5 e em seguida o parâmetro  $m$  foi determinado como o coeficiente angular da reta ajustada à região imediatamente à esquerda do pico, entre  $E_0 - d$  e  $E_0$ .

Tabela 4.4: Valores dos parâmetros da função resposta medidos a diferentes energias.

Descrição	$E / \text{keV}$	$h \times 10^3 / (\text{keV})^{-1}$	$d / \text{keV}$	$m \times 10^3 / (\text{keV})^{-2}$
$^{241}\text{Am} - \gamma$	59,5	9,2(7)	2,05(13)	8,9(8)
Pb - $K\alpha_1$	74,1	10,5(7)	2,51(13)	
$^{133}\text{Ba} - \gamma$	81	9,4(7)	2,48(13)	
$^{152}\text{Eu} - \gamma$	121,8	11,3(7)	3,00(13)	4,3(5)

O parâmetro  $m$  não pode ser medido para os raios x  $K\alpha$  do Pb, nem

para os raios gama de 81 keV que seguem o decaimento do  $^{133}\text{Ba}$ , ambos dupletos. Isso ocorre porque esse parâmetro é determinado numa região muito próxima ao pico, de forma que, no caso de um duplete, não é possível separar as contribuições de cada pico. A Figura 4.6 abaixo apresenta a curva de calibração obtida para os parâmetros  $h$  e  $d$ . As incertezas foram estimadas como sendo aquelas para as quais o  $\chi^2$  do ajuste era igual ao seu correspondente número de graus de liberdade. Como resultado do ajuste de uma reta, foram obtidos  $h(E) \times 10^3 = 0,0307 \times E + 7,52$  em  $(\text{keV})^{-1}$  para  $E$  em keV e  $d(E) = 0,0139 \times E + 1,43$  em keV para  $E$  em keV. Os dois pontos  $(E, m)$  foram usados para se estimar uma reta de calibração para  $m(E)$ . Foi obtido  $m(E) \times 10^3 = 13,3 - 0,0736 \times E$  em  $(\text{keV})^{-2}$  para  $E$  em keV.

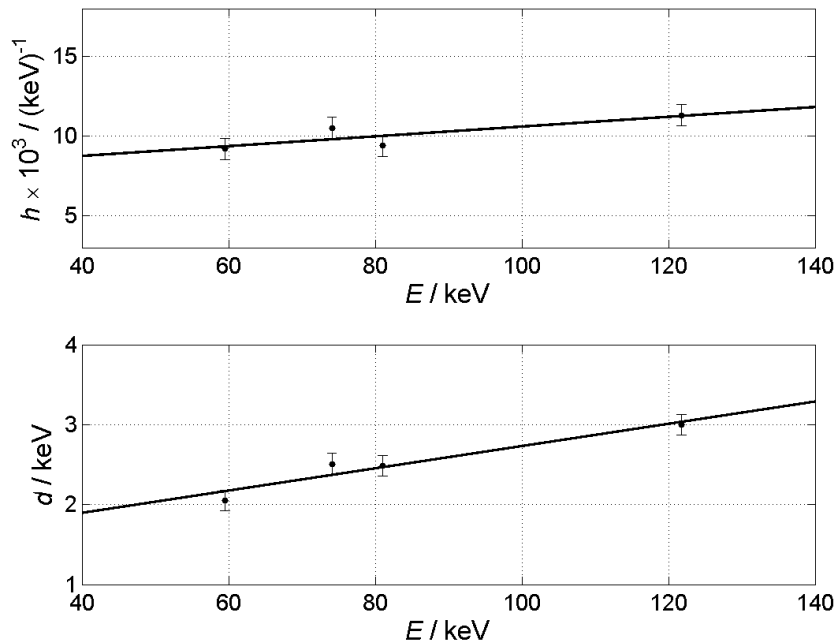


Figura 4.6: Valores dos parâmetros da função resposta, definidos na Equação 4.3. As linhas cheias correspondem a retas ajustadas pelo MMQ.

A Figura 4.7 mostra uma comparação entre o modelo e um espectro obtido com uma fonte de  $^{241}\text{Am}$ . Nota-se que o modelo descreve o espectro experimental de forma razoável, havendo maior concordância apenas na região à esquerda do pico. Conforme veremos nas próximas seções, o que realmente

importa é que a região à esquerda do pico seja bem descrita. É importante ressaltar que os parâmetros da função pedestal têm a pretensão de descrever a função resposta do detetor somente até 5 keV abaixo de um dado pico, não valendo para energias menores. No espectro do Amerício, nota-se que este modelo encontra problemas principalmente no ajuste do pico, que é deformado e assimétrico, mas a área total é a mesma. Conforme veremos adiante, os efeitos da função pedestal representam uma contribuição menor que 5 % na determinação da seção de choque, de forma que não vale a pena melhorar a modelagem da função resposta.

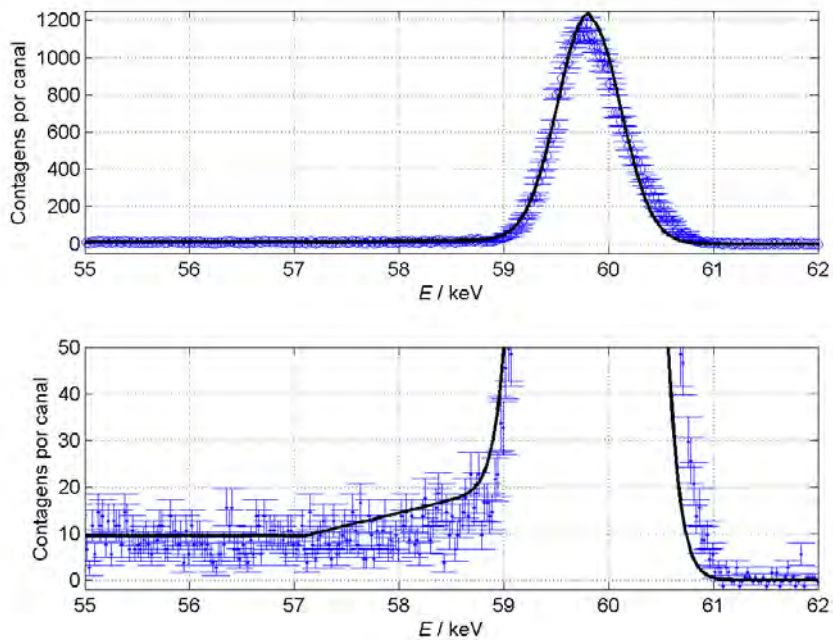


Figura 4.7: Comparação entre o modelo de função resposta e um espectro experimental obtido com uma fonte de  $^{241}\text{Am}$ . Os pontos representam o resultado experimental e a linha cheia o modelo de função resposta, descrito pela Equação 4.3.





# Capítulo 5

## Análise de dados

Neste capítulo são detalhados os procedimentos usados para determinar a seção de choque de ionização da camada  $K$  a partir dos espectros experimentais obtidos durante as irradiações. O método de análise empregado requer o conhecimento da energia e dispersão do feixe de elétrons<sup>1</sup>. A seção 5.1 descreve como usar a função resposta do detetor para uma precisa determinação desses parâmetros. Também são apresentados alguns métodos, baseados em modelos simples, que permitem estimá-los de forma razoável. A seção 5.2 descreve o método empregado para a determinação da seção de choque de ionização da camada  $K$  com base na área dos picos de raios x característicos e no bremsstrahlung de elétrons presente nos espectros.

### 5.1 Caracterização do feixe de elétrons

Os parâmetros do feixe de elétrons de interesse neste trabalho são sua energia e dispersão, que são determinados pela tensão no canhão de elétrons do sistema injetor e pela perda de energia que os elétrons sofrem no interior do alvo. É razoável supor que a função densidade de probabilidade que descreve a energia dos elétrons do feixe seja uma gaussiana, cujo valor médio é a grandeza relevante na determinação da seção de choque de ionização como função da energia. O desvio padrão dessa gaussiana deve-se à pequena

---

<sup>1</sup>Energia e dispersão do feixe referem-se a energia média e o desvio padrão da distribuição gaussiana que descreve a energia dos elétrons no feixe.

flutuação da tensão no canhão com o tempo e à pequena perda de energia<sup>2</sup> que os elétrons sofrem ao atravessarem o alvo.

No que segue, chama-se de *energia nominal* a energia determinada de acordo com a tensão nominal no canhão de elétrons, que difere da energia média por conta de limitações na precisão do controle da tensão do canhão de elétrons.

Nas próximas subseções descrevem-se os métodos usados para determinar a energia e dispersão do feixe durante as irradiações.

### 5.1.1 Estimativa da energia do feixe

Nesta subseção descreve-se como se fez a estimativa inicial para a energia do feixe de elétrons a partir dos espectros experimentais de radiação de frenamento.

A observação de um espectro experimental sugere que se possa estimar a energia do feixe como sendo um ponto de inflexão no espectro na região próxima ao “tip” de bremsstrahlung, isto é, supõe-se que o número de contagens em cada canal  $n$  seja uma função contínua da energia  $E$  correspondente a este canal, e que a energia do feixe corresponda ao ponto de mínimo de  $dn/dE$ . No entanto,  $n(E)$  não é uma função contínua de  $E$  e nem suave, pois, devido às oscilações estatísticas, o número de contagens entre canais vizinhos é muito diferente. Portanto, a aplicação deste método exige que o espectro seja devidamente suavizado, o que foi feito com um filtro triangular, que substitui o número de contagens em cada canal pela média, ponderada pela distância em relação a esse canal, do número de contagens dos canais vizinhos.

A Figura 5.1 mostra um espectro obtido com o alvo de Au com um feixe de elétrons com 100 keV de energia. Neste caso, a energia do feixe foi obtida como sendo  $E_e = 100,17(3)$  keV. Como veremos adiante, este método fornece uma estimativa para a energia do feixe compatível com o método mais sofisticado apresentado a seguir.

---

<sup>2</sup>De acordo com a base de dados de *stopping power* do NIST [16], elétrons de 100 keV perdem, em média, cerca de 100 eV de energia ao incidirem num alvo de Au com espessura de  $2 \times 10^{-6}$  cm, que é a espessura nominal do alvo de Au usado neste trabalho.

É importante ressaltar que somente este método, dentre os que são descritos, requer o procedimento de suavização citado acima. O método de caracterização do feixe descrito na próxima subseção não requer nenhum tipo de suavização no espectro experimental.

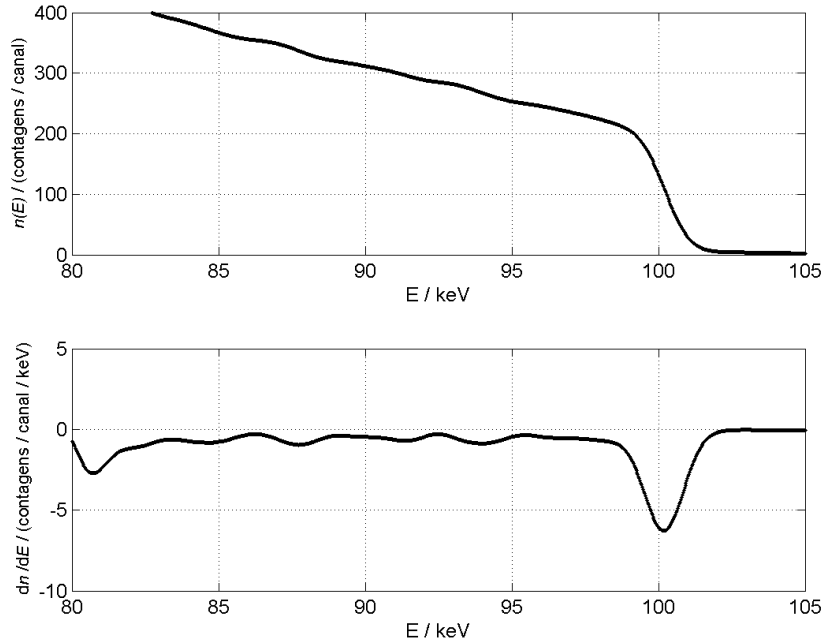


Figura 5.1: (a) Espectro de energia,  $n(E)$ , obtido com o feixe de elétrons de 100 keV incidindo sobre o alvo de Au. (b)  $dn/dE$  versus  $E$ . O ponto de mínimo dessa curva fornece uma estimativa inicial para a energia do feixe.

### 5.1.2 Determinação da energia e dispersão do feixe

Para se determinar a energia do feixe de maneira mais confiável e, além disso, determinar a sua dispersão, é necessário fazer uma hipótese sobre a forma da função,  $f(E)$ , que descreve o contínuo de bremsstrahlung que chega no detector. Entendendo  $f(E)dE$  como o número de fótons que chegam ao detector com energia entre  $E$  e  $E+dE$  e levando em conta os efeitos de detecção, conclui-se que a distribuição efetiva,  $y(E)$ , que se enxerga num histograma

multicanal<sup>3</sup>, é dada por [17]

$$y(E) = \int_{-\infty}^{\infty} R(E, E') f(E') dE' \quad (5.1)$$

onde  $R(E, E')$  é a *função resposta* do detetor em questão. Ela representa o efeito que um fóton com energia  $E'$  produz num canal do espectro correspondente à energia  $E$ . Uma função resposta ideal é dada por

$$R(E, E') = \varepsilon(E') \delta(E - E'), \quad (5.2)$$

onde  $\varepsilon(E')$  é a eficiência intrínseca de detetor para fótons com energia  $E'$ . Assim, num detetor com função resposta ideal, fótons incidentes com energia  $E'$  só produziriam efeito no canal do espectro correspondente a essa energia e com uma intensidade de acordo com a eficiência intrínseca de detecção.

O que se enxerga num histograma multicanal é a discretização de  $y(E)$  em canais, isto é,

$$y_i = \int_{E_i - \Delta/2}^{E_i + \Delta/2} y(E) dE = \int_{E_i - \Delta/2}^{E_i + \Delta/2} dE \int_{-\infty}^{\infty} R(E, E') y(E') dE' \quad (5.3)$$

onde  $E_i$  e  $\Delta$  são a energia e a largura (em keV) correspondente ao  $i$ -ésimo canal. Mudando a ordem da integração e definindo

$$r(E_i, E') = \int_{E_i - \Delta/2}^{E_i + \Delta/2} R(E, E') dE \quad (5.4)$$

chegamos na seguinte expressão para  $y_i$

$$y_i = \int_0^{\infty} r(E_i, E') f(E') dE' \cong \Delta \sum_{j=1}^N r(E_i, E_j) f(E_j) \quad (5.5)$$

onde a integral em  $E'$  foi discretizada ao longo de  $N$  canais do histograma.

---

<sup>3</sup>Na realidade, o que se enxerga num histograma multicanal é a discretização de  $y(E)$  ao longo de canais, o que será incluído no modelo adiante.

Essa expressão pode ser escrita na forma matricial

$$\mathbf{Y} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{F} \quad (5.6)$$

onde  $\mathbf{R}_{ij}=r(E_i, E_j)$  é uma matriz  $N \times N$  e  $\mathbf{F}_j=f(E_j) \Delta$  e  $\mathbf{Y}_i=y_i$  são matrizes  $N \times 1$  (vetores coluna). A Equação 5.6 estabelece uma forma de se fazer uma previsão,  $\mathbf{Y}$ , para o número de contagens num histograma multicanal a partir de  $R(E, E')$  e  $f(E)$  devidamente discretizados ao longo dos canais desse histograma. Essa previsão deve ser comparada com o espectro experimental  $\mathbf{Y}_{\text{exp}}$ . Dessa forma, conclui-se que para prever o número de contagens no histograma multicanal deve-se estabelecer um modelo para a função resposta do detetor,  $R(E, E')$ , e um modelo que para o contínuo de bremsstrahlung,  $f(E)$ , que descreve a intensidade do fluxo de fótons que chegam ao detetor.

Conforme será descrito nas próximas subseções, a função  $f(E)$  também deve depender da energia  $E_e$  e dispersão  $\sigma_e$  do feixe de elétrons, de forma que, na realidade,  $f = f(E_e, \sigma_e; E)$ . Conforme será demonstrado na próxima subseção, pode-se escrever

$$f(E_e, \sigma_e; E) = M B(E_e, \sigma_e; E),$$

onde  $B(E_e, \sigma_e; E)$  é uma função que depende da seção de choque de produção de bremsstrahlung e da distribuição de energia do feixe e  $M$  é um fator que está relacionado com parâmetros do alvo, do feixe e da geometria do experimento. Assim,

$$\mathbf{F}(E_e, \sigma_e) = M \mathbf{B}(E_e, \sigma_e), \quad (5.7)$$

onde  $B_j = B(E_e, \sigma_e; E_j)$  define os elementos do vetor  $\mathbf{B}$ . Substituindo a Equação 5.7 na 5.6, tem-se:

$$\mathbf{Y} = M \mathbf{R} \cdot \mathbf{B}(E_e, \sigma_e). \quad (5.8)$$

A Equação 5.8 estabelece um modelo,  $\mathbf{Y}$ , para o vetor cujas entradas são as contagens no histograma multicanal. Note que este modelo contém três

parâmetros:  $M$ ,  $E_e$  e  $\sigma_e$ , que podem ser estimados comparando  $\mathbf{Y}$  com o espectro experimental  $\mathbf{Y}_{\text{exp}}$ .

Nesse trabalho, esses parâmetros foram determinados pelo MMQ, isto é, como sendo os valores que minimizam a seguinte quantidade

$$Q(E_e, \sigma_e) = \sum_{i=1}^N [(\mathbf{Y}_{\text{exp}})_i - \mathbf{Y}_i]^2 / \sigma_i^2 \quad (5.9)$$

onde  $(\mathbf{Y}_{\text{exp}})_i$  é o valor experimental do número de contagens no  $i$ -ésimo canal do histograma e  $\sigma_i^2 = (\mathbf{Y}_{\text{exp}})_i$  é a estimativa da correspondente variância.

A minimização de  $Q(E_e, \sigma_e)$  pode ser feita da seguinte forma. Atribui-se um valor inicial para  $(E_e, \sigma_e)$  e determina-se  $M$  pelo método dos mínimos quadrados como [20]

$$M = M_{\text{aju}} = (\mathbf{X}^T \cdot \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \cdot \mathbf{X}^T \cdot \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y}_{\text{exp}} \quad (5.10)$$

onde  $\mathbf{X} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{B}$  é a matriz de planejamento do ajuste e  $\mathbf{V}$  é a matriz de covariância de  $\mathbf{Y}_{\text{exp}}$ , estimada como  $\mathbf{V}_{ij} = \delta_{ij} (\mathbf{Y}_{\text{exp}})_i$ . A seguir, calcula-se

$$Q(E_e, \sigma_e) = [\mathbf{Y}_{\text{exp}} - M_{\text{aju}} \mathbf{R} \cdot \mathbf{B}]^T \cdot \mathbf{V}^{-1} \cdot [\mathbf{Y}_{\text{exp}} - M_{\text{aju}} \mathbf{R} \cdot \mathbf{B}] \quad (5.11)$$

a partir da qual se determina  $(E_e, \sigma_e)$  como o ponto de mínimo de  $Q(E_e, \sigma_e)$ .

Para determinar a matriz de covariâncias de  $E_e$ ,  $\sigma_e$  e  $M$  define-se o vetor de parâmetros  $\mathbf{A} = (E_e, \sigma_e, M)$  e calcula-se a matriz  $\mathbf{P}$  como

$$P_{l,m} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} \frac{\partial Y_i}{\partial A_l} \frac{\partial Y_i}{\partial A_m}$$

onde as derivadas são calculadas no ponto que minimiza  $Q(E_e, \sigma_e, M)$ . A matriz de covariância é dada por  $\mathbf{P}^{-1}$  [20].

Vale notar que  $\mathbf{Y}_{\text{exp}}$  é o espectro obtido durante a irradiação com as devidas correções de fundo e empilhamento. Se essas correções não fossem feitas, os correspondentes efeitos teriam de ser incluídos no modelo para o contínuo de bremsstrahlung.

Neste trabalho, foi usado o modelo de função resposta definido na seção

4.4. Na próxima subseção são descritos os dois modelos para  $f(E_e, \sigma_e; E)$  que foram usados neste trabalho.

### 5.1.3 Modelos para o contínuo de bremsstrahlung

Nesta subseção apresentam-se os dois modelos usados para descrever o espectro de bremsstrahlung. A princípio, apresenta-se um modelo que faz uso da Seção de Choque Duplamente Diferencial (SCDD) de produção de radiação de freamento, a seguir, é apresentado um modelo simplificado.

Quando  $N_e$  elétrons, com energia  $E_0$ , atingem o alvo com  $\mathcal{N}$  átomos por unidade de volume e espessura  $\ell$  (suposta pequena), gera-se radiação de freamento e o número de fótons produzidos,  $dN_f$ , que chega ao detector com energia entre  $E$  e  $E+dE$  é dado por

$$dN_f = N_e \mathcal{N} \Omega \ell \frac{d^2\sigma_b}{dE d\Omega}(E_0; E, \theta) dE \quad (5.12)$$

onde  $\Omega$  é o ângulo sólido entre o detector e o alvo,  $d^2\sigma_b/d\Omega dE$  é a SCDD de produção de radiação de freamento e  $E$  é a energia do fóton que é emitido num ângulo  $\theta$  em relação à direção de incidência dos elétrons no alvo. Na realidade, devido à instabilidade do canhão de elétrons e à pequena perda de energia sofrida pelos elétrons no interior do alvo, é mais razoável supor que a energia do feixe de elétrons respeite uma distribuição gaussiana com energia média  $E_e$  e desvio padrão  $\sigma_e$ . Tendo isso em vista, a Equação 5.12 precisa ser modificada, ponderando-se a SCDD pela distribuição gaussiana citada acima. Assim

$$dN_f = N_e \mathcal{N} \Omega \ell \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dE_0 \frac{d^2\sigma_b}{dE d\Omega}(E_0; E, \theta) G(E_e, \sigma_e; E_0) \right] dE \quad (5.13)$$

onde  $G(E_e, \sigma_e; E_0)$  é uma função gaussiana, dada por

$$G(E_e, \sigma_e; E_0) = \frac{e^{-(E_0 - E_e)^2 / 2\sigma_e^2}}{\sqrt{2\pi}\sigma_e} \quad (5.14)$$

Dessa forma, pode-se definir a função que descreve o espectro de radiação de

freamento como

$$f(E_e, \sigma_e; E) = \frac{dN_f}{dE} = M B(E_e, \sigma_e; E), \quad (5.15)$$

onde

$$M = \Omega N_e \mathcal{N} \ell, \quad (5.16)$$

e

$$B(E_e, \sigma_e; E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE_0 \frac{d^2\sigma_b}{dE d\Omega}(E_0; E, \theta) G(E_e, \sigma_e; E_0) \quad (5.17)$$

A SCDD de produção de radiação de freamento é usualmente escrita como [21]

$$\frac{d^2\sigma_b}{dE d\Omega}(E_0; E, \theta) = \frac{d\sigma_b}{dE} S(Z, E_0, \kappa; \cos \theta) \quad (5.18)$$

onde

$$\frac{d\sigma_b}{dE} = \frac{Z^2}{\beta^2} \frac{1}{E} \chi(Z, E_0, \kappa) \quad (5.19)$$

é a seção de choque diferencial em energia de produção de bremsstrahlung,  $\beta$  é a velocidade do elétron dividida pela velocidade da luz,  $\chi(Z, E_0, \kappa)$  é a seção de choque diferencial reduzida (que leva em conta as interações elétron-núcleo e elétron-elétron) e  $S(Z, E_0, \kappa; \cos \theta)$  é chamada de *shape function*;  $\kappa = E/E_0$  e  $\theta$  é o ângulo entre a direção na qual o fóton é emitido e a direção de incidência do elétron. Seltzer e Berger [22] sintetizaram tabelas para  $\chi(Z, E_0, \kappa)$  para  $E_0 < 500$  keV seguindo um esquema de cálculo baseado no método de ondas parciais. Kissel e colaboradores [23] realizaram cálculos, também baseados no método de ondas parciais, para tabular  $S(Z, E_0, \kappa; \cos \theta)$  para um conjunto de valores de referência. O conjunto de *shape functions* calculadas nos valores de referência pode ser aproximada por uma fórmula analítica simples, conhecida como *distribuição angular de dipolo modificada* [21].

Como o cálculo da SCDD de produção de bremsstrahlung é trabalhoso, convém verificar a possibilidade de empregar modelos simples. Pode-se supor que o espectro de bremsstrahlung produzido por elétrons com energia  $E_0$  seja



dado por (compare com a Eq. 5.18)

$$b(E, E_0) = \begin{cases} A/E, & \text{se } E \leq E_0 \\ 0, & \text{se } E > E_0 \end{cases} \quad (5.20)$$

onde  $A$  é uma parâmetro análogo à  $M = \Omega N_e \mathcal{N} \ell$  da Equação 5.16. Supondo que a energia  $E_0$  do feixe de elétrons respeite uma distribuição gaussiana com média  $E_e$  e desvio padrão  $\sigma_e$ , o espectro resultante que chega ao detector  $f_2(E)$  é dado por

$$f_2(E) = \int_{-\infty}^{\infty} b(E, E_0) G(E_e, \sigma_e; E_0) dE_0 \quad (5.21)$$

Como  $b(E, E_0)$  é nulo para  $E_0 \leq E$ , pode-se escrever

$$f_2(E) = \frac{A}{E} \int_E^{\infty} G(E_e, \sigma_e; E_0) dE_0 = \frac{A}{2E} (1 - \text{erf}(z)) \quad (5.22)$$

onde  $z = (E - E_e)/(\sqrt{2}\sigma_e)$  e  $\text{erf}(z)$  é a função erro, definida como

$$\text{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-t^2) dt \quad (5.23)$$

A Figura 5.2 mostra  $f_2(E)$  para elétrons com energia de 100 keV, e dispersão de 260 eV comparado com a função  $f(E_e, \sigma_e; E)$  definida pela Equação 5.15 com a SCDD obtida do banco de dados do PENELOPE [21]. Uma vez estabelecida uma estimativa inicial para  $E_e$  e  $\sigma_e$ , o parâmetro  $A$  pode ser ajustado pelo método dos mínimos quadrados, tal como o parâmetro  $M$ . A determinação de  $E_e$  e  $\sigma_e$  pode ser feita como antes, minimizando  $Q(E_e, \sigma_e)$ .

#### 5.1.4 Mapeamento de $Q(E_e, \sigma_e)$

Neste trabalho, usou-se rotinas do código PENELOPE que realizam interpolações para determinar a SCDD de produção de bremsstrahlung para elementos com  $Z$  entre 1 e 99, quaisquer valores de  $\kappa$  entre 0 e 1 e quaisquer valores de  $E_0$  entre 1 keV e 500 keV.

Como dito anteriormente, a caracterização do feixe é feita mapeando a função  $Q(E_e, \sigma_e)$  e determinando  $(E_e, \sigma_e)$  como o ponto de mínimo dessa função. O modelo simplificado foi usado para se fazer uma determinação

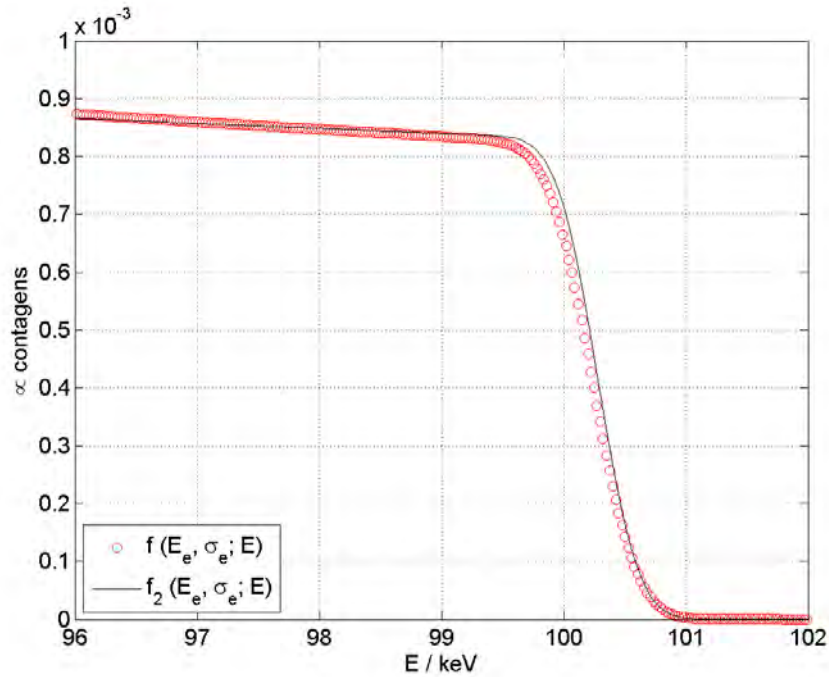


Figura 5.2: Modelos para o espectro de bremsstrahlung de elétrons de 100 keV com dispersão de 260 eV. A linha contínua representa a função  $f_2(E)$  definida pela Equação 5.22, os pontos a função  $f(E_e, \sigma_e; E)$  definida pela Equação 5.15. A SCDD de produção de bremsstrahlung necessária para calcular  $f(E_e, \sigma_e; E)$  foi extraída do banco de dados do PENELOPE [21]

inicial da energia e dispersão de feixe de elétrons. Em seguida, o modelo baseado na SCDD, que consome mais tempo, foi usado para fazer um novo mapeamento do  $Q(E_e, \sigma_e)$  numa malha de pontos mais densa nos arredores da primeira estimativa do ponto de mínimo. Realizando os procedimentos descritos acima para cada espectro obtido, a energia e dispersão do feixe foram determinadas para todas as irradiações feitas com os alvos de Au e Bi.

## 5.2 Seção de choque de ionização

Quando o alvo, com  $\mathcal{N}$  átomos por unidade de volume e espessura  $\ell$ , é atingido por  $N_e$  elétrons do feixe, são observados  $N_x$  fótons de raios x, com

energia  $E_x$ , de acordo com a relação

$$N_x = N_e \mathcal{N} \ell \sigma^x(E_e) \frac{\Omega}{4\pi} \varepsilon(E_x), \quad (5.24)$$

onde  $E_e$  é a energia média dos elétrons do feixe,  $\varepsilon(E_x)$  é a eficiência intrínseca do detector para fótons com energia  $E_x$ ,  $\Omega$  é o ângulo sólido com que os fótons do alvo vêm o detector.

Por outro lado, o número de fótons de bremsstrahlung,  $N_b$ , que são detetados num intervalo de energia  $(E_a, E_b)$  do espectro é

$$N_b = \Omega N_e \mathcal{N} \ell \int_{E_a}^{E_b} dE \int_{-\infty}^{\infty} dE' B(E_e, \sigma_e; E') R(E, E') \quad (5.25)$$

com  $B(E_e, \sigma_e; E)$  definida pela Equação 5.17. Usando as equações 5.24 e 5.25 chega-se a seguinte expressão para a seção de choque de produção de raios x

$$\sigma^x(E_e) = \frac{N_x}{N_b} \frac{4\pi}{\varepsilon(E_x)} I(E_a, E_b) \quad (5.26)$$

onde

$$I(E_a, E_b) = \int_{E_a}^{E_b} dE \int_{-\infty}^{\infty} dE' B(E_e, \sigma_e; E') R(E, E') \quad (5.27)$$

Dessa forma pode-se determinar  $\sigma^x$  sem a necessidade de se conhecer a espessura de alvo, a corrente do feixe de elétrons e o ângulo sólido entre o alvo e o detector. Note que, para uma função resposta ideal, dada por  $R(E, E') = \varepsilon(E') \delta(E - E')$ , esta expressão é equivalente à expressão usada nas referências [24, 25], que desconsideram os efeitos da função resposta do detector e adotam  $E_a \leq E_x \leq E_b$ .

Até agora,  $N_x$  pode representar a área dos raios x  $K\alpha_{2,1}$  ou  $K\beta_{3,1}$ . Sejam  $N_\alpha$  e  $E_{K\alpha_{2,1}}$  a área e energia média<sup>4</sup> dos raios x  $K\alpha_{2,1}$  e  $N_\beta$  e  $E_{K\beta_{3,1}}$  as correspondente quantidades para os raios x  $K\beta_{3,1}$ .  $N_\alpha$  e  $N_\beta$  fornecem (via Eq. 5.26) a taxa de produção de raios x  $K\alpha_{2,1}$  e a taxa de produção de raios

---

<sup>4</sup>A energia média é definida como a média ponderada pela intensidade das componentes dos raios x que se misturam.

x  $K\beta_{3,1}$ , como

$$\sigma_{K\alpha_{2,1}}^x = \frac{N_\alpha}{N_b} \frac{4\pi}{\varepsilon(E_{K\alpha_{2,1}})} I(E_a, E_b) \quad (5.28)$$

e

$$\sigma_{K\beta_{3,1}}^x = \frac{N_\beta}{N_b} \frac{4\pi}{\varepsilon(E_{K\beta_{3,1}})} I(E_a, E_b) \quad (5.29)$$

respectivamente, a partir das quais se pode determinar  $\sigma_K$  através das relações

$$\sigma_{K\alpha_{2,1}}^x = \frac{\Gamma_{KL_{2,3}}}{\Gamma_{K_{\text{total}}}} \omega_K \sigma_K \quad (5.30)$$

ou

$$\sigma_{K\beta_{3,1}}^x = \frac{\Gamma_{KM_{2,3}}}{\Gamma_{K_{\text{total}}}} \omega_K \sigma_K \quad (5.31)$$

onde  $\Gamma_{KX}/\Gamma_{\text{total}}$  é a razão da taxa de emissão de raios x e  $\omega_K$  é o *fluorescence yield*<sup>5</sup>. A Tabela 5.1 abaixo relaciona os parâmetros atômicos usados neste trabalho. Os valores de  $\omega_K$  foram obtidos das compilações de Krause [26] e as razões da taxa de emissão de raios x foram obtidas do trabalho de Scofield [27].

Tabela 5.1: Fluorescence yields [26] e razão das taxas de produção de raios x  $K$  [27] do Au e Bi.

Elemento	$Z$	$\omega_K$	$\Gamma_{KL_{2,3}}/\Gamma_{\text{total}}$	$\Gamma_{KM_{2,3}}/\Gamma_{\text{total}}$
Au	79	0,964	0,790	0,161
Bi	83	0,968	0,786	0,162

Para determinar  $N_\alpha$  e  $N_\beta$  ajustou-se retas às regiões vizinhas aos picos correspondentes a essas transições, uma nos arredores dos raios x  $K\alpha_{2,1}$ , e outra nos arredores dos raios x  $K\beta_{3,1}$ . Uma vez ajustada uma reta ao fundo, determinava-se uma região de pico, somavam-se as contagens nessa região, e o fundo abaixo do pico era subtraído usando-se o resultado do ajuste.

Para determinar  $N_b$  somou-se o total de contagens no espectro numa

<sup>5</sup>Quando a camada  $K$  de um átomo é ionizada, a relaxação atômica pode ocorrer via emissão de raios x ou de um elétron Auger.  $\omega_K$  representa a probabilidade de o átomo emitir raios x quando sua camada  $K$  é ionizada. Há varias possibilidades de o átomo relaxar quando ele emite raios x, cada uma correspondendo a emissão de uma cascata de fótons com energia característica.  $\Gamma_{KL_{2,3}}/\Gamma_{K_{\text{total}}}$ , por exemplo, representa a probabilidade de o átomo relaxar emitindo raios x  $K\beta_{2,1}$ .

região próxima ao tipo de bremsstrahlung. A figura 5.3 ilustra as áreas  $N_\alpha$ ,  $N_\beta$  e  $N_b$ , usadas na determinação de  $\sigma_K$  para o alvo de Au irradiado pelo feixe de 100 keV.

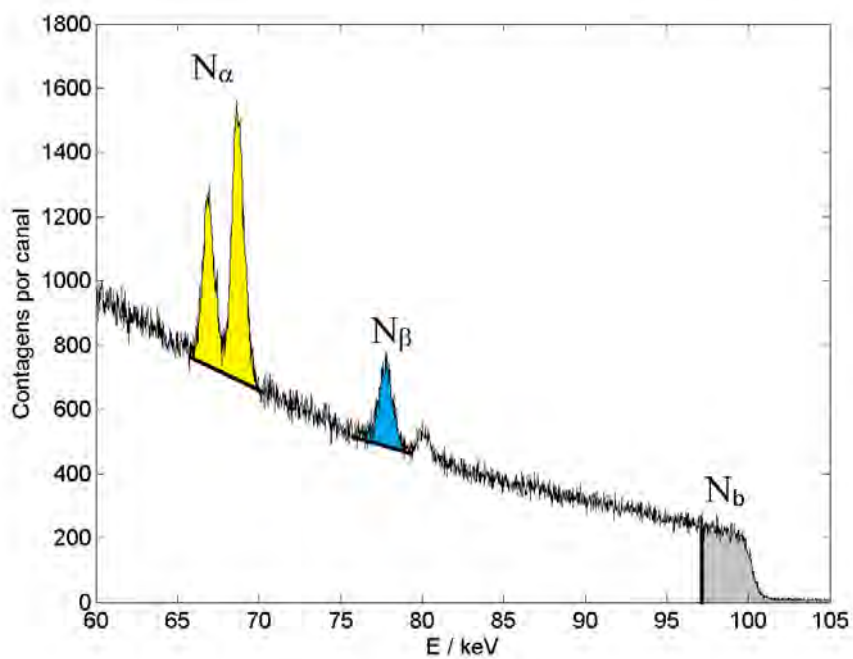


Figura 5.3: Espectro obtido com o alvo de Au sendo irradiado pelo feixe de 100 keV. As regiões destacadas indicam as áreas  $N_\alpha$ ,  $N_\beta$  e  $N_b$ , usadas na determinação de  $\sigma_K$ .



# Capítulo 6

## Resultados e discussão

Nesta seção, são apresentados os resultados que dizem respeito à caracterização do feixe de elétrons e à determinação da seção de choque de ionização. No que segue, são feitas referências às quantidades  $Q(E_e, \sigma_e)$ ,  $f(E_e, \sigma_e; E)$  e  $M$  definidas na seção 5.1. Identificamos as diversas irradiações com o símbolo do elemento que compõe o alvo e a energia nominal do feixe correspondente. Assim, a irradiação do alvo de Bi com o feixe de 94 keV é identificada como Bi-94.

A Figura 6.1 mostra as curvas de nível da função  $Q(E_e, \sigma_e)$  e a Figura 6.2 o resultado do ajuste da função  $f(E_e, \sigma_e; E)$  ao espectro de bremsstrahlung. As duas figuras referem-se à irradiação Au-98. O ponto de mínimo de  $Q(E_e, \sigma_e)$  fornece o valor médio e a dispersão da distribuição de energia dos elétrons do feixe. Neste caso, obteve-se  $E_e = 97,960(12)$  keV e  $\sigma_e = 0,270(25)$  eV. A Tabela 6.1 apresenta os resultados obtidos para as outras irradiações feitas com os alvos de Au e Bi. Nela também apresentamos o valor de  $M = \Omega N_e \mathcal{N} \ell$  correspondente a cada irradiação.

A dispersão de energia do feixe é devida às flutuações de tensão no canhão de elétrons e à perda de energia sofrida pelo elétrons ao atravessarem o alvo. Ela afeta tanto a produção de raios x como a produção de bremsstrahlung, de forma que se *deve* utilizar a energia média (obtida do espectro de bremsstrahlung) na curva da seção de choque de ionização como função da energia.

Com exceção do ajuste relativo ao alvo de Bi irradiado com o feixe de 98

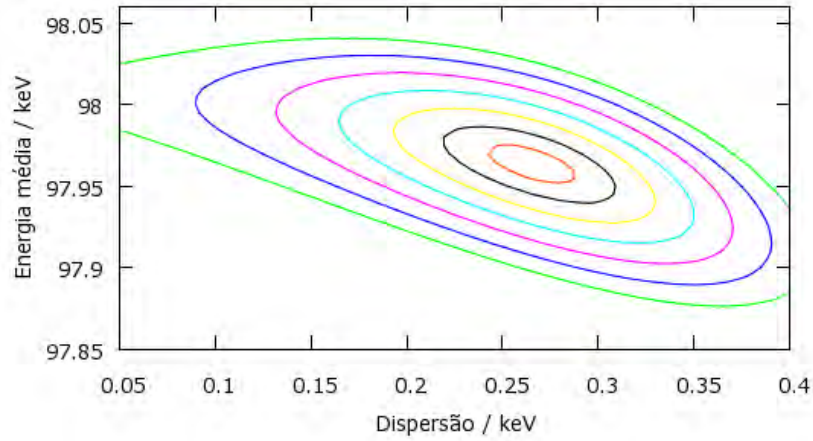


Figura 6.1: Curvas de nível da função  $Q(E_e, \sigma_e)$  relativas a irradiação Au-98. O ponto de mínimo dessa função fornece o valor médio e desvio padrão da distribuição de energia dos elétrons do feixe. No ponto de mínimo,  $Q_{\min} = 224,6$ . As curvas de nível apresentadas na figura correspondem aos valores de  $Q_{\min} + 1$ ,  $Q_{\min} + 4$ , ...,  $Q_{\min} + n^2$ .

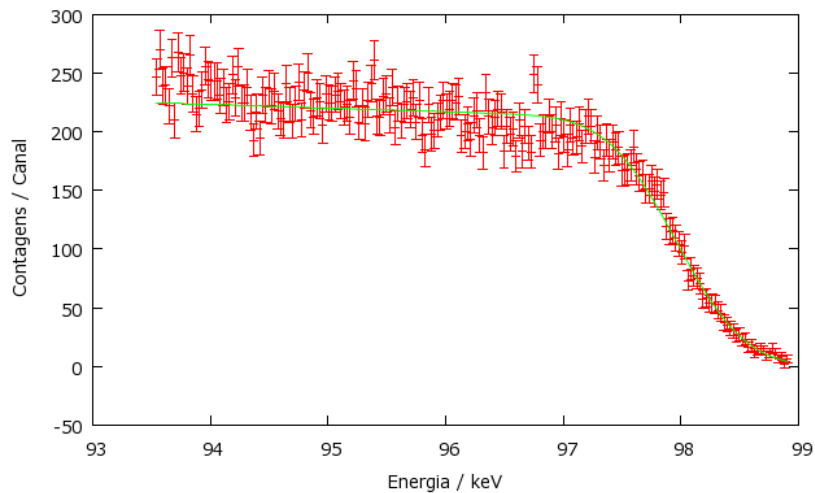


Figura 6.2: Ajuste da função  $f(E_e, \sigma_e; E)$  ao espectro de bremsstrahlung correspondente à irradiação Au-98.



Tabela 6.1: Energia média  $E_e$  e desvio padrão  $\sigma_e$  da distribuição gaussiana que descreve a distribuição de energia dos elétrons do feixe.  $M = \Omega N_e \mathcal{N} \ell$  é o fator de normalização usado para ajustar a função  $f(E_e, \sigma_e; E)$  ao espectro de bremsstrahlung.

Elemento	$E_e$ / keV	$\sigma_e$ / eV	$M \times 10^5$ / sr / b
Au	100,285(11)	0,215(26)	7,87(6)
Au	97,960(12)	0,27(25)	7,32(6)
Au	96,005(12)	0,235(26)	6,99(5)
Au	94,300(12)	0,195(27)	5,89(5)
Au	91,895(11)	0,255(20)	8,44(6)
Au	90,370(10)	0,265(17)	10,49(6)
Au	88,045(10)	0,290(17)	10,31(6)
Au	86,630(7)	0,265(13)	19,70(8)
Au	84,405(6)	0,265(11)	23,41(9)
Au	82,915(6)	0,245(11)	28,66(13)
Bi	99,860(13)	0,235(29)	7,64(6)
Bi	98,045(12)	0,215(32)	8,28(6)
Bi	95,785(9)	0,160(29)	13,47(8)
Bi	93,905(8)	0,260(17)	17,85(9)
Bi	92,005(8)	0,200(21)	18,27(9)

keV de energia nominal, todos os ajustes passaram no teste de qui-quadrado, confirmando a validade do modelo empregado para a descrição do espectro de bremsstrahlung.

Os parâmetros  $N_\alpha$  e  $N_\beta$  são determinados ajustando-se retas nas correspondentes regiões de fundo. A Figura 6.3 ilustra o resultado do ajuste de uma reta na região de fundo no entorno dos raios x  $K\alpha_{2,1}$  para a determinação de  $N_\alpha$  correspondente a irradiação Au-100.

Com as grandezas  $E_e$ ,  $\sigma_e$  e  $M$  determina-se a função  $f(E_e, \sigma_e; E)$  a partir da qual se calcula a grandeza  $I(E_a, E_b)$  definida na pela Equação 5.27. Os valores de  $I(E_a, E_b)$ ,  $N_\alpha$  e  $N_\beta$  são apresentados na Tabela 6.2.

As seções de choque de produção de raios x  $K\alpha_{2,1}$  e  $K\beta_{3,1}$  foram determinadas usando-se os dados da Tabela 6.2 e a Equação 5.26. A Tabela 6.3 apresenta os resultados obtidos.

Com o uso dos dados da Tabela 6.3 e dos parâmetros de relaxação atômicos (Tabela 5.1, seção 5.2) determinou-se a seção de choque de ionização de duas formas, uma delas usando a seção de choque de produção de raios x  $K\alpha_{2,1}$

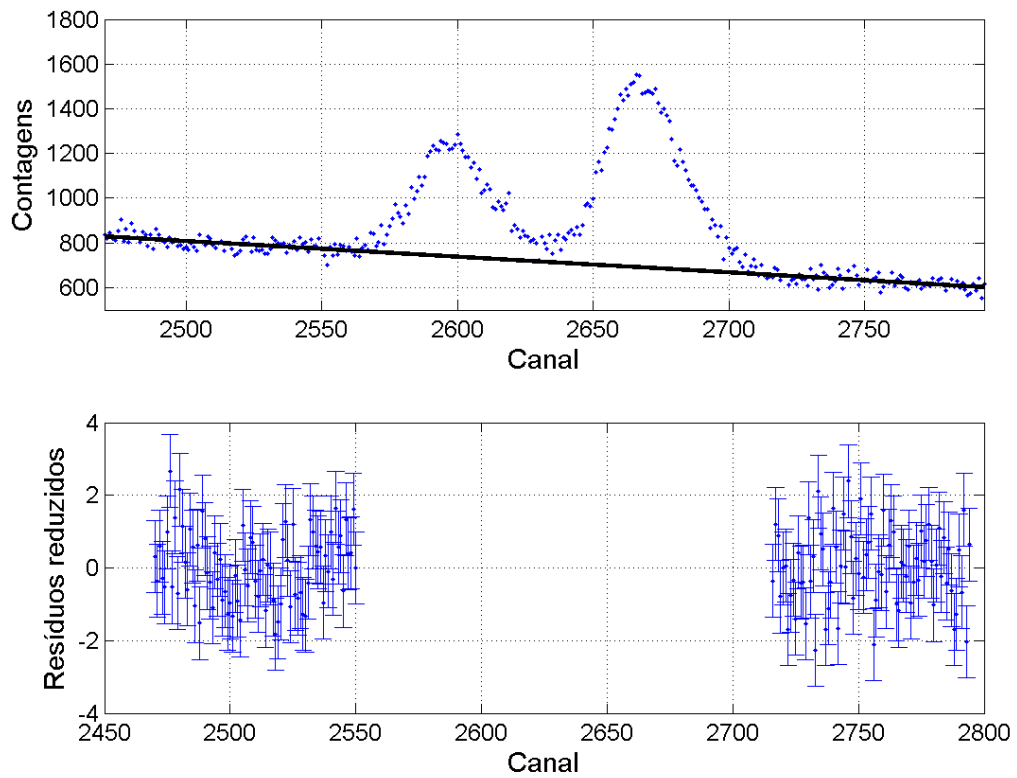


Figura 6.3: Ajuste de uma reta na região de fundo no entorno dos raios  $x K\alpha_{2,1}$  para a determinação de  $N_\alpha$  correspondente a irradiação Au-100. A linha cheia representa o ajuste aos pontos experimentais. A região de pico não foi incluída no ajuste.

Tabela 6.2: Área dos picos de raios x  $K\alpha_{2,1}$  e  $K\beta_{3,1}$ , área  $N_b$  do contínuo de bremsstrahlung na região próxima ao “tip” e a integral da SCDD de produção de bremsstrahlung  $I = I(E_a, E_b)$ , obtidas dos espectros experimentais nas diversas irradiações, identificadas na primeira coluna.

Irradiação	$N_\alpha \times 10^{-3}$	$N_\beta \times 10^{-3}$	$N_b \times 10^{-3}$	$E_a / \text{keV}$	$E_b / \text{keV}$	$I \times 10 / (\text{b sr}^{-1})$
Au-100	48,1(5)	10,5(3)	28,37(17)	96,97	101,124	1,1552
Au-98	39,7(5)	8,8(3)	24,64(16)	94,996	98,919	1,1201
Au-96	32,9(5)	7,14(29)	24,21(16)	92,996	96,739	1,1885
Au-94	24,8(4)	5,37(26)	23,10(15)	90,996	95,252	1,3844
Au-92	28,9(5)	6,1(3)	29,43(17)	89,022	92,919	1,2847
Au-90	31,4(5)	7,0(3)	40,85(21)	87,227	91,38	1,4771
Au-88	23,0(5)	5,9(3)	40,71(20)	84,945	89,047	1,5589
Au-86	35,2(7)	7,9(4)	79,42(29)	83,509	87,56	1,6362
Au-84	27,6(7)	7,7(5)	91,0(3)	81,458	85,329	1,6440
Au-82	17,7(7)	5,1(5)	79,67(29)	80,817	83,791	1,2039
Bi-100	16,0(4)	4,0(3)	23,21(16)	96,97	101,124	1,1140
Bi-98	14,0(4)	3,9(3)	27,40(17)	94,996	98,919	1,2433
Bi-96	15,5(5)	3,8(4)	41,65(21)	92,996	96,739	1,2137
Bi-94	13,4(6)	4,1(4)	59,25(25)	90,996	95,252	1,3429
Bi-92	4,1(6)	-	63,57(26)	89,022	92,919	1,4566

Tabela 6.3: Seções de choque de produção de raios x  $K\alpha_{2,1}$  e  $K\beta_{3,1}$ . O número entre parênteses representa a incerteza associada ao valor.

Elemento	$E_e / \text{keV}$	$\sigma_{K\alpha_{2,1}} / \text{b}$	$\sigma_{K\beta_{3,1}} / \text{b}$
Au	100,285(11)	2,47(3)	0,516(16)
	97,960(12)	2,25(3)	0,483(17)
	96,005(12)	2,02(3)	0,422(17)
	94,300(12)	1,87(3)	0,387(19)
	91,895(11)	1,574(27)	0,321(16)
	90,370(10)	1,418(24)	0,306(14)
	88,045(10)	1,102(24)	0,27(14)
	86,630(7)	0,910(18)	0,196(11)
	84,405(6)	0,636(16)	0,168(10)
	82,915(6)	0,333(14)	0,093(9)
Bi	99,860(13)	0,964(27)	0,228(18)
	98,045(12)	0,800(26)	0,213(17)
	95,785(9)	0,569(21)	0,135(13)
	93,905(8)	0,382(17)	0,111(12)
	92,005(8)	0,118(17)	-

Tabela 6.4: Seção de choque de ionização da camada  $K$ .  $\sigma^{(1)}$  representa a seção de choque determinada a partir de  $\sigma_{K\alpha_{2,1}}$  e  $\sigma^{(2)}$  a seção de choque determinada a partir de  $\sigma_{K\beta_{3,1}}$ .

Elemento	$E_e / \text{keV}$	$\sigma^{(1)} / \text{b}$	$\sigma^{(2)} / \text{b}$
Au	100,285(11)	3,239(41)	3,33(11)
	97,960(12)	2,960(42)	3,11(11)
	96,005(12)	2,647(42)	2,72(11)
	94,300(12)	2,461(45)	2,50(12)
	91,895(11)	2,067(36)	2,07(10)
	90,370(10)	1,862(32)	1,97(9)
	88,045(10)	1,447(32)	1,74(9)
	86,630(7)	1,195(23)	1,26(7)
	84,405(6)	0,835(21)	1,08(6)
	82,915(6)	0,437(19)	0,60(6)
Bi	99,86(13)	1,267(36)	1,46(11)
	98,045(12)	1,051(34)	1,36(11)
	95,785(9)	0,748(27)	0,86(9)
	93,905(8)	0,502(23)	0,71(7)
	92,005(8)	0,155(23)	-

e outra usando a seção de choque de produção de raios x  $K\beta_{3,1}$ . Nota-se que os resultados obtidos a partir dos raios x  $K\beta_{3,1}$  são sistematicamente maiores do que aqueles obtidos com os raios x  $K\alpha_{2,1}$ . A Figura 6.4 apresenta os resultados obtidos com  $K\alpha_{2,1}$ , que consideramos ser mais confiáveis.

Observando a figura 6.4, nota-se que os resultados deste trabalho são ligeiramente maiores que os cálculos baseados em DWBA, com diferenças que chegam até a 30 %. Uma possível explicação para esse desacordo é o fato de o cálculo baseado em DWBA desprezar o termo de interação transversal, cuja contribuição pode ser importante para elementos pesados.

Por fim, a Figura 6.5 compara os resultados deste trabalho com o resultado de outros experimentos [29, 30, 24]. Nota-se que, com exceção do resultado reportado em [24], todos os experimentos fornecem um valor para a seção de choque acima do valor previsto pelos cálculos baseados em DWBA [8].

As incertezas dos resultados apresentados nas Figuras 6.4 e 6.5 provém das incertezas na determinação de  $N_\alpha$  e  $N_\beta$ . No entanto, os resultados deste

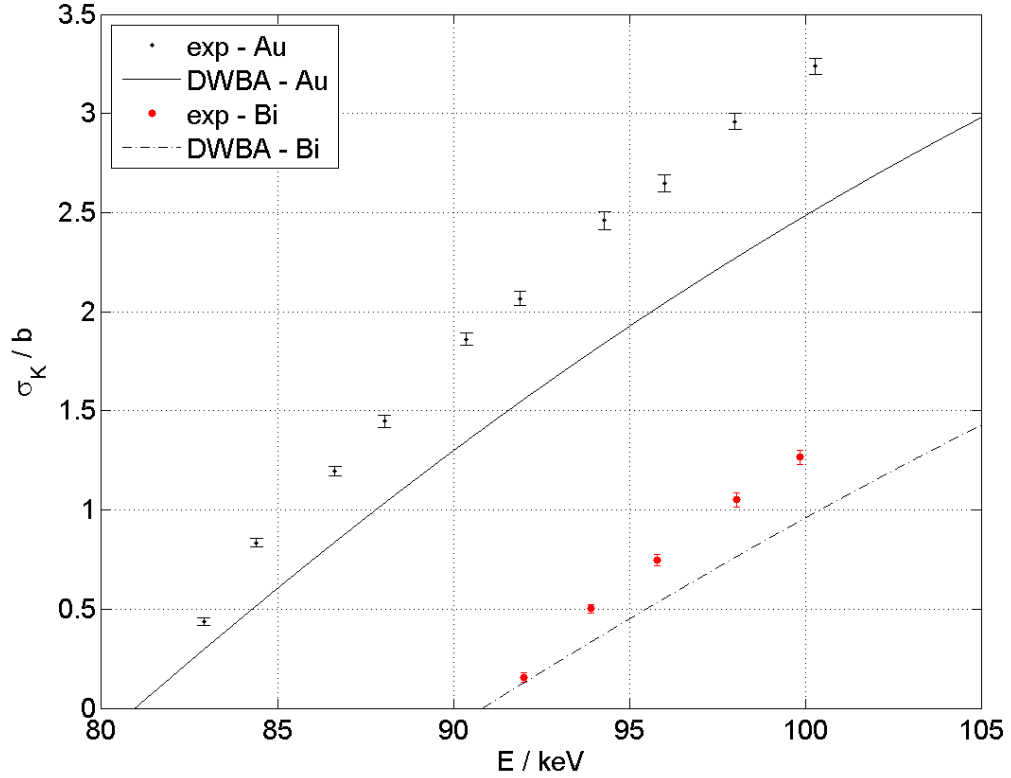


Figura 6.4: Seção de choque de ionização da camada  $K$  do Au e Bi. Os pontos representam os resultados experimentais obtidos neste trabalho. As linhas contínua e tracejada representam os resultados teóricos baseados na aproximação de Bohr com ondas planas distorcidas, respectivamente, para o Au e Bi. Elas foram calculadas com base na parametrização proposta em [8]. As barras de erro representam apenas a incerteza estatística (um desvio padrão), no entanto, os resultados desse trabalho também estão afetados por incertezas sistemáticas relativas à SCDD teórica de produção de bremsstrahlung (com desvio padrão entre 3 e 5% [28]) e aos cálculos envolvendo a função resposta do detetor (3%).

trabalho também estão afetados por incertezas sistemáticas relativas à SCDD teórica de produção de bremsstrahlung (com desvio padrão entre 3 e 5% [28]) e aos cálculos envolvendo a função resposta do detetor (3%).

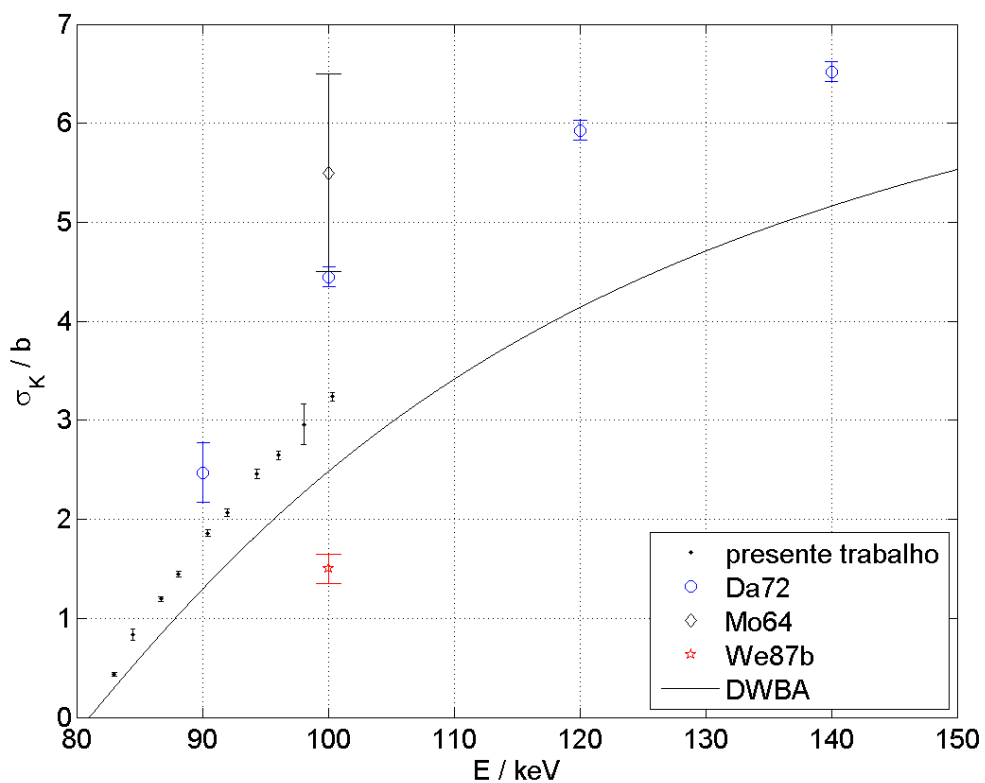


Figura 6.5: Seção de choque de ionização da camada  $K$  do Au obtida neste trabalho e o resultado de outros experimentos. As referências [29, 30, 24] são indicadas por Mo64, Da72, We87b, respectivamente, seguindo a notação de Liu e colaboradores [2]. A linha contínua representa os cálculos baseados em DWBA [8]. O segundo e o penúltimo ponto experimental do presente trabalho apresentam uma barra de erro que inclui as incertezas com origem estatística e erros sistemáticos. Os demais pontos experimentais apresentam apenas a barra de erro com origem estatística.

# Capítulo 7

## Conclusão

Mediu-se a seção de choque de ionização da camada  $K$  do Au e Bi por impacto de elétrons com energias entre os respectivos potenciais de ionização e 100 keV. No caso do Au, as poucas medições encontradas na literatura para energias próximas ao limiar de ionização diferem entre si quase por um fator 4 a 100 keV, e a seção de choque obtida neste trabalho se encontra próxima do valor médio desses dados. Por outro lado, este experimento fornece as primeiras medições da seção de choque de ionização da camada  $K$  do Bi para energias menores que 2 MeV.

Os resultados obtidos são ligeiramente maiores (cerca de 30 %) que os cálculos baseados em DWBA. Uma possível explicação para este desacordo se deve ao fato de os cálculos baseados em DWBA não levarem em conta a troca de fótons virtuais entre os elétron incidente e o elétron secundário.

As incertezas estatísticas associadas aos resultados experimentais deste trabalho são devidas basicamente às incertezas nas áreas dos picos de raios x e do contínuo de bremsstrahlung. Essas incertezas são tanto menores quanto maior for a área dessas regiões. Os tempos de medição foram escolhidos de forma a se obter uma pequena incerteza (em torno de 1 %) no número de contagens.

Será interessante obter maior informação sobre a seção de choque de ionização da camada  $K$  de elementos com número atômico intermediário ( $Z \approx 50$ ) e grande ( $Z > 70$ ). Como o efeito da troca de fótons virtuais é

mais importante para elementos com número atômico grande, o desacordo entre experimento e teoria deve ser menor para átomos de número atômico intermediário.





# Referências Bibliográficas

- [1] D. Bote e F. Salvat: *Calculations of inner-shell ionization by electron impact with distorted-wave and plane-wave Born approximations*. Phys. Rev. A **77**, 042701 (2008).
- [2] M. Liu, Z. An, C. Tang, Z. Luo, X. Peng e X. Long: *Experimental electron-impact K-shell ionization cross sections*. At. Data and Nucl. Data Tables **76**, 213 (2000).
- [3] D. H. Madison e E. Merzbacher: *Atomic Inner-Shell Processes*. Academic Press, New York, 1975.
- [4] M. Inokuti: *Inelastic Collisions of Fast Charged Particles with Atoms and Molecules—The Bethe Theory Revisited*. Rev. Mod. Phys. **43**, 297 (1971).
- [5] D. Bote: *Colisiones de partículas cargadas. Modelos de interacción y algoritmos numéricos*. Tese de Doutorado, Universitat de Barcelona, 2010.
- [6] J. J. Sakurai: *Modern Quantum Mechanics Revised Edition*. Addison-Wesley publishing Company, 1994.
- [7] U. Fano: *Differential Inelastic Scattering of Relativistic Charged Particles*. Phys. Rev. **102**, 385 (1956).
- [8] D. Bote, F. Salvat, A. Jablonski e C. J. Powell: *Cross sections for ionization of K, L and M shells of atoms by impact of electrons and positrons*

- with energies up to 1 GeV: Analytical formulas.* At. Data Nucl. Data Tables **95**, 871 (2009).
- [9] R. Hippler: *Plane wave Born calculations of K-shell ionization at low velocities.* Phys. Lett. A **144**, 81 (1990).
- [10] H. Kolbenstvedt: *Simple Theory for K-Ionization by Relativistic Electrons.* J. Appl. Phys. **38**, 4785 (1967).
- [11] J. P. Santos, F. Parente e Y K Kim: *Cross sections for K-shell ionization of atoms by electron impact.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **36**, 4211 (2003).
- [12] Vito R. Vanin, Nora L. Maidana, Neivy L. Pino, Viktor Jahnke e José M. FernándezVarea et al: *First Experiments with the IFUSP Microtron Injector.* AIP Conf. Proc. **1351**, 015 (2011).
- [13] Laboratoire National Henri Becquerel. <http://www.nucleide.org>. Último acesso em agosto de 2012.
- [14] E.R. Mucciolo e O. Helene: *Energy measurement of gamma rays from  $^{133}\text{Ba}$  decay: Consistency with cascade cross-over relations.* Nucl. Instrum. Meth. A **256**, 153 (1987).
- [15] V.R Vanin, G Kenchian, M Morales, O Helene e P.R Pascholati: *An experimental method for a precise determination of gamma-ray energies with semiconductor detectors.* Nucl. Instrum. Meth. A **391**, 338 (1997).
- [16] Nist Physical Reference Data. <http://www.nist.gov>. Último acesso em agosto de 2012.
- [17] G. F. Knoll: *Radiation Detection and Measurement.* John Wiley and Sons, terceira edição, New Jersey, 2000.
- [18] J. S. Hansen, J. C. McGeorge, D. Nix, W. D. Schmidt-Ott, I. Unus e R. W. Fink: *Accurate efficiency calibration and properties of semiconductor detectors for low-energy photons.* Nucl. Instrum. Meth. **106**, 365 (1973).

- [19] N.L. Maidana, V.R. Vanin, V. Jahnke, W. Godoy e L. Brualla: *Peripheral dead layers in HPGe x-ray detectors measurement*. Aceito para publicação no ISRP 2012.
- [20] O. Helene: *Método dos Mínimos Quadrados com Formalismo Matricial*. Editora Livraria da Física, 2006.
- [21] F. Salvat, J. M. Fernández-Varea e J. Sempau: *PENELOPE-2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*. OECD/NEA Issy-les-Moulineaux, 2008.
- [22] S. M. Seltzer e M. J. Berger: *Bremsstrahlung energy spectra from electron with kinetic energy 1 keV-10 GeV incident on screened nuclei and orbital electrons of neutral atoms with  $Z = 1-100$* . At. Data Nucl. Data Tables **35**, 345 (1986).
- [23] L. Kissel, C. A. Quarles e R. H. Pratt: *Shape function for atomic-field bremsstrahlung from electrons of kinetic energy 1-500 keV on selected neutral atoms  $1 \leq Z \leq 92$* . At. Data Nucl. Data Tables **28**, 381 (1983).
- [24] G. L. Westbrook e C. A. Quarles: *Total cross sections for ionization of the K-shell by electron bombardment*. Nucl. Instrum. Meth. B **24/25**, 196 (1987).
- [25] C. S. Campos, M. A. Z. Vasconcellos, X. Llovet e F. Salvat: *Measurements of L-shell x-ray production cross sections of W, Pt, and Au by 10-30 keV electrons*. Phys. Rev. A **66**, 012719 (2002).
- [26] M. O. Krause: *Atomic Radiative and Radiationless Yields for K and L Shells*. J. Phys. Chem. Ref. Data **8**, 307 (1979).
- [27] J. H. Scofield: *Relativistic Hartree-Slater values for K and L x-ray emission rates*. At. Data Nucl. Data Tables **14**, 121 (1974).
- [28] S. M. Seltzer e M. J. Berger: *Bremsstrahlung spectra from electron interactions with screened atomic nuclei and orbital electrons*. Nucl. Instrum. Meth. B **12**, 95 (1985).

- [29] J. W. Motz e R. C. Placious: *K-Ionization Cross Sections for Relativistic Electrons*. Phys. Rev. **136A**, 662 (1964).
- [30] D. V. Davis, V. D. Mistry e C. A. Quarles: *Inner shell ionization of copper, silver and gold by electron bombardment*. Phys. Lett. **38A**, 169 (1972).

# Lista de Figuras

- 3.1 Esquema da linha de feixe de baixa energia do Mícrotron do IFUSP. Um dipolo magnético permite escolher se o feixe irá para a linha de baixa energia ou para o Microtron *booster*. Uma vez na linha de baixa energia, o uso de dois quadrupolos magnéticos permite que o feixe seja focalizado no centro de uma câmara de irradiação. Maiores detalhes podem ser encontrados na referência [12]. . . . . 16
- 3.2 Diagrama esquemático do sistema de aquisição com um exemplo de espectro e uma fotografia de um detetor HPGe de raios x. O sinal proveniente do detetor passa pelo pré-amplificador, pelo amplificador e é enviado ao conversor analógico digital, que faz a histogramação dos sinais. Um micro-computador associado a um software gera o histograma na forma de um arquivo. . . . . 19
- 3.3 (a) Fonte de calibração de  $^{241}\text{Am}$  (produzida no IPEN) e seu suporte de Al. (b) Alvo de Bi montado na moldura de fibra de carbono, que é suspensa pelo suporte de Al. O material na parte superior do suporte é BeO. Ele emite luz quando atingido pelos elétrons, permitindo a verificação da focalização do feixe. 20
- 3.4 Blindagem do detetor de raios x. (a) Vista lateral da blindagem parcialmente montada. Nota-se a presença da peça de cobre blindando o cristal de Ge do detetor. (b) Vista superior da blindagem completamente montada. É possível ver a câmara de irradiação e parte da linha de feixe. . . . . 22

3.5	Representação do copo de Faraday e da estrutura de carbono usada para reduzir a produção de bremsstrahlung. Essa estrutura consiste numa espécie de anel; a figura mostra um corte ao longo do eixo de simetria cilíndrica. . . . .	23
4.1	(a) Curva de calibração de energia. Foi obtido como resultado do ajuste: $E / \text{keV} = 0,303(17) + 0,025640(8)C$ , onde $C$ é o número do canal. (b) Diferença entre o valor ajustado e o experimental, normalizado pela incerteza experimental, como função da energia. . . . .	28
4.2	(a) Calibração do parâmetro de largura da gaussiana que descreve a forma dos picos. Como resultado do ajuste, foi obtido $c = 9,1(5) \times 10^{-2} \text{ keV}^2$ e $d = 3,56(22) \times 10^{-4} \text{ keV}$ .(b) Diferença entre o valor ajustado e o experimental, normalizado pela incerteza experimental, como função da energia. . . . .	30
4.3	Calibração de eficiência. Dados experimentais e modelo. . . . .	33
4.4	Esquema do cristal do detetor de raios x mostrando a espessura de camada morta (em cinza) ao longo do volume do detetor. A Figura mostra um corte transversal ao longo do eixo de simetria cilíndrica do detetor. . . . .	33
4.5	Modelo para a função resposta. . . . .	35
4.6	Valores dos parâmetros da função resposta, definidos na Equação 4.3. As linhas cheias correspondem a retas ajustadas pelo MMQ. . . . .	36
4.7	Comparação entre o modelo de função resposta e um espectro experimental obtido com uma fonte de $^{241}\text{Am}$ . Os pontos representam o resultado experimental e a linha cheia o modelo de função resposta, descrito pela Equação 4.3. . . . .	37
5.1	(a) Espectro de energia, $n(E)$ , obtido com o feixe de elétrons de 100 keV incidindo sobre o alvo de Au. (b) $dn/dE$ versus $E$ . O ponto de mínimo dessa curva fornece uma estimativa inicial para a energia do feixe. . . . .	41

5.2	Modelos para o espectro de bremsstrahlung de elétrons de 100 keV com dispersão de 260 eV. A linha contínua representa a função $f_2(E)$ definida pela Equação 5.22, os pontos a função $f(E_e, \sigma_e; E)$ definida pela Equação 5.15. A SCDD de produção de bremsstrahlung necessária para calcular $f(E_e, \sigma_e; E)$ foi extraída do banco de dados do PENELOPE [21] . . . . .	48
5.3	Espectro obtido com o alvo de Au sendo irradiado pelo feixe de 100 keV. As regiões destacadas indicam as áreas $N_\alpha$ , $N_\beta$ e $N_b$ , usadas na determinação de $\sigma_K$ . . . . .	51
6.1	Curvas da nível da função $Q(E_e, \sigma_e)$ relativas a irradiação Au-98. O ponto de mínimo dessa função fornece o valor médio e desvio padrão da distribuição de energia dos elétrons do feixe. No ponto de mínimo, $Q_{\min} = 224,6$ . As curvas de nível apresentadas na figura correspondem aos valores de $Q_{\min}+1$ , $Q_{\min}+4$ , ..., $Q_{\min} + n^2$ . . . . .	54
6.2	Ajuste da função $f(E_e, \sigma_e; E)$ ao espectro de bremsstrahlung correspondente à irradiação Au-98. . . . .	54
6.3	Ajuste de uma reta na região de fundo no entorno dos raios $x K\alpha_{2,1}$ para a determinação de $N_\alpha$ correspondente a irradiação Au-100. A linha cheia representa o ajuste ao pontos experimentais. A região de pico não foi incluída no ajuste. . .	56



6.4	Seção de choque de ionização da camada $K$ do Au e Bi. Os pontos representam os resultados experimentais obtidos neste trabalho. As linhas contínua e tracejada representam os resultados teóricos baseados na aproximação de Bohr com ondas planas distorcidas, respectivamente, para o Au e Bi. Elas foram calculadas com base na parametrização proposta em [8]. As barras de erro representam apenas a incerteza estatística (um desvio padrão), no entanto, os resultados desse trabalho também estão afetados por incertezas sistemáticas relativas à SCDD teórica de produção de bremsstrahlung (com desvio padrão entre 3 e 5% [28]) e aos cálculos envolvendo a função resposta do detetor (3%). . . . .	59
6.5	Seção de choque de ionização da camada $K$ do Au obtida neste trabalho e o resultado de outros experimentos. As referências [29, 30, 24] são indicadas por Mo64, Da72, We87b, respectivamente, seguindo a notação de Liu e colaboradores [2]. A linha contínua representa os cálculos baseados em DWBA [8]. O segundo e o penúltimo ponto experimental do presente trabalho apresentam uma barra de erro que inclui as incertezas com origem estatística e erros sistemáticos. Os demais pontos experimentais apresentam apenas a barra de erro com origem estatística. . . . .	60

# Lista de Tabelas

4.1	Transição e posição em canal correspondente a cada energia. As energias com suas respectivas incertezas foram obtidas do banco de dados do National Institute of Standards and Technology (NIST) [16]. . . . .	27
4.2	Energia e $s^2$ dos picos usados na calibração de largura. A descrição segue a seguinte notação: quando o raio x ou gama é proveniente de uma fonte de calibração, indica-se o núcleo pai e a energia do raio x ou gama emitido pelo núcleo filho, que não é indicado. No caso dos raios x provenientes dos alvos durante as irradiações, apenas se indica o nome do elemento irradiado (sem indicar a massa atômica) e a energia dos raios x.	29
4.3	Eficiência de pico, $\varepsilon$ , para diferentes energias $E$ . Na descrição indica-se o núcleo pai e a energia do raio x ou gama emitido pelo núcleo filho, que não é indicado. . . . .	32
4.4	Valores dos parâmetros da função resposta medidos a diferentes energias. . . . .	35
5.1	Fluorescence yields [26] e razão das taxas de produção de raios x $K$ [27] do Au e Bi. . . . .	50
6.1	Energia média $E_e$ e desvio padrão $\sigma_e$ da distribuição gaussiana que descreve a distribuição de energia dos elétrons do feixe. $M = \Omega N_e \mathcal{N} \ell$ é o fator de normalização usado para ajustar a função $f(E_e, \sigma_e; E)$ ao espectro de bremsstrahlung. . . . .	55

6.2	Área dos picos de raios x $K\alpha_{2,1}$ e $K\beta_{3,1}$ , área $N_b$ do contínuo de bremsstrahlung na região próxima ao “tip” e a integral da SCDD de produção de bremsstrahlung $I = I(E_a, E_b)$ , obtidas dos espectros experimentais nas diversas irradiações, identificadas na primeira coluna. . . . .	57
6.3	Seções de choque de produção de raios x $K\alpha_{2,1}$ e $K\beta_{3,1}$ . O número entre parênteses representa a incerteza associada ao valor. . . . .	57
6.4	Seção de choque de ionização da camada $K$ . $\sigma^{(1)}$ representa a seção de choque determinada a partir de $\sigma_{K\alpha_{2,1}}$ e $\sigma^{(2)}$ a seção de choque determinada a partir de $\sigma_{K\beta_{3,1}}$ . . . . .	58