



15º Congresso de Inovação, Ciência e Tecnologia do IFSP - 2024

SEÇÃO DE CHOQUE DE PRODUÇÃO DE RAIOS X K E L DE ELEMENTOS COM NÚMERO ATÔMICO INTERMEDIÁRIO: $45 < Z < 55$

RAFAEL O. HOLANDA¹, SUELEN F. BARROS²

¹Graduando em Bacharelado em Engenharia Mecânica, Bolsista PIBIFSP, IFSP, Câmpus Itaquaquecetuba, holanda.rafael@ifsp.edu.br.

²Docente do setor de Bacharelado em Engenharia Mecânica, Campus Itaquaquecetuba, suelen.barros@ifsp.edu.br.

Área de conhecimento: 1.05.05.00-8 Física Atômica e Molecular

RESUMO: Dados de ionização por impacto de elétrons são de grande importância em aplicações associadas à caracterização de materiais, sejam de interesse industrial quanto biológico, além de serem fundamentais na compreensão dos processos de colisão elétron-átomo. Seções de choque de ionização são ainda conhecidas com pouca precisão, da ordem de 10-20%, e para um número limitado de elementos e intervalos de energias. Propomos nesse projeto obter medidas de seção de choque de produção de raios x K e L de elementos com número atômico intermediário ($40 < Z < 50$) por impacto de elétrons de 10 keV, ou desde o limiar de ionização K do elemento, até 100 keV. Essa pesquisa será realizada em colaboração com o Instituto de Física da Universidade de São Paulo, onde os experimentos foram realizados no Microtron de São Paulo. Os resultados prévios permitiram obter seções de choque de produção de raios x K α e K β da prata ($Z=47$) com precisão da ordem de 8% e 6%, respectivamente, e, a partir desses resultados, seção de choque de ionização K da prata com precisão da ordem de 8%.

PALAVRAS-CHAVE: produção de raios x; ionização atômica; detectores semicondutores; seção de choque; eficiência.

K AND L IONIZATION CROSS-SECTIONS FOR ELEMENTS WITH INTERMEDIATE ATOMIC NUMBERS: $45 < Z < 55$

ABSTRACT: Electron impact ionization data are of great importance in applications associated with the characterization of materials, whether of industrial or biological interest, in addition to being fundamental in understanding electron-atom collision processes. These data are still known with little precision, on the order of 10-20%, and for a limited number of elements and energy ranges. In this project, we propose to obtain measurements of the cross section of the production of K and L x-rays of elements with an intermediate atomic number ($40 < Z < 50$) by electron impact of 10 keV, or from the element's K ionization threshold, up to 100 keV. This research will be carried out in collaboration with the Physics Institute of the University of São Paulo, where the experiments were carried out at Microtron de São Paulo. Our previous results made it possible to obtain x-ray production cross sections K α and K β of silver ($Z=47$) with precision of the order of 8% and 6%, respectively, and, from these results, ionization cross section K of silver with accuracy of the order of 8%.

KEYWORDS: x-ray production; atomic ionization; semiconductor detectors; shock section; efficiency.

INTRODUÇÃO

Essa pesquisa está sendo realizada em colaboração com o Instituto de Física da Universidade de São Paulo. Atualmente, o Microtron fornece elétrons com energia entre 10 e 100 keV e corrente contínua, se consagrado como uma referência em medidas de interação da radiação com a matéria.

A colisão ou interação de duas partículas é geralmente descrita em termos de seção de choque. Essa grandeza está diretamente relacionada com a probabilidade de ocorrência de uma interação em um determinado processo físico. No caso particular desse trabalho, tratamos da seção de choque de ionização por impacto de elétrons das camadas K e L , ou seja, a probabilidade de que uma dessas camadas seja ionizada (tenha um elétron arrancado) quando for incidido sobre ela um feixe de elétron de energia E . As seções de choque de ionização de camadas internas por impacto de elétrons são fundamentais para análises quantitativas em espectroscopia de elétrons Auger (AES), microanálise por sonda eletrônica (EPMA) e espectroscopia de perda de energia de elétrons (EELS), assim como para outras aplicações em áreas diversas (LLOVET et al., 2000). Diante desse contexto, a obtenção de dados experimentais de seções de choque de produção de raios x e de ionização se mostram relevantes, já que esses resultados contribuirão para reduzir a escassez de dados, principalmente no caso da camada L em geral e da camada K de elementos ainda não medidos, como é o caso do Paládio (Pd), que será o próximo elemento a ser investigado nessa pesquisa.

Nesse trabalho foi realizado a calibração de energia, largura e eficiência do detector *Silicon Drift* (SDD) usado nas medidas com os alvos do experimento, afim de obter as medidas de seção de choque de produção de raios x $K\alpha$ e $K\beta$ e seção de choque de ionização K para os elementos Ag ($Z=47$) e Pd ($Z=46$), por impacto de elétrons com energias desde o limiar de ionização K dos elementos, até 100keV.

MATERIAL E MÉTODOS

Os espectros deste trabalho foram obtidos utilizando-se um *Silicon Drift Detector* (SDD) de 25 mm² e área útil de 17 mm², com resolução de aproximadamente 140 eV na energia de 6,4 keV. Embora seja semelhante aos detectores de HPGe, de maior volume, a detecção de raios x abaixo de 30 keV tem muitas especificidades (JENKINS et al, 1995). Os alvos empregados nas medidas foram confeccionados no Laboratório de Filmes Finos e no Laboratório de Materiais Magnéticos do IFUSP. Eles são compostos de filmes finos dos elementos investigados, aproximadamente 20 µg/cm², depositados sobre substratos de carbono com espessura da ordem de 10 µg/cm² (VANIN et al, 2019). As espessuras foram determinadas no Laboratório de Feixes Iônicos, também pertencente ao IFUSP.

A primeira etapa dessa pesquisa se deu pela calibração do detector SDD empregado na medida. O trabalho envolve inicialmente a identificação e ajuste dos picos de raios x e raios gama para cada uma das fontes radiativas empregadas durante as medidas de calibração, sendo elas: ²⁴¹Am, ⁵⁷Co e ¹³³Ba. É bem estabelecido na literatura que picos de raios gama são descriptivos por uma gaussiana, enquanto que os picos de raios x por uma função Voigt (KNOLL, 2000). Com a análise dos parâmetros obtidos com os ajustes, foi possível realizar a calibração de energia e largura do detector SDD. Após o ajuste dos parâmetros das funções aos picos e estimadas a área dos picos das fontes de calibração, obtidos os valores de meia-vida, atividade da fonte no dia da medida e tempo de exposição, foi estimada a eficiência absoluta do detector. A partir disso, foi possível esboçar graficamente a variação de eficiência do SDD para diferentes energias. Aos dados experimentais de eficiência absoluta foram ajustados os parâmetros do modelo de eficiência proposto por Seltzer (1981).

Na segunda etapa do trabalho foram analisados os espectros de raios x da prata ($Z=47$) medidos pelo SDD, em diferentes energias do feixe de elétrons, sendo elas: 25,82 keV, 27,78 keV, 31,20 keV, 33,65 keV, 35,65 keV, 38,0 keV, 40,0 keV, 45,0 keV, 50,0 keV, 55,0 keV, 60,0 keV, 70,0 keV, 80,0 keV, 90,0 keV e 100,0 keV. Afim de calcular a seção de choque de produção de raios x dos elementos investigados, foram identificados os picos e raios x K e L em todos os espectros estudados. Entretanto, até o momento da escrita deste resumo, apenas os parâmetros que descrevem os picos de raios x $K\alpha_1$, $K\alpha_2$, $K\beta_1$ e $K\beta_3$ da prata foram determinados por meio do ajuste da função Voigt aos espectros. A FIGURA 1 mostra o ajuste das funções Voigt ao dbleto dos raios x $K\alpha_1$ e $K\alpha_2$ para o espectro da prata obtido com o feixe de elétrons na energia 45keV, o qui-quadrado reduzido para este ajuste foi de 0,97, e o mesmo recurso foi empregado para os ajustes realizados com os espectros de outras energias.

A partir dos parâmetros obtidos com os ajustes, foram calculadas as seções de choque de produção de raio x $K\alpha$ e $K\beta$ da prata empregando-se a *equação 1*, que assume que a espessura do alvo seja suficientemente fina para que perda de energia dos elétrons dentro dele possa ser desconsiderada:

$$Equação 1 \quad \sigma^X(E) = \frac{A}{N_e \mathcal{M} d \varepsilon_{abs}(E)}$$

em que, A corresponde à área do pico de raios x com energia E que está sendo investigado (nesse caso, em partir, essa área foi estimada pela soma das áreas dos picos $K\alpha_1$ e $K\alpha_2$ para o grupo $K\alpha$ e $K\beta_1$ e $K\beta_2$ para o grupo $K\beta$, \mathcal{M} e d correspondem ao número de átomos do alvo por unidade de volume no alvo e a espessura do alvo, respectivamente e $\varepsilon_{abs}(E)$ - a eficiência absoluta do detector na energia E do pico de raio x.

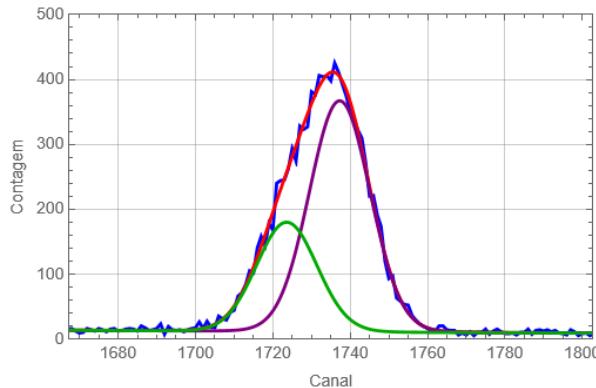


FIGURA 1: Picos de raios x $K\alpha_1$ (linha roxa) $K\alpha_2$ (linha verde) do espectro da prata obtido com o feixe de 45 keV, com as funções Voigt ajustadas.

A partir dos valores de seção de choque de produção de raios x $K\alpha$ determinados com a *equação 1* foi possível obter as seções de choque de ionização da camada K da prata por meio da *equação 2*:

$$Equação 2 \quad \sigma^K(E) = \frac{\sigma_{K\alpha}^X(E)}{\omega \frac{\Gamma_{K\alpha}}{\Gamma_{K_{TOTAL}}}}$$

em que $\sigma_{K\alpha}^X(E)$ corresponde à seção de choque de produção de raios x $K\alpha$ da prata; ω corresponde ao *yield fluorescente* da prata, obtido de Krause (1979); $\Gamma_{K\alpha}$ corresponde à taxa da produção de raios x $K\alpha$ da prata, obtida de Scofield (1974) e $\Gamma_{K_{TOTAL}}$ corresponde à taxa total de produção de raios x da camada K .

Os valores obtidos para as seções de choque de produção de raios x e para a ionização da camada K nas diferentes energias do feixe foram comparados graficamente para melhor visualização da dependência da seção de choque da prata em função da energia do feixe de elétrons utilizado no processo experimental.

Até o momento, os resultados experimentais obtidos para as medidas de seção de choque de ionização K do alvo, foram comparados com outras medidas já existentes na literatura, e com as medidas de seção de choque de produção de raios x K calculadas a partir do modelo de Born de ondas distorcidas – DWBA (BOTE et al, 2009). Todas as análises dos espectros foram realizadas com o uso dos softwares Microsoft Excel e Wolfram Mathematica.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Quanto a calibração de eficiência presente na figura 2, o comportamento do SDD mostrou-se satisfatório quando comparado ao previsto pela curva teórica ajustada ao conjunto de dados calculados, uma vez que os parâmetros ajustados com o modelo, a saber, espessura e raio ativo do detector, estavam condizentes com o que é estabelecido pelo fabricante. Além disso, para validar a calibração foi realizado o cálculo dos resíduos reduzidos do ajuste, onde foi observada uma flutuação dos dados dentro do intervalo dos três desvios padrões.

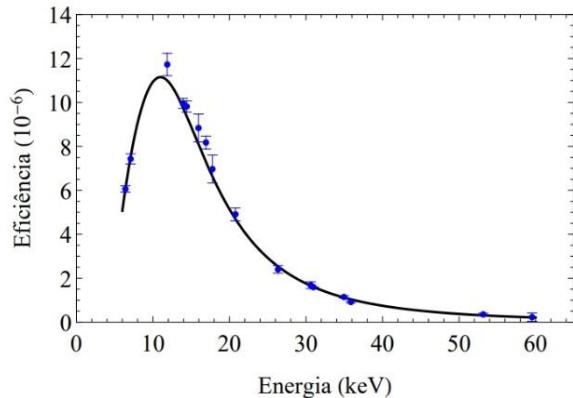


FIGURA 2: Gráfico de dispersão da eficiência em função da energia com o ajuste da função modelo.

A figura 3 apresenta em uma mesma escala a dependência, seções de choque de produção de raios x $K\alpha$ e $K\beta$ da prata, em função da energia do feixe de elétrons. Cabe destacar aqui que foi possível obter medidas poucos eVs acima do limiar de ionização da prata com o procedimento de análise empregado. O limiar de ionização K da prata é de 25,51 keV (DESLATTES, 2003), e nosso primeiro dado de seção de choque de produção de raios x $K\alpha$ é para a energia de 25,82 keV. Para essa energia não foi possível obter a seção de choque de produção de raios x $K\beta$ devido à baixa estatística de contagem no espectro. É nítido que da figura 3 que a seção de choque de produção de raios x da prata cresce com a energia até atingir um máximo em torno de 80 keV e depois permanece constante dentro das barras de incerteza até os 100 keV.

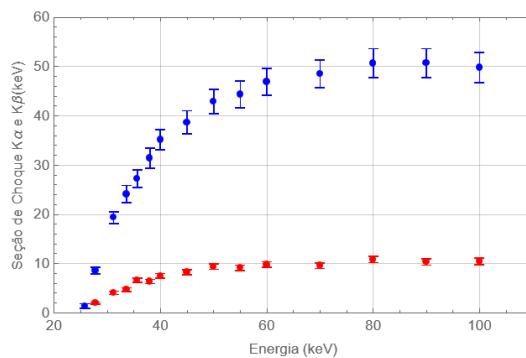


FIGURA 3: Medidas de seção de choque de produção de raios X $K\alpha$ (azul) e $K\beta$ (vermelho) da prata ($Z=47$), em função da energia.

Aplicando a *equação 2* e utilizando os valores obtidos para a seção de choque de produção de raios x $K\alpha$ medidos, foram estimadas as de seção de choque de ionização da camada K da prata e suas incertezas, para as diferentes energias do feixe de elétrons utilizado no processo experimental. Os valores aqui estimados estão apresentados na TABELA 1.

Para melhor visualizar a dependência da seção de choque de ionização K da prata com a energia, os valores presentes na TABELA 1 foram dispostos em um gráfico, junto aos dados mais

recentes medidos de seção de choque encontrados na literatura (VANIN et al. 2016), e com a curva obtida para a seção de choque de produção de raios x K calculada a partir do modelo teórico de Born de ondas distorcidas (DWBA). A figura 4 possibilita uma comparação direta entre os dados presentes na literatura, o modelo DWBA e as medidas obtidas neste trabalho.

O uso da equação 1 para se estimar as seções de choque de produção de raios x somente é válido quando o alvo é suficientemente fino, de modo que os elétrons do feixe o atravessem praticamente sem interagir. Embora o alvo deste experimento seja fino, $17,7(9) \mu\text{g}/\text{cm}^2$, os elétrons que os atravessam, sobretudo os de baixa energia, sofrem algumas interações antes de sair do alvo e essa correção precisa ser feita. A próxima etapa deste trabalho consiste em estimar esse fator de correção por meio de simulações Monte Carlo, para que os dados da TABELA 1 sejam corrigidos. Essa correção é esperada reduzir as seções de choque aqui calculadas, sem contudo, mudar a forma da dependência dela com a energia.

TABELA 1: Medidas de seção de choque de ionização da camada K da prata para as energias medidas no experimento

Energia (keV)	σ_K (b)	Incerteza σ_K (b)
100,00	72,68	4,57
90,00	74,05	4,36
80,00	73,96	4,40
70,00	70,85	4,16
60,00	68,49	4,03
55,00	64,78	4,04
50,00	62,61	3,67
45,00	56,48	3,51
40,00	51,29	3,05
38,00	45,87	2,99
35,65	39,77	2,62
33,65	35,19	2,63
31,20	28,27	1,78
27,78	12,54	0,96
25,82	1,99	0,70

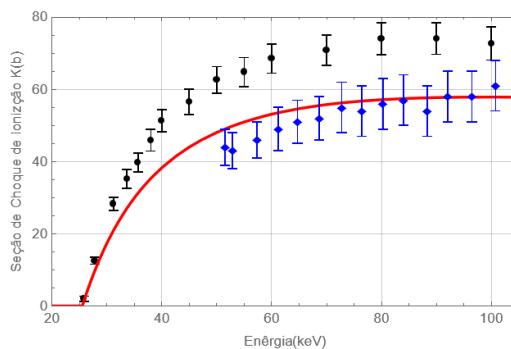


Figura 4: Gráfico comparativo entre as medidas seções de choque de ionização K da prata deste trabalho (pontos em preto), medidas presentes na literatura (VANIN et al. 2016) (pontos em azul), e o modelo teórico DWBA (curva contínua vermelha).

CONCLUSÕES

Até o presente momento foram obtidas as seções de choque de produção de raios x $K\alpha$ e $K\beta$, e de ionização K da prata para espectros obtidos com feixe de elétrons com energia desde o limiar de

ionização K da prata até 100 keV. As medidas de seção de choque de produção de raios x $K\alpha$ e $K\beta$ foram estimadas com uma incerteza relativa de 8% e 6%, respectivamente, já as medidas de seção de choque de ionização da camada K da prata foram obtidas com uma incerteza relativa média de 8%. Comparando os resultados experimentais para as medidas de seção de choque de ionização K com a curva prevista teoricamente, é visto que os dados experimentais possuem o mesmo comportamento com a energia que é previsto pela teoria, havendo um crescimento na seção de choque até um dado limite que depois tende a diminuir, em maiores energias os dados experimentais estão sistematicamente acima dos valores previstos pelo modelo teórico, enquanto há um acordo razoável entre teoria e experimento na região próxima ao limiar. Os resultados obtidos para as medidas de seção de produção de raios x e de ionização K até então são prévios, e passarão por correções devido à abertura do feixe dentro do alvo até o fim desta pesquisa.

CONTRIBUIÇÕES DOS AUTORES

S.F.B realizou as medidas e contribuiu com a redação e análise de dados deste trabalho.

R. O. H. desenvolveu a análise de dados e a redação do trabalho. Todos os autores contribuíram com a revisão do trabalho e aprovaram a versão submetida.

AGRADECIMENTOS

Agradecimento ao Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica e Tecnológica (PIBIFSP) pelo suporte financeiro concedido através da liberação da bolsa de iniciação científica referente ao edital 32/2022 alterado pelo edital de retificação 06/2023.

REFERÊNCIAS

BOTE, David et al. 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. **Atomic Data and Nuclear Data Tables**, v. 95, n. 6, p. 871-909, 2009.

DESLATTES, R; KESSLER, E; INDELICATO, P; LEUNG, B; LINDROTH, E; ANTON, J. **X-ray transition energies: New approach to a comprehensive evaluation**. *Reviews of Modern Physics*, v. 75, 2003.

JENKINS, R., Manne, R., Robin, R., SENEMAUD, C. **Nomenclature system for x ray spectroscopy**. *Pure & Appl.*, Vol. 63, pp. 735-746, 1991.

KNOLL, G.F., **Radiation Detection and Measurement**, 3a edição (2000) Wiley.

KRAUSE, Manfred Otto. Atomic radiative and radiationless yields for K and L shells. **Journal of physical and chemical reference data**, v. 8, n. 2, p. 307-327, 1979.

LLOVET, X.; MERLET, C.; SALVAT, F. **Measurements of K-shell ionization cross sections of Cr, Ni and Cu by impact of 6.5–40 keV electrons**. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, v. 33, p. 3761-3772, 2000.

SCOFIELD, James H. Exchange corrections of K X-ray emission rates. **Physical Review A**, v. 9, n. 3, p. 1041, 1974.

SELTZER, Stephen M. Calculated response of intrinsic germanium detectors to narrow beams of photons with energies up to ~ 300 keV. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research**, v. 188, n. 1, p. 133-151, 1981.

VANIN, Vito Roberto et al. Ag K-shell ionization by electron impact: New cross-section measurements between 50 and 100 keV and review of previous experimental data. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 119, p. 14-23, 2016.

VANIN, V. R., Maidana, N. L., Mangiarotti, A., Lima, R. R., Malafronte, A. A., Barros, S. F. and Martins, M. N.. **The 10-100 keV beam line of the São Paulo Mirotron electron accelerator**, **Radiat. Phys. Chem.**, vol. 154, p. 26, 2019