

## Annex 1: PenEasy [7]

PenEasy és el programa principal (MAIN) que coordina, tal com s'ha explicat en el capítol de conceptes bàsics, les simulacions de PENELOPE. A continuació es mostra la connexió entre PENELOPE y penEasy, que es realitza a través d'un bloc comú:

→ COMMON/TRACK/E,X,Y,Z,U,V,W,WGHT,KPAR,IBODY,MAT,ILB(5) que conté les següents variables d'estat de la partícula:

- KPAR: Tipus de partícula (1:electró, 2: fotó, 3: positró).
- E: Energia de la partícula (cinètica per electrons i positrons), en eV.
- X,Y,Z: Coordenades de posició (cm).
- U,V,W: Cosinus directors de moviment.
- WGHT: Emmagatzema el pes associat a la partícula si s'utilitza reducció de varianza.
- IBODY: Identifica diferents cossos i materials amb geometries complexes.
- MAT: Material on es mou la partícula en un cos identificat a IBODY.
- ILB(5): Vector auxiliar amb 5 índexs que indiquen l'origen de la partícula quan aquesta és secundària.

Una partícula que es mogui en un material M s'assumeix que serà absorbida quan la seva energia sigui menor que un valor EABS(KPAR,M) especificat per l'usuari. L'algoritme de transport per electrons i positrons en cada material M és controlat pels següents paràmetres de simulació:

- C1 (M): Deflexió angular mitja, produïda per dispersió elàstica múltiple al llarg del recorregut lliure mig entre dos successos elàstics durs consecutius (es consideren les col·lisions dures com aquelles que impliquen un angle de desviació superior a un determinat valor de tall  $\theta > \theta_c$ ). C1(M) ha de valdre de l'ordre de 0.05, amb un valor màxim de 0.2.
- C2 (M): Màxima pèrdua mitja d'energia entre successos elàstics durs consecutius. Com abans un valor mig és 0.05 i el màxim és 0.2.
- WCC: Energia inelàstica de tall Wcc en eV, per col·lisions dures.
- WCR(M): Energia de tall Wcr en eV per emissions de radiació de frenat dures.

A la figura 1 es mostra el diagrama de fluxos per a un programa principal per a PENELOPE com és penEasy. El codi PENELOPE s'estructura de manera que el camí d'una partícula es generat com una seqüència de segments de camins. Al final de cada segment, la partícula pateix una interacció amb el medi on perd la seva energia, canvia la seva direcció de moviment i en certs casos produeix partícules secundàries.

Les subrutines que apareixen són:

- PEINIT: Llegeix els arxius de dades de diferents materials, avala les propietats de dispersió rellevants i prepara les taules de quantitats dependents de l'energia utilitzades durant la simulació.
- CLEANS: Inicia l'stock secundari.

- START: Inicia els paràmetres de la partícula. És una subrutina que cal cridar sempre abans d'iniciar la simulació d'un camí (primari o secundari) o abans de travessar un límit de superfície.
- JUMP: Determina el segment de longitud del camí fins a la següent interacció.
- KNOCK: Simula un succés d'interacció. Calcula la nova energia i direcció de moviment després de la interacció i emmagatzema l'estat inicial de les partícules secundàries quan són generades.
- SECPAR(LEFT): Estableix l'estat inicial de la partícula secundària i la treu de l'emmagatzemament secundari. El valor LEFT és el nombre de partícules secundàries que encara queden emmagatzemades en el moment de la crida.
- STORES: Emmagatzema les partícules acumulades en l'estat secundari.

El diagrama de fluxos representat a la figura 1 mostra la seqüència de rutines que s'han de cridar per generar una trajectòria qualssevol, la qual és independent del tipus de partícula generada:

- i) Es determina l'estat inicial de la partícula assumint variables d'estat KPAR, E, posició  $\hat{r} = (x, y, z)$  i la direcció de moviment  $\hat{d} = (u, v, w)$ . S'especifica el cos o material en es mou la partícula a través de IBODY i MAT, respectivament.
- ii) Es crida CLEANS per iniciar l'emmagatzematge secundari.
- iii) Es crida START per iniciar la simulació de la trajectòria.
- iv) Es crida JUMP (DSMAX, DS) per determinar la longitud DS del següent tram de recorregut.
- v) Es calcula la posició del següent succés:
  - a. Si la trajectòria creua la intersecció entre dues superfícies, la partícula s'atura en aquell punt i la longitud del pas DS s'escurça en conseqüència. Es canvia al nou material, el que es troba després de la intersecció redefinint les variables IBODY i MAT. Quan la partícula escapa del sistema, finalitza la història d'aquella trajectòria; s'incrementa el compte i es passa al pas vii). Es va al pas iii).
- vi) Es crida KNOCK per simular el següent succés:
  - a. Si l'energia de la partícula és inferior a EABS, es finalitza la trajectòria, s'incrementa el compte i es va al pas vii). Es va al pas iv).
- vii) Es crida SECPAR per iniciar la trajectòria d'una partícula secundària, de manera que automàticament surt de l'emmagatzematge.
  - a. Si LEFT>0, es va pas iii), l'estat inicial de la partícula ja s'ha establert.
  - b. Si LEFT=0, la simulació de la cascada produïda per la partícula primària acaba. Es torna al pas i) per generar una nova partícula primària.

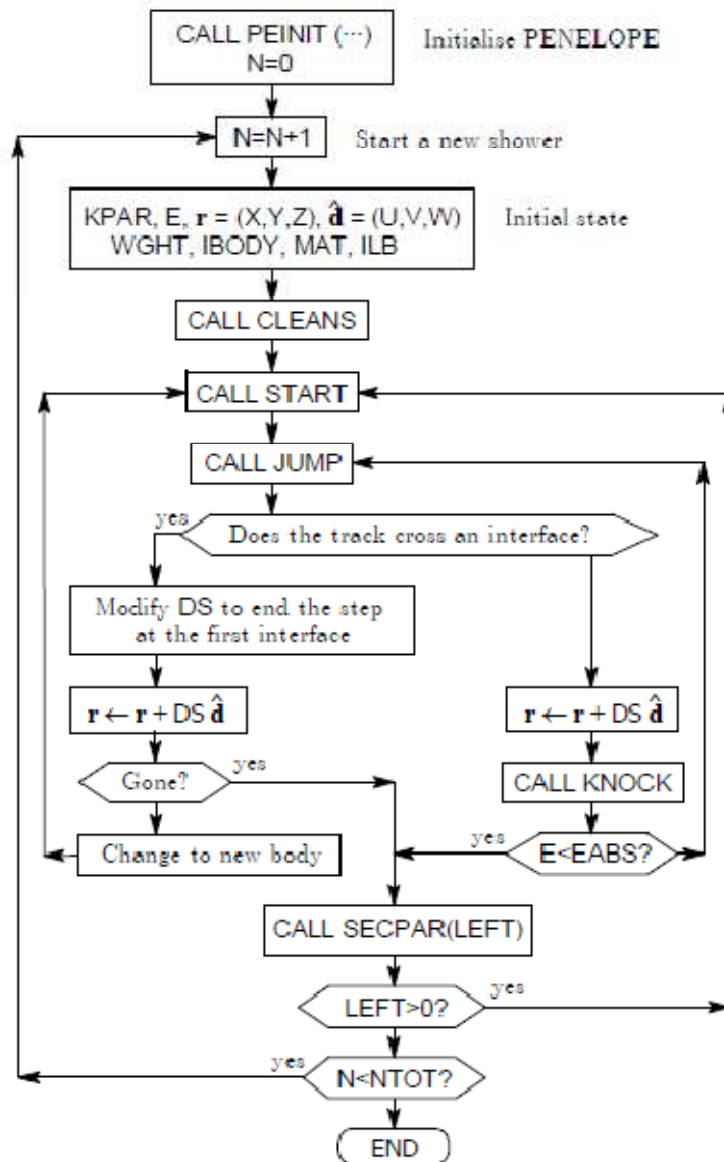


Figura 1: Diagrama de fluxos per al programa MAIN per la simulació de cascades d'electrons-fotons amb PENELOPE. [7]



















## Annex 2: Detall de la programació en PENELOPE/penEasy-eXtended de la desintegració de l'Am-241

L'Am-241 es desintegra per via alfa cap al Np-237, amb un semiperíode de 432.6 anys. En cas que després de l'emissió alfa, el Np-237 quedi directament en estat no excitat, la partícula alfa tindrà una energia de 5637.82 keV; en cas contrari els valors que pot prendre són els que es detallen a la figura 1. On es pot veure (d'esquerre a dreta) a la primera columna el nivell d'excitació que es parla, a la segona l'energia d'aquest nivell, a la tercera la probabilitat que el Np-237 quedi en aquest nivell després de la desintegració alfa de l'Am-241 i a la quarta, el "factor de reducció" (*hindrance factor*), que és en la desintegració alfa la correcció entre la vida mitja calculada i mesurada de cada nivell, és a dir,  $F = \frac{(T_{1/2})_{i\text{exp}}}{(T_{1/2})_{i\text{th}}}$ , on  $i$  fa referència a aquell nivell.

	Energy keV	Probability × 100	F
$\alpha_{0,36}$	4838,00 (13)	0,00004 (3)	47
$\alpha_{0,34}$	4882,14 (13)	0,000086	44
$\alpha_{0,33}$	4915,86 (13)	0,0007	9,5
$\alpha_{0,32}$	4971,62 (15)		
$\alpha_{0,30}$	5039,83 (15)		
$\alpha_{0,29}$	5045,49 (14)		
$\alpha_{0,28}$	5047,73 (13)		
$\alpha_{0,27}$	5091,70 (14)	0,0001	1000
$\alpha_{0,25}$	5140,81 (13)		
$\alpha_{0,24}$	5151,60 (15)	0,00011	2300
$\alpha_{0,23}$	5178,13 (13)	~ 0,0004	~ 1000
$\alpha_{0,22}$	5185,27 (13)	~ 0,0004	~ 1000
$\alpha_{0,21}$	5193,04 (16)		
$\alpha_{0,20}$	5203,70 (13)	0,0004	1400
$\alpha_{0,19}$	5219,6 (2)		
$\alpha_{0,18}$	5242,25 (13)	0,0007	1400
$\alpha_{0,17}$	5266,89 (13)	0,0003	4600
$\alpha_{0,16}$	5269,21 (13)	0,0009	1600
$\alpha_{0,15}$	5277,90 (23)	0,0006	2700
$\alpha_{0,14}$	5305,44 (13)		
$\alpha_{0,13}$	5313,40 (13)	0,0013	2100
$\alpha_{0,12}$	5321,0 (3)		
$\alpha_{0,11}$	5332,77 (13)	0,0022 (3)	1600
$\alpha_{0,9}$	5370,25 (13)	0,0005	12000
$\alpha_{0,8}$	5411,82 (13)	0,014 (3)	770
$\alpha_{0,6}$	5479,32 (13)	1,66 (3)	16,4
$\alpha_{0,5}$	5507,83 (13)	~ 0,01	~ 4000
$\alpha_{0,4}$	5534,86 (12)	13,23 (10)	4,3
$\alpha_{0,3}$	5561,92 (12)	< 0,04	> 2000
$\alpha_{0,2}$	5578,28 (12)	84,45 (10)	1,3
$\alpha_{0,1}$	5604,62 (12)	0,23 (1)	600
$\alpha_{0,0}$	5637,82 (12)	0,38 (1)	610

Figura 1: Nivells d'excitació en què pot trobar-se el Np-237 [1]

Observem doncs que la desintegració pot portar a estats excitats del Np-237, la desexcitació d'aquests provocarà l'emissió de RX i raigs gamma. Un altre procés de desexcitació és la producció de parelles però exigeix diferències entre nivells de més de 1022 keV, de manera que no es tindrà en compte perquè no afecta cap dels casos tractats.

Si s'analitzen les probabilitats de desintegració hi ha diferents fets a destacar:

- 1) La suma de probabilitats de que el Np-237 quedi en cada estat excitat ha de ser 100, ja que cada desintegració portarà a un o altre estat. Si se sumen totes obtenim el valor de **100.023 ± 0.145**, tenint en compte que a la taula s'indiquen alguns valors de forma aproximada i que per tant no se'n coneix exactament el valor.
- 2) Quan s'observen les probabilitats  $P_{\gamma+CE}$  la suma no té per què ser (ni serà) 100 ja que s'estan considerant salts entre nivells, el que sí que ha de succeir és que:
  - a. La suma de tot el que decaigui al nivell 0 més el que ja hi ha anat a parar directament per emissió alfa, haurà de ser 100. Si fem la suma dels valor que s'observen a la taula 1 obtenim el valor **99.335 ± 3.905**. En aquesta taula 1 es mostren les desexcitacions des de nivells superiors que inclouen tant l'emissió gamma com la conversió interna.

From	To	$P_{\gamma+CE}$ (%)
1	0	21.3 (30)
2	0	77.6 (25)
3	0	0.032
4	0	0.0218 (5)
9	0	0.000055 (2)
14	0	0.000172 (5)
16	0	0.000347 (9)
17	0	0.000080 (4)
22	0	0.0000251 (7)
23	0	0.0000043 (5)
26	0	0.0000039 (2)
27	0	0.00000025 (3)
28	0	0.00000283 (6)
32	0	0.00000095 (7)
33	0	0.000197 (5)
34	0	0.00000789 (11)
35	0	0.00000481 (5)
37	0	0.00000033
39	0	0.00000061 (6)
40	0	0.00000019 (3)
41	0	0.000000010 (3)
42	0	0.00000004 (1)
43	0	0.00000010 (2)

Taula 1 [1]

- b. Com que  $P_{\gamma+CE}$  considera tots els tipus d'emissió (RX i emissió gamma) el que arribi a cada nivell, ja sigui per desintegració alfa directa o procedent de nivells superiors, haurà de ser tot el que surti. El balanç ha de ser 0. Analitzem això a les taules 2, 3, 4, 5, 6, 7 i 8 per als nivells 8, 6, 5, 4, 3, 2 i 1, respectivament, que són els que tractem al programa PENELOPE/penEasy-eXtended.

**Nivell 8:**

El que arriba		El que surt	
Procés	P (%)	Procés	P (%)
$\alpha_{0,8}$	0.014 (3)	$P_{\gamma+CE} (8 \rightarrow 6)$	0.013 (4)
$P_{\gamma+CE} (18 \rightarrow 8)$	0.000427 (26)	$P_{\gamma+CE} (8 \rightarrow 4)$	0.00675 (30)
$P_{\gamma+CE} (36 \rightarrow 8)$	0.00000142 (12)	$P_{\gamma+CE} (8 \rightarrow 3)$	0.000087 (6)
$P_{\gamma+CE} (38 \rightarrow 8)$	0.00000056 (4)		
<b>Total</b>	<b>0.014 ± 0.003</b>	<b>Total</b>	<b>0.019 ± 0.004</b>

Taula 2

**Nivell 6:**

El que arriba		El que surt	
Procés	P (%)	Procés	P (%)
$\alpha_{0,6}$	1.66 (3)	$P_{\gamma+CE} (6 \rightarrow 4)$	1.19 (16)
$P_{\gamma+CE} (8 \rightarrow 6)$	0.013 (4)	$P_{\gamma+CE} (6 \rightarrow 2)$	0.329 (10)
$P_{\gamma+CE} (11 \rightarrow 6)$	0.00172 (5)	$P_{\gamma+CE} (6 \rightarrow 1)$	0.00533 (26)
$P_{\gamma+CE} (13 \rightarrow 6)$	0.00011 (5)		
$P_{\gamma+CE} (20 \rightarrow 6)$	0.000011 (4)		
$P_{\gamma+CE} (33 \rightarrow 6)$	0.000000460 (21)		
$P_{\gamma+CE} (34 \rightarrow 6)$	0.0000080 (5)		
$P_{\gamma+CE} (36 \rightarrow 6)$	0.0000076 (5)		
<b>Total</b>	<b>1.67 ± 0.03</b>	<b>Total</b>	<b>1.52 ± 0.16</b>

Taula 3

**Nivell 5:**

El que arriba		El que surt	
Procés	P (%)	Procés	P (%)
$\alpha_{0,5}$	~0.01	$P_{\gamma+CE} (5 \rightarrow 1)$	0.000047 (16)
$P_{\gamma+CE} (11 \rightarrow 5)$	0.000021 (3)		
$P_{\gamma+CE} (20 \rightarrow 5)$	0.000000966 (21)		
$P_{\gamma+CE} (22 \rightarrow 5)$	0.000257 (7)		
$P_{\gamma+CE} (29 \rightarrow 5)$	0.0000012		
$P_{\gamma+CE} (30 \rightarrow 5)$	0.0000032 (4)		
$P_{\gamma+CE} (36 \rightarrow 5)$	0.00000051 (7)		
$P_{\gamma+CE} (37 \rightarrow 5)$	0.00000091 (7)		
<b>Total</b>	<b>0.01</b>	<b>Total</b>	<b>0.000047 ± 0.000016</b>

Taula 4

**Nivell 4:**

El que arriba		El que surt	
Procés	P (%)	Procés	P (%)
$\alpha_{0,4}$	13.23 (10)	$P_{\gamma+CE} (4 \rightarrow 2)$	12.1 (16)
$P_{\gamma+CE} (6 \rightarrow 4)$	1.19 (16)	$P_{\gamma+CE} (4 \rightarrow 1)$	0.0039 (5)
$P_{\gamma+CE} (8 \rightarrow 4)$	0.00675 (30)	$P_{\gamma+CE} (4 \rightarrow 0)$	0.0218 (5)
$P_{\gamma+CE} (9 \rightarrow 4)$	0.000178 (9)		
$P_{\gamma+CE} (13 \rightarrow 4)$	0.00011 (5)		
$P_{\gamma+CE} (28 \rightarrow 4)$	0.00000080 (6)		
$P_{\gamma+CE} (33 \rightarrow 4)$	0.000065 (5)		
$P_{\gamma+CE} (34 \rightarrow 4)$	0.0000410 (25)		
<b>Total</b>	<b>14.4 ± 0.2</b>	<b>Total</b>	<b>12.1 ± 1.6</b>

Taula 5

**Nivell 3:**

El que arriba		El que surt	
Procés	P (%)	Procés	P (%)
$\alpha_{0,3}$	<0.04 (10)	$P_{\gamma+CE} (3 \rightarrow 1)$	~0.42 (9)
$P_{\gamma+CE} (8 \rightarrow 3)$	0.000087 (6)	$P_{\gamma+CE} (3 \rightarrow 0)$	0.032
$P_{\gamma+CE} (13 \rightarrow 3)$	0.00000155 (3)		
$P_{\gamma+CE} (16 \rightarrow 3)$	0.0000173 (4)		
$P_{\gamma+CE} (20 \rightarrow 3)$	0.00000133 (5)		
$P_{\gamma+CE} (22 \rightarrow 3)$	0.000225 (9)		
$P_{\gamma+CE} (23 \rightarrow 3)$	0.000037 (7)		
$P_{\gamma+CE} (30 \rightarrow 3)$	0.00000113 (11)		
$P_{\gamma+CE} (34 \rightarrow 3)$	0.00000334 (8)		
$P_{\gamma+CE} (37 \rightarrow 3)$	0.00000151 (6)		
$P_{\gamma+CE} (39 \rightarrow 3)$	0.00000062 (0)		
<b>Total</b>	<b>0.04 ± 0.10</b>	<b>Total</b>	<b>0.45 ± 0.09</b>

Taula 6

**Nivell 2:**

El que arriba		El que surt	
Procés	P (%)	Procés	P (%)
$\alpha_{0,2}$	84.45 (10)	$P_{\gamma+CE} (2 \rightarrow 1)$	21 (5)
$P_{\gamma+CE} (4 \rightarrow 2)$	12.1 (16)	$P_{\gamma+CE} (2 \rightarrow 0)$	77.6 (25)
$P_{\gamma+CE} (6 \rightarrow 2)$	0.329 (10)		
$P_{\gamma+CE} (9 \rightarrow 2)$	0.00313 (6)		
$P_{\gamma+CE} (13 \rightarrow 2)$	0.000018 (7)		
$P_{\gamma+CE} (16 \rightarrow 2)$	0.00000210 (31)		
$P_{\gamma+CE} (26 \rightarrow 2)$	0.0000129 (2)		

$P_{\gamma+CE} (31 \rightarrow 2)$	0.00000128 (5)		
$P_{\gamma+CE} (33 \rightarrow 2)$	0.00045 (10)		
$P_{\gamma+CE} (34 \rightarrow 2)$	0.0000055 (3)		
$P_{\gamma+CE} (39 \rightarrow 2)$	0.00000123 (7)		
$P_{\gamma+CE} (40 \rightarrow 2)$	0.00000008		
<b>Total</b>	<b>96.9 ± 1.6</b>	<b>Total</b>	<b>98.6 ± 5.6</b>

Taula 7

**Nivell 1:**

El que arriba		El que surt	
Procés	P (%)	Procés	P (%)
$\alpha_{0,1}$	0.23 (1)	$P_{\gamma+CE} (1 \rightarrow 0)$	21.3 (30)
$P_{\gamma+CE} (2 \rightarrow 1)$	21 (5)		
$P_{\gamma+CE} (3 \rightarrow 1)$	~0.42 (9)		
$P_{\gamma+CE} (4 \rightarrow 1)$	0.0039 (5)		
$P_{\gamma+CE} (5 \rightarrow 1)$	0.000047 (16)		
$P_{\gamma+CE} (6 \rightarrow 1)$	0.00533 (26)		
$P_{\gamma+CE} (9 \rightarrow 1)$	0.0000080 (8)		
$P_{\gamma+CE} (13 \rightarrow 1)$	0.00000318 (8)		
$P_{\gamma+CE} (16 \rightarrow 1)$	0.00084 (4)		
$P_{\gamma+CE} (17 \rightarrow 1)$	0.00000556 (10)		
$P_{\gamma+CE} (22 \rightarrow 1)$	0.000036 (5)		
$P_{\gamma+CE} (23 \rightarrow 1)$	0.000039 (9)		
$P_{\gamma+CE} (27 \rightarrow 1)$	0.00000210 (41)		
$P_{\gamma+CE} (32 \rightarrow 1)$	0.00000124 (5)		
$P_{\gamma+CE} (33 \rightarrow 1)$	0.0000325 (6)		
$P_{\gamma+CE} (35 \rightarrow 1)$	0.00000794 (8)		
$P_{\gamma+CE} (36 \rightarrow 1)$	0.00000504 (6)		
$P_{\gamma+CE} (37 \rightarrow 1)$	0.00000303 (5)		
$P_{\gamma+CE} (39 \rightarrow 1)$	0.00000021 (4)		
$P_{\gamma+CE} (40 \rightarrow 1)$	0.00000033 (6)		
<b>Total</b>	<b>21.66 ± 5.0</b>	<b>Total</b>	<b>21.3 ± 3.0</b>

Taula 8

Es pot observar que el que s'ha dit de tenir un balanç 0 es complex (tenint en compte les incerteses) per als nivells 6, 2 i 1. Però en canvi, per al nivell 5 veiem que arriba molt més del que surt, per al nivell 4 no és tan exagerat però passa una cosa similar i, per al nivell 3, surt molt més del que arriba. Això no hauria de ser possible però a les taules es pot observar que hi ha certes emissions gamma que no tenen cap probabilitat, això es deu a que són valors que es teoritza que hi ha d'haver però que no s'han observat encara de forma experimental, són casos com els de les emissions de 27-keV (que correspondria a una emissió  $4 \rightarrow 3$ ) o 54-keV (que correspondria a una emissió  $5 \rightarrow 3$ ) [2] entre d'altres que es poden observar. Aquests però, són destacables perquè en el primer cas aquesta emissió corregiria el balanç positiu que hi ha al nivell 4 (arriba més del que surt) i de forma similar, el segon cas



corregiria el també balanç positiu del nivell 5; ahora entre els dos podrien corregir el balanç negatiu del nivell 3 (surt molt més del que arriba).

$$\Delta 5 = 0.009953 \pm 0.000016 \%$$

$$\Delta 4 = 2.3 \pm 1.6 \%$$

$$\Delta 3 = -0.41 \pm 0.13 \%$$

Tenint en compte les incerteses podem veure que el faltant del nivell 3 es pot veure compensat pel sobrant de 5 i 4. Malgrat tot, com que de moment aquests valors només formen part de la teoria no s'incorporaran en el programa PENELOPE/penEasy-eXtended.

Hem comentat que la probabilitat dels nivells és  $P_{\gamma+CE}$ , amb això s'inclou tant l'emissió gamma com l'emissió de raig X, que com s'ha dit anteriorment són els processos que considerarem. Es tracta de processos competitiu de desexcitació del nucli-fill.

L'emissió de raigs X es produeix pel procés de **conversió interna**, en el qual l'energia disponible (diferència entre nivells energètics) es transfereix a un electró que sortirà de l'àtom: un *electró de conversió interna*. Aquest electró és monoenergètic i té una energia igual a la transició entre nivells menys l'energia necessària per arrencar l'electró de l'escorça i menys una petita energia de retrocés del nucli. L'anàlisi de la distribució energètica d'aquests electrons mostra pics corresponents a capes electròniques particulars, com són les K, L o M. La pèrdua d'un electró d'aquestes capes deixa una vacant que serà ocupada per un electró d'una capa superior. Com a conseqüència d'aquest fet hi haurà **emissió de raigs X i electrons Auger**.

Com s'ha dit la conversió interna és un procés competitiu amb l'emissió gamma, la relació entre les dues probabilitats és coneix com el **coeficient de conversió interna**:

$$\alpha = \frac{\text{nombre d'electrons IC emessos}}{\text{nombre de raigs gamma emessos}} \quad (1)$$

Aquest coeficient es pot subdividir en  $\alpha_K$ ,  $\alpha_L$ , etc. On es consideren els electrons de les capes K, L, etc. Els valors d'aquesta  $\alpha$  dependrà de la multipolaritat, l'energia de transició i el número atòmic: creix a mida que la vida mitja i Z augmenten i a mida que  $\Delta E$  decreix. Per Z elevades, transicions isomèriques entre nivells que tenen poca energia de transició poden ser convertits al 100%.

Aquesta energia de transició de la qual parlem es defineix com:

$$E_\gamma = (E_i - E_f) - E_r \quad (2)$$

- $E_i - E_f$ : diferència energètica entre l'estat inicial i el final
- $E_r$ : energia de retrocés del nucli, que en general podem considerar negligible. Només prendrà importància per transicions molt energètics i Z molt baixos.

Per tant per conversió interna, l'electró s'emportarà la següent energia:

$$E_{ceX} = E_\gamma - E_X \quad (3)$$

- $E_X$ : energia de lligadura de l'electró a la capa X.

#### Capa K:

La probabilitat de vacants K creades durant processos de conversió interna vindrà donada per:

$$P_{ceK} = P_\gamma \cdot \alpha_K \quad (4)$$

- $P_\gamma$ : probabilitat d'emissió gamma
- $\alpha_K$ : coeficient de conversió interna de la capa K

Llavors donat un radionucli, el total de vacants K creades si tenim en compte totes les desintegracions serà:

$$n_K = \sum P_\epsilon \cdot P_K + \sum P_\gamma \cdot \alpha_K \quad (5)$$

El primer terme fa referència a les vacants creades per captura electrònica, però en el nostre cas no té més interès perquè la desintegració és de tipus alfa.

#### K-shell fluorescence yield:

La capa K no té subcapes. El yield de fluorescència de la capa K ( $w_K$ ) és la probabilitat que l'emplenament d'una vacant a la capa K vagi acompanyada de radiació  $X_K$ , per tant  $0 \leq w_K \leq 1$ :

$$w_K = \frac{n_{XK}}{n_{XK} + n_{AK}} = \frac{P_{XK}}{P_{XK} + P_{AK}} \quad (6)$$

- $n_{XK}$ : nombre d'emissions de raigs  $X_K$
- $n_{AK}$ : nombre d'emissions d'electrons Auger-K

Per tant extraiem que el nombre de raigs X produïts (en els que ens interessarem):

$$P_{XK} = w_K n_K \quad (7)$$

En el cas dels electrons Auger el que succeeix és que la vacant de la capa K s'omple amb un electró d'una capa superior, i l'energia sobrant es transfereix a un altre electró, d'una capa més exterior, el qual surt disparat.

L'energia d'aquest raig X serà:

$$E_{XK} = E_K - E_X \quad (8)$$

- $E_K, E_X$ : energia de lligament dels electrons a la capa K i X

D'aquesta manera l'energia dels raigs X està perfectament definida. Els classifiquem de la següent manera:

$$\begin{aligned}
 K\alpha & \left\{ \begin{array}{ll} K\alpha_2 & K-L_2 \\ K\alpha_1 & K-L_3 \end{array} \right. \\
 K'\beta_1 & \left\{ \begin{array}{ll} K\beta_3 & K-M_2 \\ K\beta_1 & K-M_3 \\ K\beta'_5 & K-M_4 \\ K\beta_5 & K-M_5 \end{array} \right. \\
 K'\beta_2 & \left\{ \begin{array}{ll} K\beta_2 \left\{ \begin{array}{ll} K\beta''_2 & K-N_2 \\ K\beta'_1 & K-N_3 \end{array} \right. \\ K\beta_4 \left\{ \begin{array}{ll} K\beta''_4 & K-N_4 \\ K\beta_4 & K-N_5 \end{array} \right. \end{array} \right. & [4]
 \end{aligned}$$

### Capa L:

Les vacants originades a la capa L poden tenir orígens diferents:

- Captura electrònica a la capa L (nosaltres en prescindirem ja que no tenim captura electrònica).
- Conversió interna a la capa L.
- Reagrupament després que s'hagi produït una vacant a la capa K, de manera que es produeix una transició  $L \rightarrow K$ .

Així doncs el total de vacants creades serà:

$$n_L = \sum P_\epsilon \cdot P_L + \sum P_\gamma \cdot \alpha_L + n_K \cdot n_{KL} \quad (9)$$

- $n_{KL}$ : nombre total de vacants creades per transferències  $L \rightarrow K$ .

La transferència de vacants prové de l'emissió  $X_K$  (raigs  $K\alpha_1$  i  $K\alpha_2$ ) i de l'emissió d'electrons Auger-K (KLL i KLX, en el primer cas la última L implica que l'electró Auger pertanyia a la capa L, mentre que en el segon la X indica que podem parlar de  $X=M, N, \dots$ ). Anomenant  $P_{XK\alpha} = K\alpha$  (probabilitat d'emissió de raigs X per transició K-L) i  $P(KLL)=KLL$  (probabilitat que es produeixi un electró Auger d'aquest tipus), etc. direm:

$$n_{KL} = w_K \frac{K\alpha}{K\alpha + K\beta} + (1 - w_K) \frac{2KLL + KLX}{KLL + KLX + KXY} \quad (10)$$

On el primer terme ens dona la probabilitat per emissió de raigs X i el segon per emissió d'electró Auger. Com que el que ens interessa la probabilitat que hi hagi transició  $L \rightarrow K$ , cada terme ha d'anar ponderat; en el primer cas la possibilitat d'emissió raig X per decaïment  $L \rightarrow K$  sobre el total que també inclou  $M, N \rightarrow K$  i, en el segon de forma similar ja que el total també inclou que el decaïment inicial (previ a l'emissió de l'Auger) sigui des de capes superiors a la L. Fixem-nos que en aquest cas KLL conta doble perquè causa dues vacants, la de l'electró que cau  $L \rightarrow K$  i el que se'n va (Auger).

**L-shell fluorescence yield:**

Per una subcapa  $L_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ), és la probabilitat que en omplir una vacant  $L_i$  vingui acompanyat per una emissió d'un raig X  $L_i$ .

Això porta a la definició de tres yields de fluorescència L:  $w_{L1}$ ,  $w_{L2}$  i  $w_{L3}$ :

$$w_{Li} = \frac{P_{XLi}}{n_{Li}} \quad (i = 1,2,3) \quad (11)$$

On, com en el cas anterior, el numerador representa la probabilitat d'emissió de RX-L  $i$ , el denominador, el nombre de vacants creades a la capa L (raigs X i electrons Auger)

Aquí els raigs X es classifiquen com:

$$\begin{array}{l}
 L_\ell \{ \ell \quad L_3-M_1 \\
 L_\alpha \left\{ \begin{array}{l} \alpha_2 \quad L_3-M_4 \\ \alpha_1 \quad L_3-M_5 \end{array} \right. \\
 L_\eta \{ \eta \quad L_2-M_1 \\
 L_\beta \left\{ \begin{array}{l} \beta_8 \quad L_3-N_1 \\ \beta_4 \quad L_1-M_2 \\ \beta_3 \quad L_1-M_3 \\ \beta_{10} \quad L_1-M_4 \\ \beta_9 \quad L_1-M_5 \\ \beta_1 \quad L_2-M_4 \\ \beta_2 \quad L_3-N_5 \\ \beta_{15} \quad L_3-N_4 \\ \beta_7 \quad L_3-O_1 \\ \beta_5 \quad L_3-O_4, 5 \end{array} \right. \\
 L_\gamma \left\{ \begin{array}{l} \gamma_2 \quad L_1-N_2 \\ \gamma_3 \quad L_1-N_3 \\ \gamma_4 \quad L_1-O_2, 3 \\ \gamma_5 \quad L_2-N_1 \\ \gamma_1 \quad L_2-N_4 \\ \gamma_6 \quad L_2-O_4 \end{array} \right.
 \end{array} \quad [4]$$

Per tant en resum direm:

$$P_\gamma = (1 - \alpha') P_g \quad (1)$$

$$P_{ce} = \alpha'_t P_g \quad (2)$$

$$P_{XK} = \alpha'_K \omega_K P_g \quad (3)$$

$$P_{AK} = \alpha'_K (1 - \omega_K) \quad (4)$$

$$P_{XL} = (\alpha'_K n_{KL} + \alpha'_L) \bar{\omega}_L P_g \quad (5)$$

$$P_{AL} = (\alpha'_K n_{KL} + \alpha'_L) (1 - \bar{\omega}_L) P_g \quad (6) \quad [4]$$

(8)

(1) i (2) Si  $P_g = P_\gamma + P_{CE}$  (ja no comptem amb la probabilitat de producció de parells) i anomenant  $\alpha'_i = \frac{\alpha_i}{1+\alpha_t}$ , observem que d'aquesta expressió podem treure una relació que anteriorment hem utilitzat a (4) que és  $P_{CE} = \alpha_t \cdot P_\gamma$ :

$$P_\gamma = \left(1 - \frac{\alpha_t}{1 + \alpha_t}\right) \cdot (P_\gamma + P_{CE}) = \left(1 - \frac{\alpha_t}{1 + \alpha_t}\right) \cdot (1 + \alpha_t) \cdot P_\gamma = P_\gamma \quad (12)$$

(3) La probabilitat de tenir emissió de raigs X tipus K ( $P_{XK}$ ) serà igual al producte de: probabilitat de tenir conversió interna a la capa K, és a dir, una vacant a la capa K que serà cobert per un electró d'una capa superior:

$$P_{CE,K} = \alpha'_K \cdot P_g = \alpha_K \cdot P_\gamma \quad (13)$$

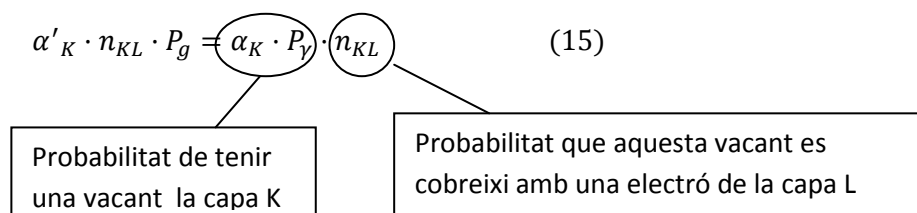
Per la probabilitat que aquesta conversió interna produeixi radiació X ( $w_K$ ).

(4) La conversió interna que no provoqui raigs X, produirà electrons Auger i, per tant utilitzem  $(1-w_K)$ .

(5) La probabilitat de tenir emissió de raigs X de tipus L ( $P_{XL}$ ) serà igual al producte de: probabilitat de tenir una vacant a la capa L, la qual cosa tindrà dos possibles orígens. O bé serà per conversió interna:

$$P_{CE,L} = \alpha'_L \cdot P_g = \alpha_L \cdot P_\gamma \quad (14)$$

O bé serà perquè es cobreix una vacant de la capa K, que ahora també resulta d'un producte de probabilitats:

$$\alpha'_K \cdot n_{KL} \cdot P_g = \alpha_K \cdot P_\gamma \cdot n_{KL} \quad (15)$$


I tot això com hem dit multiplicat per la probabilitat que en cobrir-se la vacant es produeixi emissió de raigs X ( $\bar{w}_L$ , on cal fer un promig ja que tenim diferents yields de fluorescència (11)).

(6) Com en el cas de la capa K, si en cobrir-se la vacant no hi ha emissió de raigs X, tindrem electrons Auger  $(1-\bar{w}_L)$ .

És important veure doncs que la probabilitat de tenir conversió interna ( $P_{CE}$ ) complirà:

$$P_{CE} = \alpha_t \cdot P_\gamma \neq P_{XK} + P_{AK} + P_{XL} + P_{AL} + \dots \quad (16)$$

Ja que certament la probabilitat que hi hagi un electró de conversió interna certament compleix la relació (1) però, donat que per cada vacant es poden produir cascades al anar-se transferint aquesta vacant, podem trobar-nos que per un electró de conversió interna produït

hi hagi més d'una emissió (Auger o de RX). Això serà important alhora de tenir en compte les normalitzacions que caldrà fer per introduir les dades a PENELOPE/penEasy-eXtended.

Les dades que extraiem de les taules llavors són les següents:

Decay																			
From	To	P <sub>tot</sub> (%)	E (keV)	P <sub>γ</sub> (%)	α <sub>K</sub>	α' <sub>K</sub>	α <sub>L</sub>	α' <sub>L</sub>	α <sub>M</sub>	α' <sub>M</sub>	α <sub>T</sub>	α' <sub>T</sub>	RX <sub>K</sub> (%)	RX <sub>L</sub> (%)	A <sub>K</sub> (%)	A <sub>L</sub> (%)			
8	6	1.300E-02	67.5	4.530E-04		0.000E+00	2.200E-01	7.666E-01	5.700E-00	1.986E-01	2.770E-01	9.632E-01		5.092E-03		4.873E-03			
8	4	6.750E-03	123.05	1.061E-03	1.840E-01	2.893E-02	4.050E-00	6.367E-01	1.127E-00	1.772E-01	5.361E-00	8.428E-01	1.896E-04	2.275E-03	5.662E-06	2.177E-03			
8	3	8.700E-05	150.04	7.285E-05	1.520E-01	1.273E-01	3.390E-02	2.839E-02	8.270E-03	6.925E-03	1.942E-01	1.626E-01	1.075E-05	5.738E-06	3.211E-07	5.491E-06			
6	4	1.190E+00	55.56	1.932E-02		0.000E+00	4.800E+01	7.792E-01	1.260E+01	2.045E-01	6.060E-01	9.838E-01		4.738E-01		4.534E-01			
6	2	3.190E-01	98.97	2.073E-02		0.000E+00	1.129E+01	7.336E-01	3.100E+00	2.014E-01	1.439E-01	9.350E-01		1.196E-01		1.144E-01			
6	1	5.330E-03	125.3	4.116E-03	2.280E-01	1.761E-01	5.380E-02	4.154E-02	1.320E-02	1.019E-02	2.950E-01	2.278E-01	9.112E-04	4.925E-04	2.721E-05	4.713E-04			
5	3		54	0.000E+00		0.000E+00		0.000E+00		0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00							
5	1	4.700E-05	96.79	4.700E-05		0.000E+00		0.000E+00		0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00							
4	3		27	0.000E+00		0.000E+00		0.000E+00		0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00							
4	2	1.170E+01	43.42	6.964E-02		0.000E+00	1.320E+02	7.857E-01	3.500E+01	2.083E-01	1.670E-02	9.940E-01		4.698E+00		4.495E+00			
4	1	3.900E-03	69.76	2.979E-03		0.000E+00	2.480E-01	1.894E-01	6.120E-02	4.675E-02	3.092E-01	2.362E-01		3.775E-04		3.613E-04			
4	0	2.180E-02	102.98	1.961E-02		0.000E+00	8.950E-02	8.053E-02	2.190E-02	1.970E-02	1.114E-01	1.002E-01		8.971E-04		8.585E-04			
3	1	4.200E-01	42.704	5.924E-03		0.000E+00	5.600E+01	7.898E-01	1.390E+01	1.961E-01	6.990E-01	9.859E-01		1.695E-01		1.622E-01			
3	0	3.200E-02	75.9	6.354E-04		0.000E+00	3.860E+01	7.663E-01	1.076E+01	2.137E-01	4.936E-01	9.801E-01		1.253E-02		1.199E-02			
2	1	2.000E+01	26.3446	2.326E+00		0.000E+00	6.000E+00	6.977E-01	1.600E+00	1.860E-01	7.600E-00	8.837E-01		7.130E+00		6.823E+00			
2	0	7.650E+01	59.5409	3.592E+01		0.000E+00	9.000E-01	4.225E-01	2.300E-01	1.080E-01	1.130E+00	5.305E-01		1.652E+01		1.581E+01			
1	0	2.130E+01	33.1963	1.224E-01		0.000E+00	1.400E+02	8.046E-01	3.300E+01	1.897E-01	1.730E-02	9.943E-01		8.757E+00		8.380E+00			

Taula 9: Probabilitats extretes de les taules

Hi ha dos valors que s'observen a la taula, que són les desintegracions entre els nivells 5→3 i la de 4→3 que no tenen cap tipus de probabilitat; això és degut a què són els valors que anteriorment hem comentat que es prediuen a la teoria i la seva presència hauria de ser necessària per tal de quadrar els balanços però que, de moment, no s'han observat de forma experimental.

Pel que fa als valors de RX<sub>M</sub> i A<sub>M</sub> comentar que no apareixen perquè serien necessàries dades com n<sub>ML</sub> i  $\bar{w}_M$  referents al Neptuni i de les quals no disposem. Malgrat que hi ha certs experiments que intenten determinar aquests valors, com que tampoc s'observen de forma experimental RX<sub>M</sub>, el càlcul d'aquestes probabilitats tampoc resulta imprescindible. Pel que fa als nivells K i M les dades atòmiques del Np-241 utilitzades en els càlculs són les següents [1]:

- w<sub>K</sub> : 0.971 (4)
- $\bar{w}_L$  : 0.511 (20)
- n<sub>KL</sub> : 0.791 (5)

Les expressions que s'utilitzen per a les normalitzacions són les següents, com ja s'ha explicat també a la metodologia, (on la ' ens indica que són els valors que haurem d'introduir al fortran i els que no tenen la l'accent, seran els que s'extreuen directament de les taules):

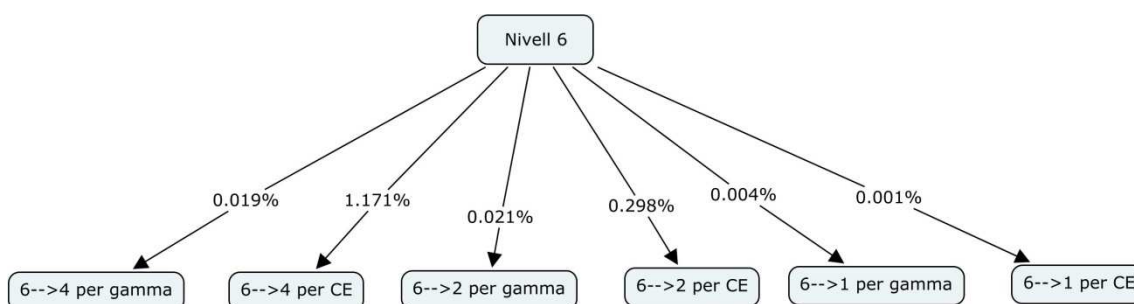
- Probabilitat d'emissió gamma entre els nivells X i Y:

$$P_Y'(X \rightarrow Y) = \frac{P_Y(\%)(X \rightarrow Y)}{P_{Y+CE}(\%)(tot X)} \quad (17)$$

- Probabilitat d'emissió per conversió interna entre els nivells X i Y:

$$P_{CE}'(X \rightarrow Y) = \frac{P_{CE}(\%)(X \rightarrow Y)}{P_{Y+CE}(\%)(tot X)} \quad (18)$$

La normalització es fa sobre tot X (nivell origen) pel següent motiu, si s'agafa com a exemple el nivell 6:



Esquema 1: Esquema dels models de desintegració des del nivell 6

On aquí els % que apareixen són els de les taules, tenint en compte que al nivell 6 hem dit que arriba  $1.67 \pm 0.03$  % i la suma d'aquests valors com també s'ha dit anteriorment correspon a  $1.52 \pm 0.16$  (taula 3).

- Probabilitat d'arribar a la capa K, L o M:

$$P_{K(L,M)}' = \frac{\text{probabilitat que l'electró de conversió sigui de la capa K, L o M}}{P_{CE}(\%)} = \frac{P_Y(\%) \cdot \alpha_{K(L,M)}}{P_{CE}(\%)} \quad (19)$$

- Probabilitat que es produeixi raig X característics:

$$P_{RX-K(L,M)}' = w_{K(L,M)} \quad (20)$$

En aquest cas podem directament establir la igualtat amb aquest coeficient, ja que aquest  $w_L$  ens dona la possibilitat que a partir d'una vacant per l'emissió d'un electró de conversió interna, es produeixi un electró Auger o un raig X característic, per tant el coeficient ja és el tant per 1 necessari per al programa.

Aquí apareixen els raigs M perquè realment es produeixen però, a la pràctica, no hi ha dades d'aquest nivell ja que les energies serien molt baixes i per tant només se simularan els K i els L.

- Probabilitat que es produeixi un electró Auger:

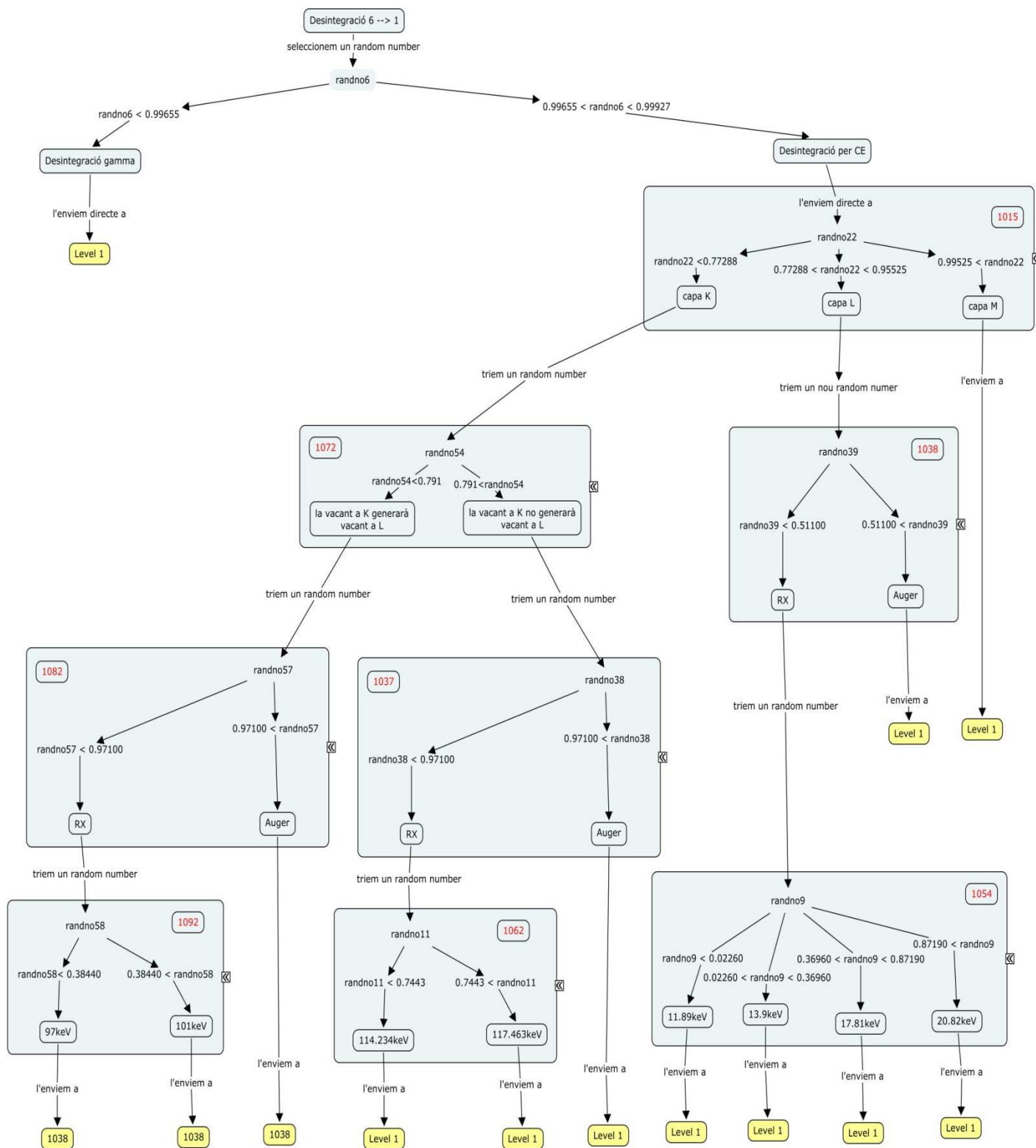
$$P_{RX-K(L,M)}' = 1 - w_{K(L,M)} \quad (21)$$

- Probabilitat que una vacant a la capa K, n'origini una altra a la capa L: aquest valor ve donat per  $n_{KL}$ , que s'obté de les taules i que ja es proporciona en tant per 1.

En l'esquema 2 es pot observar en detall la programació d'una desintegració, en aquest cas com exemple s'ha agafat la que hi ha entre  $6 \rightarrow 1$ . Podem veure que la tria de nivells es pot estructurar:

- 1) Tria de si la desintegració serà per emissió gamma (en aquest cas directament l'àtom es desexcitarà al següent nivell) o per conversió interna.
- 2) En cas que es produeixi per conversió interna, l'electró arrencat podrà ser de la capa K, L o M (capes per a les quals tenim coeficients).
- 3) La vacant que deixa l'electró de conversió interna generat s'ocuparà per un electró d'una capa superior de tal manera que hi haurà emissió de raig X o electró Auger. Alhora la vacant que deixi el segon electró, que cau per tapar una vacant prèvia, s'haurà de tenir en compte perquè en cobrir-se també generarà RX o Auger. En aquest cas hem tingut en compte  $L \rightarrow K$ , ja que si la vacant es cobreix per un electró d'una capa superior, el RX o Auger que es pugui generar serà molt poc energètic.
- 4) Ja sigui per emissió RX o Auger, el nucli quedarà desexcitat i per tant passarem al següent nivell (que en l'esquema de mostra és el 1). Si estem però, en el cas que l'electró de conversió interna era de la capa K i la vacant es cobreix amb un electró de la capa L, llavors caldrà veure si aquesta segona vacant genera RX o Auger (en aquest cas L) abans d'arribar al següent nivell. L'elecció de RX que es produeixen la fem a partir de saber si es crea o no vacant a L, ja que si és que no, ha d'haver caigut d'una altra banda. Així per exemple diferenciem entre el bloc **1092** i el **1062**, en el primer cas com que hi ha vacant a L sabem que els raigs X produïts seran de tipus  $K\alpha$  (97 o 101 keV), en canvi en el segon cas, com que no s'ha causat vacant vol dir que l'electró "de recanvi" venia d'una altra capa: M, N,... i per tant serà de tipus  $K\beta$  (114 i 117 keV).





Esquema 2: Esquema de la programació de la desintegració 6-->1

### Annex 3: Funcionament de `tables.exe`

A partir de l'arxiu fortran `tables.f` cal compilar el que serà el programa d'ús a partir de la instrucció:

```
> gfortran -O3 tables.f -o tables.exe
```

Cal que això es realitzi en una carpeta on també es trobi l'arxiu fortran `penelope.f` i l'arxiu `material.mat` que es vulgui analitzar.

Un cop creat l'arxiu `.exe` quan s'executi es demanarà l'arxiu que es vol analitzar, tal com mostra la figura 1:

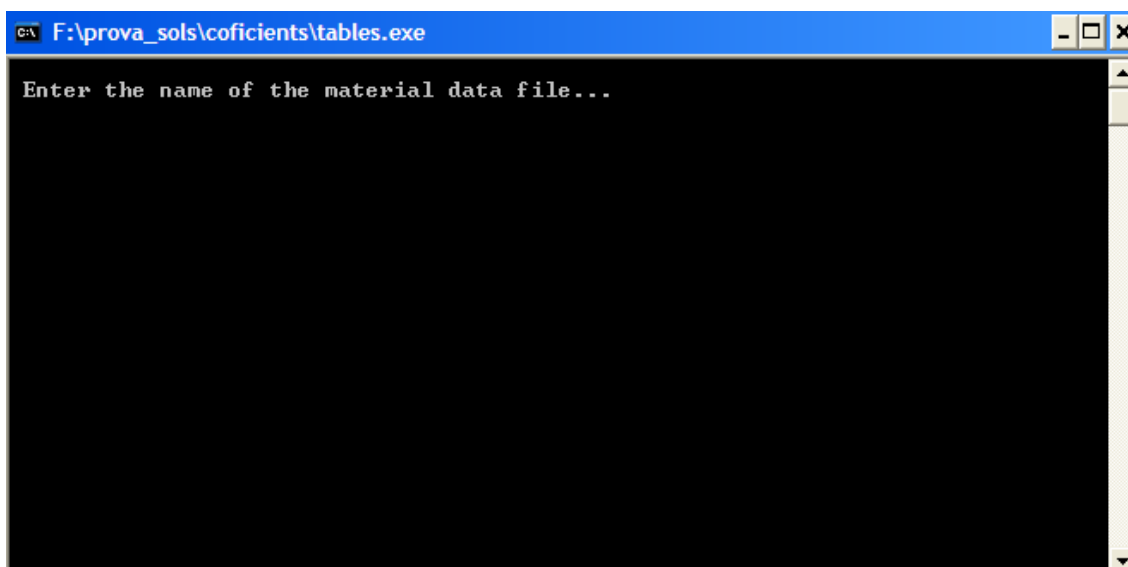


Figura 1:Mostra de `tables.exe` on es demana el material que es vol analitzar

El que farà el programa es reordenar la informació continguda en l'arxiu de material i com a resultat proporcionarà una sèrie d'arxius `.tab` i un `tables.dat` que és el que cal utilitzar en aquest cas. Aquest arxiu es pot obrir des d'un programa de tractament de dades com el "grapher" per tal de representar gràficament la informació.

En el cas del present treball s'accedeix al final de l'arxiu on es troba la informació relativa als coeficients d'atenuació massics organitzada per eV. Es detalla el coeficient d'atenuació degut a l'efecte fotoelèctric, l'efecte compton, la producció de parells i l'efecte Rayleigh i el resultat de la seva suma.

A la figura 2 es mostra un detall del que s'ha dit per al material hidrogen.

	A	B	C	D	E	F	G
16,604	1000000000	7.748E-37	7.748E-37				
16,605							
16,606	PENELOPE	>>>	Photon	mass	attenuation	coefficients	
16,607							
16,608	Energy	Rayleigh	Compton	Photoelect	Pair	Total	
16,609	(eV)	(1/mtu)	(1/mtu)	(1/mtu)	(1/mtu)	(1/mtu)	
16,610	-----						
16,611	50	0.496304	5.975E-12	94583.3	1E-35	94583.8	
16,612	60	0.473102	5.975E-12	54828.1	1E-35	54828.5	
16,613	70	0.457389	5.975E-12	34404.3	1E-35	34404.8	
16,614	74.8331	0.451557	5.975E-12	28109.2	1E-35	28109.6	
16,615	80	0.445914	5.975E-12	22916	1E-35	22916.4	
16,616	90	0.438008	5.975E-12	15980.4	1E-35	15980.8	
16,617	100	0.431485	5.975E-12	11544.4	1E-35	11544.9	
16,618	110	0.42671	5.972E-12	8596.09	1E-35	8596.51	
16,619	120	0.422396	5.973E-12	6559.83	1E-35	6560.25	
16,620	130	0.419365	5.980E-12	5106.71	1E-35	5107.13	
16,621	140	0.416613	5.985E-12	4049.99	1E-35	4050.4	
16,622	150	0.414067	5.975E-12	3262.25	1E-35	3262.67	
16,623	170	0.410628	5.967E-12	2196.32	1E-35	2196.73	
16,624	180	0.409177	6.013E-12	1833.28	1E-35	1833.69	
16,625	190	0.407809	6.066E-12	1544.87	1E-35	1545.28	
16,626	210	0.405288	5.623E-12	1122.39	1E-35	1122.79	
16,627	230	0.403351	5.177E-12	839.503	1E-35	839.906	
16,628	240	0.402474	5.540E-12	732.862	1E-35	733.265	
16,629	260	0.40083	8.071E-12	566.462	1E-35	566.863	
16,630	280	0.399314	1.913E-11	446.151	1E-35	446.55	

Figura 2: Detall dels coeficients d'atenuació màssics proporcionats per `tables.exe`

Les unitats en què s'observa que apareixen els coeficients d'atenuació màssics és 1/mtu, on 1 mtu = 1 g / cm<sup>2</sup>. Per tant les unitats són cm<sup>2</sup> / g, com ha de ser.

## Annex 4: Creació de nous materials amb `material.exe`

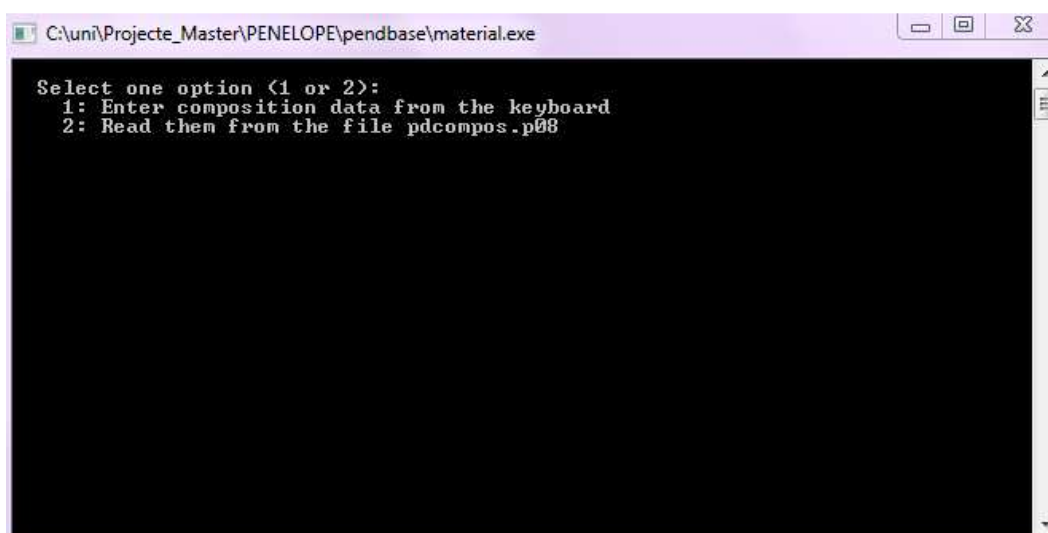
A partir del fortran `material.f` cal compilar el que serà el programa d'ús a partir de la instrucció:

```
> gfortran -Os material.f -o material.exe
```

Cal que això es realitzi a la carpeta `PENELOPE/pendbase` on també hi ha d'haver la carpeta `pdfiles`, ja que és on hi ha continguda la informació dels materials.

Ahora d'executar el programa els passos són els següents:

- 1) Escollir si el material que es vol crear pertany a la base de dades de PENELOPE o el vol crear l'usuari amb nova informació:



En cas que el material que es vulgui crear ja existeixi a la base de dades de PENELOPE, s'introduirà el nombre 2 i a continuació la següent instrucció demanarà d'introduir el número d'identificació del material. Per conèixer aquest nombre cal obrir l'arxiu `pdcompos.08` contingut a la carpeta `pdfiles`.

- 2) Per a crear nous materials s'introduirà el número 1 i el programa demanarà que s'introdueixi un nom per al material. Aquest nom estarà contingut dins l'arxiu, de manera que si pot introduir informació d'interès.
- 3) A continuació es demana d'introduir el número d'elements presents en la molècula. PENELOPE entén que tot el material està creat per un sol tipus de molècula, de manera que en cas de tenir elements o compostos diversos caldrà tractar-los com un de sol. Això es detallarà millor en l'exemple.
- 4) Segons la informació disponible cal triar si es vol introduir la composició estequiomètrica de la molècula o la fracció per pes de cada material.

```

C:\uni\Projecte_Master\PENELOPE\pendbase\material.exe
Select one option <1 or 2>:
  1: Enter composition data from the keyboard
  2: Read them from the file pdcompos.p08
1
Enter material name, for your information <no more than 60 characters> ...
sldkslfdk
Material: sldkslfdk

Chemical formula:
Number of elements in the molecule...
3
Number of elements = 3

Select one option <1 or 2>:
  1: Enter chemical <stoichiometric> formula
  2: Enter fraction by weight of each element

```

- 5) Després d'introduir la informació automàticament el programa proporcionarà una energia d'excitació mitja que és modificable en cas que se'n conegui el valor.
- 6) A continuació cal introduir la densitat del material en  $\text{g/cm}^3$ .
- 7) El programa a continuació proporciona una força d'oscil·lació ( $F_{cb}$ ) i una energia de ressonància ( $W_{cb}$ ) que calcula. Aquestes dues magnituds són característiques d'un oscil·lador simple, que és la forma que s'utilitza per caracteritzar l'excitació del material a la banda de conducció. Igual que en el cas anterior es pot modificar si se'n coneixen els valors.

```

C:\uni\Projecte_Master\PENELOPE\pendbase\material.exe
Element: Be <Z= 4>, atoms/molecule = 2.00000E+00
Enter atomic number and number of atoms/molecule of the second element ...
3 5
Element: Li <Z= 3>, atoms/molecule = 5.00000E+00
Enter atomic number and number of atoms/molecule of the third element ...
6 7
Element: C <Z= 6>, atoms/molecule = 7.00000E+00

The calculated mean excitation energy I is 6.68235E+01 eV
Do you want to change it? <1=yes,2=no>
2

Enter mass density <g/cm**3> ...
2.3
Density = 2.30000E+00 g/cm**3

Estimated oscillator strength and energy of the plasmon:
Fcb = 2.30000E+01, Wcb = 1.79187E+01 eV
<for insulators, these quantities should be set equal to zero>

Do you wish to change the Fcb and Wcb values? <1=yes,2=no>
<type 2 if you are not sure...>

```

- 8) Finalment s'introdueix el nom del fitxer que es crearà, cal que sigui amb l'extensió .mat.

### Exemple de creació del material HCl 2M:

Una solució HCl 2M informa que es una solució de HCl en aigua amb concentració 2M. Aquesta concentració indica que es tenen 2 mols de solut per cada litre de solució, de manera que sent dada coneguda la quantitat total de solució present, es farà:

#### Càlcul de molècules de HCl:

$$\text{molaritat} \left( \frac{\text{mols}}{\text{litre de solució}} \right) \times \text{volum de solució (l)} \times n^{\circ} \text{ d'Avogadro} \left( \frac{n^{\circ} \text{ de molècules}}{\text{mol}} \right)$$

#### Càlcul de molècules de H<sub>2</sub>O:

1) Càlcul de massa d'aigua:

$$\text{volum de solució (cm}^3\text{)} \times \text{densitat de la solució} \left( \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \right) - \frac{\text{molècules de HCl}}{n^{\circ} \text{ Avogadro} \left( \frac{n^{\circ} \text{ de molècules}}{\text{mol}} \right)} \times \text{massa molar HCl} \left( \frac{\text{g}}{\text{mol}} \right)$$

2) Càlcul de molècules d'aigua:

$$\frac{\text{massa d'aigua (g)}}{\text{massa molar aigua (g/mol)}} \times n^{\circ} \text{ Avogadro} \left( \frac{n^{\circ} \text{ de molècules}}{\text{mol}} \right)$$

Com que cal introduir els components com si es tractés d'una sola molècula es farà:

- **Àtoms de H:** 2 x n° de molècules d'aigua + n° de molècules de HCl
- **Àtoms de Cl:** n° de molècules de HCl
- **Àtoms de O:** n° de molècules d'aigua

Aquests nombres tindran ordres de magnituds molt elevats de manera que es podran normalitzar perquè sigui més còmode d'introduir-los a `material.exe`.

El procediment descrit correspondria a conèixer una composició estequiomètrica del material. Normalment això és així en compostos líquids on hi ha una solució que es prepara al mateix laboratori i les dades conegudes treballen en termes de molaritat. En compostos sòlids en canvi, és més complex conèixer-ne la composició però, si s'arriba a saber normalment serà en tant per cent en massa; això és així perquè es tractarà d'una caracterització del material proporcionada pel fabricant, és el cas per exemple, dels filtres utilitzats per a les mesures d'aire ambiental.

## Annex 5: Genie 2000

El programa Genie 2000 és un software que pertany a la casa Canberra, la mateixa que ha fabricat els detectors HPGe amb els quals es treballa al LARA, i que processa tot el recull de dades per part dels detectors. Per això consta de dos components principals:

- Mòdul de definició del hardware de medició.
- Mòdul d'adquisició i processament de dades.

En el cas del present treball es treballarà amb el segon mòdul. Cal tenir en compte que el Genie treballa amb un analitzador multicanal (MCA), això significa que en funció de l'amplitud de la senyal rebuda (que depèn de l'energia de la gamma) els polsos es classificaran en canals, és el que permet fer espectrometria.

Per calibrar un sistema cal relacionar les variables obtingudes com a resultats d'una medició, amb unitats normalitzades que permetin establir comparacions amb resultats que es puguin obtenir en d'altres instal·lacions i que, per tant, siguin interpretables. Per això el Genie-2000 cal que relacioni la informació obtinguda en canals amb unitats d'energia i també, els comptes per unitats de temps amb unitats d'activitat [16]. El primer cas és el que es coneix com a calibratge en energia i és el mètode que s'utilitza per obtenir les corbes d'eficiència, és a dir, relacionar els canals amb una determinada energia i veure l'eficiència de detecció que es presenta. En el segon cas, el programa calcularà l'activitat present a partir de les deteccions i l'eficiència que considera per aquell radioisòtop, a partir del calibratge que s'ha fet anteriorment.

Els processos de calibratge d'eficiències es fan a partir dels patrons. En el laboratori s'introdueix per a cada matriu el certificat corresponent a aquella presa de dades (on consten les activitats conegudes per una sèrie de radioisòtops continguts en aquella matriu) i a partir de la medició s'aproximarà una corba d'eficiències, tal com es pot veure a la figura 1. Aquestes corbes són les que posteriorment s'utilitzaran per a què, quan arribin mostres desconegudes, es pugui determinar l'activitat i el contingut radioactiu.

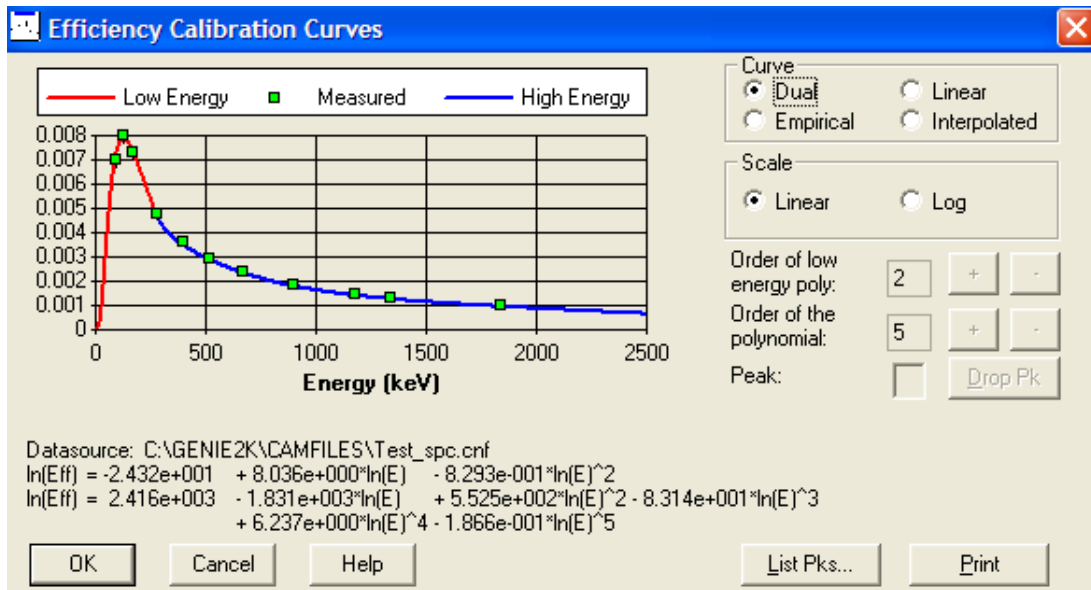


Figura 1: Corba d'eficiències ajustada per el Genie

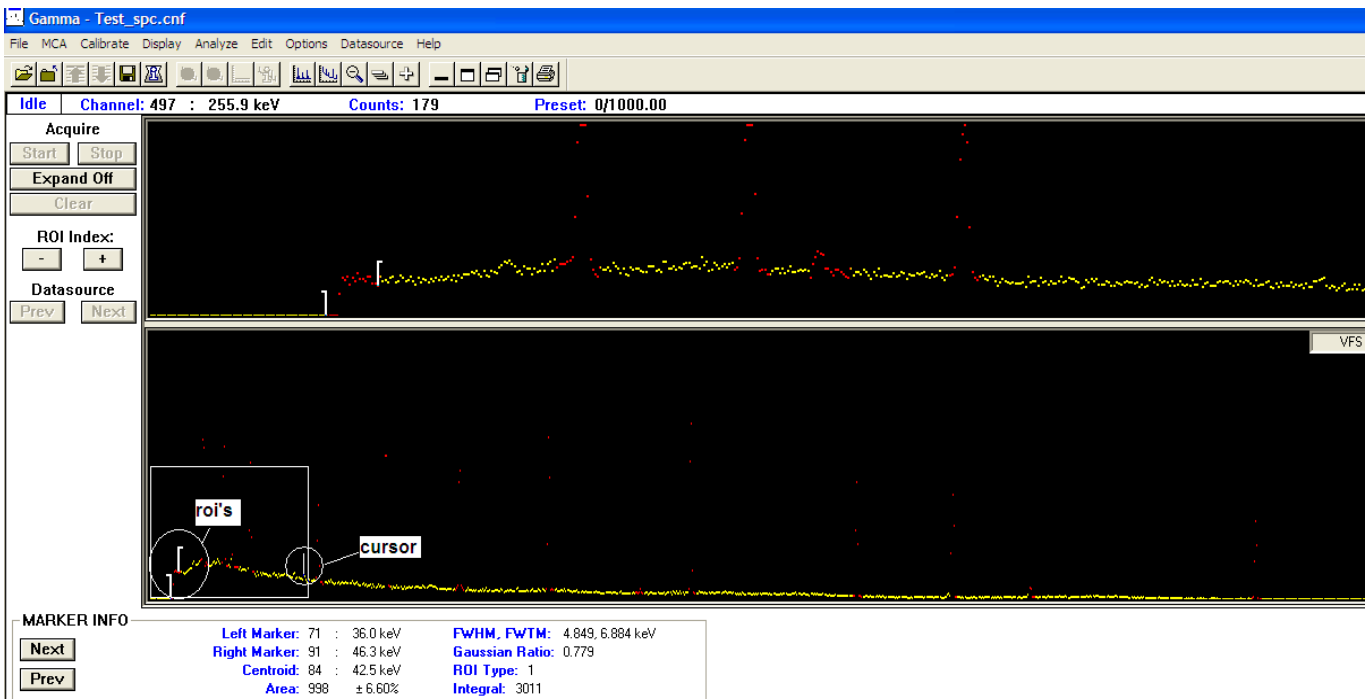


Figura 2: Espectre que s'observa en el Genie-2000



L'espectre proporcionat per el programa té el l'aspecte que es mostra en la figura 2. A la part superior de l'espectre es pot veure que s'informa del canal on es troba el cursor, el número de canal i l'energia que li correspon, així com el número de comptes. A la part inferior de l'espectre (*Marker Info*), es pot obtenir la informació corresponent a pics en l'espectre després de delimitar-los amb els roi's (*left-right marker*): el número de comptes contingut en el pic, el centre o la seva FWHM, entre d'altra informació. Aquests comptes són els que s'utilitzen en el projecte per fer els càlculs d'eficiència corresponents a cada pic, a través de l'expressió 1.

$$\varepsilon = \frac{n^{\circ} \text{ de comptes}}{A \cdot t \cdot Y} \quad 1.$$

Aquestes preses de dades es fan en el laboratori i per tal d'utilitzar-les en el projecte, s'obre l'arxiu `.cnf` que mostra l'espectre de la figura 2 i es guarda en format `.tka`, un arxiu que es pot obrir per exemple amb el Grapher. Aquest arxiu conté una sola columna, on cada fila és el número de comptes corresponents a cada canal. És a partir d'aquestes dades que s'han realitzat les gràfiques experimentals que apareixen en el projecte, després d'aplicar-los el tractament descrit en la metodologia.