

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

UNIDAD IZTAPALAPA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

"ESTUDIO DE LA LUMINISCENCIA TÉRMICAMENTE ESTIMULADA DE ÓXIDO DE BERILIO (BeO) IRRADIADO CON RADIACIÓN GAMMA"

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE: Maestro en Ciencias (Física)

PRESENTA:

Fís. Rodrigo Martinez Baltezar

ASESOR DE LA TESIS:

Dr. Juan Azorín Nieto

SINODALES:

Dr. Epifanio Cruz Zaragoza

Dra. Silvia Sandra Hidalgo Tobón

Ciudad de México 13 de Diciembre de 2018





UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

UNIDAD IZTAPALAPA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

"ESTUDIO DE LA LUMINISCENCIA TÉRMICAMENTE ESTIMULADA DE ÓXIDO DE BERILIO (BeO) IRRADIADO CON RADIACIÓN GAMMA"

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE: Maestro en Ciencias (Física)

PRESENTA:

Fís. Rodrigo Martinez Baltezar

ASESOR DE LA TESIS:

Dr. Juan Azorín Nieto

SINODALES:

AIR

Dr. Epifanio Cruz Zaragoza

Dra. Silvia Sandra Hidalgo Tobón

Ciudad de México 13 de Diciembre de 2018

Dedicada a mi madre y hermanos.

Con mucho amor y afecto para mi madre Josefina Baltezar Gonzales y mi hermana Flor América Sarabia Baltazar por su apoyo, consejo y cariño brindado a lo largo de mi formación profesional y personal. Con mucho cariño dedicada a mis hermanos, Ricardo, Jazmín, Felipe de Jesús, Alberto, María de Jesús y Marivi.

Una dedicatoria especial a mis amigos de toda la vida, a mis compañeros y amigos que han estado presentes a lo largo de mi formación profesional, a mi entrenador y amigo Carlos Márquez, y a todos aquellos que han formado parte de mi vida.

! muchas gracias ;

II

Agradecimientos

Un profundo agradecimiento al Dr. Juan Azorín Nieto, al Dr. Epifanio Cruz Zaragoza, a la Dra. Rebeca Sosa Fonseca, al Dr. Eleuterio Castaño Tostado, al Dr. Armando Vázquez Zavala y a la Dra. Silvia Sandra Hidalgo Tobón por su guía y apoyo brindado durante el desarrollo de este trabajo. A la Universidad Autónoma Metropolitana por la oportunidad brindada para desarrollar este estudio de posgrado y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por la beca otorgada para el desarrollo de este proyecto.

Resumen

La caracterización termoluminiscente de ciertos compuestos, principalmente aislantes se ha convertido en un tema de interés tanto en materia de investigación como en aplicaciones de dosimetría de radiación ionizante [47], [49], [19]. El uso de óxido de berilio (*BeO*) que presenta el fenómeno de luminiscencia térmicamente estimulada (TL), comúnmente llamado Termoluminiscencia, resulta promisorio para la dosimetría de radiación ionizante [7], [53]. Sin embargo, los mecanismos que rigen dicho fenómeno no han sido completamente explicados para este material.

En este trabajo se llevó a cabo la caracterización estructural del óxido de berilio (BeO: Mg, Si) mediante difracción de rayos X (XRD), encontrándose que este material presenta una estructura hexagonal (wurtzita hexagonal) con parámetros de red de a=2.69790 v c=4.37720, adicionalmente se realizaron estudios de microscopia electrónica de barrido para determinar la cantidad de impurezas presentes y la distribución de estas en el material, encontrándose que dicho material podría contener trazas de magnesio (Mq)y silicio (Si) con un porcentaje en masa de 0.11 y 0.21% respectivamente, además se realizaron estudios de luminiscencia ópticamente estimulada (Fluorescencia) en pastillas de óxido de berilio radiadas y sin irradiar, encontrándose mediante deconvolución que para una $\lambda_{exc} = 330 \ nm$ se tienen 4 bandas de emisión centradas en 404, 430, 468 y 545 nm, estas bandas de emisión se presentan tanto en muestras irradiadas y sin irradiar, aunque en las muestras irradiadas se presenta una banda de emisión extra centrada en 416 nm, con lo que se encuentra que el material es sensible a la radiación. Adicionalmente se estudió el comportamiento de las curvas de brillo (TL) del BeO: Mq, Si obtenidas en un largo intervalo de dosis (1.3 a 23.4 Gy) de radiación gamma (Cobalto-60) mediante dos métodos de deconvolución: 'Glow-Fit' [45] y 'tgcd' en 'R' [44], con lo que se investigo el comportamiento de los parámetros termoluminiscentes (temperatura máxima, energía de activación, orden de cinética y factor de frecuencia) en función de la dosis, encontrándose que el primer pico presenta un orden de cinética que varía con la dosis de 1.0 a 1.2, mientras que para el segundo pico el orden de cinética es de 1.0 para casi todo el intervalo de dosis estudiado. La energía de activación también presenta variaciones en el primer pico que van desde 0.9 a 1.1 eV, y para el segundo pico es de 1.1 a 1.2 eV. También se determino el factor de frecuencia por ambos métodos de deconvolución encontrándose que para el primer pico este es del orden de 1×10^{11} y 1×10^{08} s⁻¹ por Glow-Fit y 'tgcd' en 'R' respectivamente. Para el segundo pico el factor de frecuencia es del orden de 1×10^{10} y 1×10^{09} s⁻¹ por Glow-Fit y 'tgcd' en 'R' respectivamente. Adicionalmente se compararon los resultados de la deconvolución con los obtenidos por los 3 métodos geométricos de Chen [14], encontrándose poca discrepancia entre ambos métodos. Finalmente se obtuvieron las curvas de respuesta TL en función de la dosis para cada pico de la curva de brillo por ambos métodos: altura del pico y área bajo la curva, encontrándose que el primer pico exhibe una dependencia cuadrática de la respuesta TL en función de la dosis, mientras que el segundo exhibe una dependencia lineal en todo el intervalo de dosis estudiado (1.3 a 23.4 Gy).

Índice general

Ag	grade	ecimie	ntos	III
Re	esum	en		\mathbf{V}
Li	sta d	e figu	ras	IX
Li	sta d	e tabl	as	XIII
1.	Intr	oducci	ión	1
	1.1.	Lumin	iscencia y Termoluminiscencia en sólidos	. 1
	1.2.	Lumin	iscencia en sólidos	. 3
		1.2.1.	Modelo de coordenadas de configuración	. 5
		1.2.2.	Eficiencia luminiscente: Transiciones no-radiativas	. 10
		1.2.3.	Tiempo de vida del estado excitado y duración de la	
			luminiscencia	. 11
	1.3.	Cinéti	ca del decaimiento luminiscente	. 13
		1.3.1.	Decaimiento fluorescente	. 14
		1.3.2.	Decaimiento fosforescente	. 15
	1.4.	Termo	luminiscencia en sólidos	. 17
		1.4.1.	Modelo de bandas de Randall-Wilkins	. 18
		1.4.2.	Determinación de parámetros de trampa mediante méto)—
			dos termoluminiscentes	. 18
	1.5.	Métod	lo Geométrico de Chen	. 23
	1.6.	Decon	volución	. 28
		1.6.1.	Deconvolución GLOW-FIT	. 30
		1.6.2.	Deconvolución con 'tgcd' en 'R'	. 31
	1.7.	Caract	terización de sólidos TL	. 32
		1.7.1.	Difracción de rayos X (XRD)	. 34

		1.7.2. Microscopia electrónica de barrido	43									
2.	2. Desarrollo experimental 45											
	2.1.	Planteamiento del problema										
	2.2.	Objetivo	45									
	2.3.	Método experimental	46									
3.	Res	ultados y discusión	49									
	3.1.	Difracción por rayos X	50									
	3.2.	Microscopia electrónica de barrido	51									
	3.3.	Fotoluminiscencia	51									
	3.4.	Parámetros termoluminiscentes	55									
		3.4.1. Método de Chen	57									
		3.4.2. Método de la deconvolución en Glow-Fit	69									
		3.4.3. Método de Deconvolución en 'tecd' en R	75									
	3.5	Bespuesta Termoluminiscente	85									
	0.0.	3.5.1 Respuesta TL en función de la dosis usando Glow-Fit	85									
		3.5.2 Respuesta TL en función de la dosis usando 'tord' en 'B'	96									
		5.5.2. Respuesta 11 en función de la dosis usando (ged en fr	50									
4.	Con	clusiones y perspectivas 1	09									
A. Curvas de brillo del primer lote 113												
B. Curvas de brillo del segundo lote 115												
C.	Fact	or de linealidad y procedimiento general de linealidad 1	21									
Re	efere	ncias 1	25									

Índice de figuras

1.1. Centros luminiscentes	4									
1.2. Centro de color \ldots	5									
Coordenadas de configuración										
. Bandas de emisión y absorción										
1.5. Tiempo de vida del estado excitado										
1.6. Modelo de Randall-Wilkins	15									
1.7. Cinética del decaimiento TL	21									
1.8. Método del semi-ancho del pico TL	25									
1.9. Factor de simetría en función del orden de cinética	27									
1.10. Tubo de rayos X \ldots	35									
1.11. Espectro de Rayos X \ldots	36									
1.12. Esquema de niveles de energía para rayos X										
1.13. Red puntual típica										
1.14. Celda unitaria	39									
1.15. Redes de Bravais	40									
1.16. Ley de Bragg	41									
1.17. Espectrómetro de rayos X	42									
1.18. Esquema de un microscopio SEM										
2.1. Detrán de diferencián de norme V norme el DeO	FO									
3.1. Patron de diffacción de rayos A para el <i>BeO</i>	50									
3.2. Espectros de emisión y excitación para el <i>BeO</i>	53									
3.3. Deconvolucion en muestras sin irradiar	53									
3.4. Deconvolucion en muestras irradiadas	54									
3.5. Comparación entre los espectros de las muestras irradiadas y	~ ~									
	55									
3.6. Curvas de brillo \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	56									
3.7. Factor de frecuencia, Lote 1, $\beta = 5\frac{\pi}{S}$, Chen	66									
3.8. Factor de frecuencia, Lote 2, $\beta = 5\frac{\kappa}{S}$, Chen	67									

3.9. Factor de frecuencia, Lote 2, Pico 1, Tasa de calentamiento
$7\frac{K}{S}$, Chen
3.10. Factor de frecuencia, Lote 1, Glow-Fit
3.11. Factor de frecuencia, Lote 2, tasa 5 $\frac{K}{S}$, Glow-Fit
3.12. Factor de frecuencia, Lote 1, Pico 1, Tasa 7 $\frac{K}{S}$, Glow-Fit 75
3.13. Deconvolución 'tgcd' en 'R', Lote 1, $\beta = 5\frac{K}{S}$
3.14. Deconvolución 'tgcd' en 'R', Lote 2, $\beta = 7\frac{K}{S}$
3.15. Factor de frecuencia, Lote 1, 'tgcd' en 'R'
3.16. Factor de frecuencia, Lote 2, $\beta = 5\frac{K}{S}$, 'tgcd' en 'R'
3.17. Factor de frecuencia, Lote 2, $\beta = 7\frac{K}{S}$, 'tgcd' en 'R'
3.18. Intensidad máxima TL en función de la dosis, Lote 1, Glow-Fit 87
3.19. Intensidad máxima TL en función de la dosis, Lote 2, $\beta = 5\frac{K}{S}$,
Glow-Fit
3.20. Intensidad máxima en función de la dosis, Lote 2, tasa 7 $\frac{K}{S}$,
Glow-Fit
3.21. Respuesta TL en función de la dosis, Lote 1, Glow-Fit 92
3.22. Respuesta TL en función de la dosis, Lote 2, tasa 5 $\frac{K}{S}$, Glow-Fit 93
3.23. Respuesta TL en función de la dosis, Lote 2, tasa 7 $\frac{K}{S}$, Glow-Fit 95
3.24. Intensidad máxima TL en función de la dosis, Lote 1, 'tgcd'
en 'R'
3.25. Intensidad máxima TL en función de la dosis, Lote 2, $\beta = 5\frac{K}{S}$,
'tgcd' en 'R'
3.26. Intensidad máxima TL en función de la dosis, Lote 2, $\beta = 7\frac{K}{S}$,
'tgcd' en 'R'
3.27. Respuesta TL en función de la dosis, Lote 1, Pico 1, 'tgcd' en
'R'
3.28. Respuesta TL en función de la dosis, Lote 1, Pico 2, 'tgcd' en
'R'
3.29. Respuesta TL en función de la dosis, Lote 2, $\beta = 5\frac{K}{S}$, 'tgcd'
en 'R' \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 104
3.30. Respuesta TL en función de la dosis, Lote 2, $\beta = 5\frac{K}{S}$, 'tgcd'
en 'R' \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 105
3.31. Respuesta TL en función de la dosis, Lote 2, Pico 2, 'tgcd' en
'R'
3.32. Respuesta TL en función de la dosis, Lote 2, Pico 2, 'tgcd' en
'R'
A.1. Ourvas de brillo para el primer lote

A.2.	Curvas de brillo para el primer lote .													114
A.3.	Curvas de brillo para el primer lote $% \left({{{\bf{n}}_{{\rm{c}}}}_{{\rm{c}}}} \right)$.	•	•		•	•	•	•	•	•	•	•	•	114
B.1.	Curvas de brillo para el segundo lote	•					•		•	•	•		•	115
B.2.	Curvas de brillo para el segundo lote													116
B.3.	Curvas de brillo para el segundo lote													116
B.4.	Curvas de brillo para el segundo lote													117
B.5.	Curvas de brillo para el segundo lote													117
B.6.	Curvas de brillo para el segundo lote													118
B.7.	Curvas de brillo para el segundo lote													118
B.8.	Curvas de brillo para el segundo lote	•			•		•		•	•	•		•	119

Índice de tablas

1.1. Procesos luminiscentes y modos de excitación	4							
1.2. Notación espectroscópica Rayos X								
1.3. Método de difracción de rayos X	42							
3.1. Resultados SEM	51							
3.2. Resultados de deconvolución para el espectro de emisión en								
muestras sin irradiar	54							
3.3 Besultados de deconvolución para el espectro de emisión en	51							
muestras iradiadas	54							
3.4. Resultados de deconvolución para el espectro de excitación en								
muestras sin irradiar	55							
3.5. Resultados de deconvolución para el espectro de excitación en								
muestras irradiadas	55							
3.6. Temperaturas máximas, Lote 1, Chen	58							
3.7. Temperaturas máximas, Lote 2, Chen	58							
3.8. Factor de simetría, Lote 1, $\beta = 5\frac{K}{S}$, Chen	59							
3.9. Factor de simetría, Lote 2, Tasa de calentamiento $5\frac{K}{S}$, Chen . (60							
3.10. Factor de simetría, Lote 2, Tasa de calentamiento $7\frac{\ddot{K}}{S}$, Chen . (60							
3.11. Energía de activación, Lote 1, Pico 1, $\beta = 5\frac{K}{S}$, Chen	61							
3.12. Energía de activación, Lote 1, Pico 2, $\beta = 5\frac{K}{S}$, Chen	62							
3.13. Energía de activación, Lote 2, Pico 1, $\beta = 5\frac{K}{S}$, Chen	62							
3.14. Energía de activación, Lote 2, Pico 1, $\beta = 7\frac{\tilde{K}}{S}$, Chen	63							
3.15. Energía de activación, Lote 2, Pico 2, $\beta = 5\frac{K}{S}$, Chen	63							
3.16. Energía de activación, Lote 2, Pico 2, $\beta = 7\frac{K}{S}$, Chen	63							
3.17. Factor de frecuencia, Lote 1, Pico 1, $\beta = 5\frac{K}{S}$, Chen	65							
3.18. Factor de frecuencia, Lote 1, Pico 2, $\beta = 5\frac{K}{S}$, Chen	65							
3.19. Factor de frecuencia, Lote 2, Pico 1, $\beta = 5\frac{K}{S}$, Chen	66							
3.20. Factor de frecuencia, Lote 2, Pico 2, $\beta = 5\frac{\kappa}{s}$, Chen	67							

3.51.	Resumen	por	área	bajo	la	curva por	Glo	w-Fit					•	107
3.52.	Resumen	por	inten	sidad	les	máximas	por	'tgcd'	${ m en}$	'R'.			•	108
3.53.	Resumen	por	área	bajo	la	curva por	'tgc	d' en	'R'.				•	108

Capítulo 1

Introducción

1.1. Luminiscencia y Termoluminiscencia en sólidos

La termoluminiscencia es un fenómeno físico que se presenta principalmente en sólidos cristalinos (aislantes y semiconductores), este fenómeno involucra la emisión de fotones, principalmente en el intervalo de frecuencias correspondiente al espectro visible y cercano al visible, cuando el material es calentado a una tasa constante de calentamiento después de haber sido expuesto a una fuente de radiación ionizante[25]. Las primeras observaciones del fenómeno de luminiscencia fueron reportadas por J.B Beccari de Bologna, Italia, quien grabó evidencias de gusanos y luciérnagas en un largo periodo de tiempo (1744-1747)[39] [29]. Los materiales y substancias que son capaces de emitir luz son denominados luminiscentes. Existe una gran variedad de tales materiales, tanto naturales como aquellos producidos en laboratorios.

La luminiscencia a diferencia de la radiactividad natural no se produce de forma espontánea, sino que requiere de energía para producirse. Tal energía de excitación puede ser suministrada a los materiales luminiscentes mediante irradiación de luz ultravioleta (UV), rayos X, rayos gamma, electrones o partículas alfa etc., todas estas depositan energía a los materiales luminiscentes, los cuales posteriormente la reemiten en forma de luz. El fenómeno de la luminiscencia involucra principalmente transiciones electrónicas de un átomo o molécula en un sólido, así la absorción y emisión de energía es un proceso puramente cuántico [21]. Existen muchos materiales luminiscentes, pero no todos son eficientes para ser usados en la práctica o en la investigación. Los materiales más eficientes son aquellos preparados en laboratorios y que tienen una composición química especifica. Estos materiales exhiben un buen grado de repetibilidad y fiabilidad en sus características que son bien calificados para la investigación y aplicaciones prácticas [5].

Un material luminiscente se produce cuando a ciertos sólidos cristalinos, se le añaden impurezas atómicas [6], estas impurezas crean estados metaestables dentro de la banda prohibida de energía (gap con una energía de E_q) del material huésped. Así cuando partículas provenientes de una fuente de radiación nuclear o ultravioleta inciden sobre el material TL excitan electrones de la banda de valencia que saltan a estados de mayor energía en la banda de conducción dejando un número igual de huecos móviles en la banda de valencia, los electrones móviles en su intento por retornar a la banda de valencia pueden quedar atrapados en sitios de trampas o recombinarse con huecos en los denominados centros de recombinación [39]. Como la población de trampas y centros de recombinación ocupados es proporcional a la dosis de radiación incidente, y por otra parte la intensidad TL es a su vez proporcional al decrecimiento de trampas y centros de recombinación ocupados, los materiales TL pueden actuar como un dosímetro TL [9] [6] [50]. Debido a la alta sensibilidad a la radiación ionizante (para baja y alta penetración) de varios tipos (γ , X, e, π , n y algunos iones) estos materiales son también empleados en experimentos de vuelo espacial para dosimetría de rayos cósmicos en la atmosfera superior y el monitoreo de radiación en clínicas veterinarias [48]. Otro campo de gran aplicabilidad es la datación arqueológica y geológica donde la técnica TL es usada para la determinación de la edad de muestras, aquí la suposición válida es que cuando las muestras arqueológicas fueron producidas las altas temperaturas de los hornos donde fueron cocidas borraron completamente cualquier rastro de radiación almacenada antes de la cocción, y por lo tanto la intensidad TL será directamente proporcional a la cantidad de radiación atmosférica (que se considera como constante) recibida por la muestra después de la cocción, obteniendo así una aproximación razonable de la edad de la muestra.

En las últimas décadas se han hecho grandes esfuerzos en el desarrollo y estudio de nuevos materiales TL con el fin de comprender más a fondo las características y mecanismos involucrados en este proceso tan complejo, esto ha permitido tener un mayor campo de aplicabilidad de los materiales TL, dándonos la posibilidad de aplicar el fenómeno de termoluminiscencia al monitoreo específico de los distintos tipos de radiación en las distintas áreas de la dosimetría de radiación ionizante.

Se ha encontrado que el BeO: Mg, Si tiene muchas características deseables como dosímetro TL, tales como su fuerte respuesta TL y la simplicidad de su curva de brillo [7] [8] [2]. Es sensible a la radiación γ y su baja respuesta a los neutrones térmicos permite que sea utilizado en la vecindad de un reactor nuclear. Además su número atómico efectivo ($Z_{eff} \approx 7,1$) [25], comparable con el del agua y el del tejido humano ($Z_{eff} \approx 7,4$), lo hace un buen candidato para aplicaciones en la dosimetría personal y en física médica [49].

1.2. Luminiscencia en sólidos

Muchos solidos resplandecen cuando son calentados a la incandescencia; sin embargo, esto constituye un fenómeno distinto a la luminiscencia. La luminiscencia en sólidos puede producirse por diferentes factores, tales como fuentes de radiación γ , electrones energéticos, radiación UV, nucleones y piones, por campos eléctricos o algunos procesos biológicos. Así el tipo de fuente de excitación clasifica a los distintos procesos de luminiscencia como es mostrado en la tabla (1.1) [39]. La emisión depende principalmente de las características de las impurezas atómicas o moleculares que actúan como centros activadores, estos centros activadores pueden ser defectos puntuales o dislocaciones de la red, cualquier alteración a la red periódica de un cristal o a su estructura se considera una imperfección [35]. Los defectos puntuales son los más sencillos de tratar matemáticamente, algunos defectos de punto se muestran en la figura (1.1), el color de muchos cristales se debe a la presencia de este tipo de defectos, y es por eso por lo que usualmente se les denomina centros de color.

La introducción de impurezas atómicas y defectos dentro de la red, producen estados metaestables dentro de la banda prohibida de energía del material huésped localizada entre la banda de valencia y conducción, estos estados pueden ser tipo electrón o tipo hueco. Un estado típico es mostrado en la figura (1.2), donde se muestra un centro de color denominado centro tipo F. Si se desea desprender electrones atrapados en los distintos niveles metaestables es necesario proporcionar al sistema una cantidad de energía (E) que

Proceso	Modo de excitación
1. Fotoluminiscencia	Luz(ultravioleta).
2. Cátodoluminiscencia	Electrones.
3. Radioluminiscencia	Rayos X, rayos γ , partículas $\alpha \neq \beta$, protones,
	neutrones, piones, fragmentos de fisión, etc.
4. Electroluminiscencia	Aplicaciones de campos eléctricos.
5. Quimioluminiscencia	Reacciones químicas.
6. Triboluminiscencia	Fuerzas mecánicas y fricción.
7. Bioluminiscencia	Acción bioquímica, oxidación de sustancias
	bioquímicas como la luciferina.
8. Termoluminiscencia	Calor, aunque no es el modo de excita-
	ción, sino la causa de la estimulación. Mas
	apropiadamente podría llamarse luminiscen-
	cia térmicamente estimulada.

Tabla 1.1: Procesos de luminiscencia y modos de excitación



Figura 1.1: Algunos tipos de defectos en sólidos

se conoce como la energía de activación de la trampa. La probabilidad por segundo (p) de que un electrón atrapado en una trampa con energía E escape al fondo de la banda de conducción es gobernada por el factor exponencial

de Boltzmann (1.1)

$$p = \frac{1}{\tau} = se^{-\frac{E}{Tk_B}} \tag{1.1}$$

donde τ representa la vida media de la trampa, *s* representa el factor de frecuencia, k_B es la constante de Boltzmann y *T* es la temperatura absoluta en *K*. La vida media de la trampa puede ser muy corta $(10^{-8} \text{ a } 10^{-7} \text{ s})$ y el fenómeno se denomina fluorescencia o en otros casos puede tener componentes adicionales que pueden perdurar por mucho tiempo, esta componente es la denominada fosforescencia [42] [39].



Figura 1.2: Estado base y excitado de un centro de color tipo F en un cristal iónico.

1.2.1. Modelo de coordenadas de configuración

Debido a que un centro luminiscente se encuentra en la vecindad de átomos o moléculas en una red cristalina, estos centros pueden ser tratados matemáticamente mediante el modelo de coordenadas de configuración alrededor del centro, que fue empleado por Seitz en 1939 para la descripción de la luminiscencia [54]. Cuando la radiación incidente actúa sobre el centro luminiscente causa que este se excite e interactúe con sus vecinos más cercanos dentro de la red, dando origen a un pico luminiscente, a una frecuencia más baja que la de la radiación que excitó el centro (desplazamiento Stoke).

$$\hbar\omega_a > \hbar\omega_e \tag{1.2}$$

donde ω_a y ω_b representan la frecuencia de absorción y excitación respectivamente. En este proceso una parte de la energía del centro excitado es transferida a los electrones atrapados en el mismo, de tal forma que esta energía lo excita y lo hace realizar transiciones a órbitas mayores emitiendo un fotón en este proceso, de tal forma que cuando el centro luminiscente regresa a su estado base la energía que emitió es menor que aquella que recibió. Las curvas en la figura (1.3) muestran el modelo, el cual está descrito en términos de la energía de interacción del centro con sus vecinos más próximos como una función del movimiento de iones relativos a sus posiciones de equilibrio, como si el átomo huésped estuviera ocupando el centro del sitio de defecto.

En la figura (1.3) el punto A representa el estado base del centro. Después de la absorción de energía el electrón atrapado en algún nivel del estado base del centro realizará una transición a cualquier nivel del estado excitado del centro (punto B), posteriormente caerá al punto C mediante transiciones noradiativas, de donde realizará una transición al punto D en la curva de los estados base, de donde finalmente regresará al punto A mediante transiciones no radiativas. De la figura vemos que:

$$AB(=\hbar\omega_a) > CD(=\hbar\omega_e) \tag{1.3}$$

Si $U_0 = \hbar \omega_0$, es la energía por la cual está separado el estado base y el estado excitado del centro, entonces se tiene que:

para la absorción

$$E_a = U_0 + U_{\rm vib} = U_0 + n_e \hbar \Omega_e \tag{1.4}$$

para la emisión

$$E_e = U_0 - n_a \hbar \Omega_a \tag{1.5}$$

donde n_e representa algún nivel en el estado excitado del centro y n_a algún nivel en la curva del estado base del centro con frecuencias Ω_e y Ω_a respectivamente. Si consideramos que la forma del potencial en el estado base y excitado del centro son razonablemente parabólicos, entonces para la frecuencia de los fotones podemos considerar $\Omega_e \approx \Omega_a = \Omega$.

$$E_a - E_e = \hbar\Omega \left(n_a + n_e \right) \approx 2n\hbar\Omega = S \tag{1.6}$$

donde S representa el desplazamiento de Stokes. Hasta aquí hemos tratado el problema de una sola transición, pero en general, existe una gran cantidad



Figura 1.3: Diagrama de coordenadas de configuración, las flechas verticales representan transiciones electrónicas, $\Delta r = r - r_0$.

de electrones atrapados en los estados base del centro de recombinación, los cuales pueden realizar transiciones electrónicas similares a la descrita en el párrafo anterior. Entonces, si m y n representan niveles vibracionales en el estado base y excitado del centro de emisión respectivamente, la energía de emisión de la transición del n-ésimo nivel vibracional al m-ésimo nivel en el estado base del centro estará dada por

$$\hbar\omega_{\rm nm} = E_n^e - E_m^a \tag{1.7}$$

que corresponde al k-ésimo estado vibracional del centro de emisión. Al inicio del proceso de emisión el electrón puede estar localizado en cualquier estado excitado, y a través de una transición radiativa pasar a cualquier estado base emitiendo un fotón en el proceso, ya que este proceso se repite para cada electrón localizado en los estados excitados se obtiene una distribución de probabilidades de transición que nos lleva directamente a la llamada banda de emisión, la cual presentará un máximo correspondiente a la máxima probabilidad del estado de desplazamiento del centro en el m-ésimo nivel vibracional [39]. De la misma forma se obtiene la banda de absorción. Así se encuentra y ha sido confirmado experimentalmente, que estas bandas de emisión son razonablemente Gaussianas, esto es expresado como

$$I(\hbar\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\hbar\omega - \hbar\omega_0)^2}{2\sigma^2}}$$
(1.8)

la figura (1.4) muestra la forma de esta ecuación, donde $\hbar\omega_0$ representa el máximo valor posible de la energía del estado excitado del centro en el estado máximo de desplazamiento de este. Hasta aquí hemos considerado que las



Figura 1.4: Bandas de emisión y absorción.

bandas de emisión y absorción no dependen de la temperatura, sin embargo, esto sólo es una idealización que sirve para fines pedagógicos, ya que en la realidad la temperatura domina el fenómeno así un aumento de la temperatura causará un aumento en el ancho de banda. Con el fin de ilustrar esta afirmación consideremos el modelo mecánico cuántico del oscilador armónico simple donde la energía del n-ésimo estado excitado está dada como sigue

$$\frac{1}{2}k_e A_e^2(n) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\Omega_e \tag{1.9}$$

donde $A_e(n)$ es la amplitud para una temperatura elevada, n es el n-ésimo nivel vibracional del ion a la temperatura T. Un ion activador excitado a 0 K, nos da el punto cero de la amplitud de vibración $A_e(0)$ esto es

$$\frac{1}{2}k_e A_e^2(0) = \frac{1}{2}\hbar\Omega_e \tag{1.10}$$

donde $\hbar\Omega_e$ representa la energía por la cual están separados los distintos estados cuánticos en los niveles vibracionales. Si se quiere obtener la dependencia del ancho de banda con la temperatura, es necesario promediar sobre todos los n estados posibles, así se reemplaza $A_e(n,T)$ por $\langle A_e(n,T) \rangle$. Promediemos este valor con la forma estándar del valor promedio

$$< A_e(n) > = \left(\sum_{n=0}^{N} P_n A_e^2\right)^{\frac{1}{2}}$$
 (1.11)

donde P_n es la probabilidad de que el centro excitado se encuentre en el n-ésimo estado vibracional a temperatura T, esta probabilidad es modelada con la estadística de Boltzmann

$$P_n = \frac{e^{\frac{n\hbar\Omega_e}{Tk_B}}}{\sum_n e^{-\frac{n\hbar\Omega_e}{k_BT}}}$$
(1.12)

de las ecuaciones (1.9) y (1.10), tenemos

$$A_e^2(n) = (2n+1) A_e^2(0)$$

sustituyendo esta en la ecuación (1.11), obtenemos

$$< A_e(T) >= A_e(0) \left(\sum_n P_n (2n+1)\right)^{\frac{1}{2}}$$

ahora usando la ecuación (1.12) para P_n

$$< A_e(T) >= A_e(0) \left(\frac{\sum_n (2n+1)e^{-\frac{n\hbar\Omega_e}{k_B T}}}{\sum_n e^{-\frac{n\hbar\Omega_e}{k_B T}}} \right)^{\frac{1}{2}} = A_e(0) (S_n)^{\frac{1}{2}}$$

sí definimos $x = \frac{\hbar \Omega_e}{k_B T}$, s_n viene dada como sigue

$$(S_n) = \left(\frac{\sum_n (2n+1)e^{-nx}}{\sum_n e^{-nx}}\right) = 2\frac{\sum_n ne^{-nx}}{\sum_n e^{-nx}} + 1$$

pero

$$\frac{\sum_{n} n e^{-nx}}{\sum_{n} e^{-nx}} = -\frac{\partial}{\partial x} \ln\left(\sum_{n} e^{-nx}\right)$$
(1.13)

y por otro lado

$$(1-y)^{-1} = 1 + y + y^2 + y^3 + \dots = \sum_n e^{-nx}$$

donde hemos hecho $y=e^{-x}.$ Ahora sustituyendo este resultado en la ecuación (1.13) obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial x}\ln\left(\sum_{n}e^{-nx}\right) = \frac{\partial}{\partial x}\ln(1-e^{-x})^{-1} = \frac{e^{-x}}{1-e^{-x}}$$

entonces la suma s_n se transforma en

$$(S_n) = \frac{2e^{-x}}{1-e^{-x}} + 1 = \frac{1+e^{-x}}{1-e^{-x}} = \coth(\frac{x}{2})$$

con lo cual la ecuación (1.11), nos lleva a la dependencia del ancho de banda con respecto a la temperatura.

$$\langle A_e(T) \rangle = A_e(0) \left[\coth(\frac{\hbar\Omega_e}{2k_BT}) \right]^{\frac{1}{2}}$$
 (1.14)

a través de la ecuación (1.14) se encuentra la dependencia del ancho de banda con la temperatura.

1.2.2. Eficiencia luminiscente: Transiciones no-radiativas

En el proceso de luminiscencia no toda la energía absorbida por el material es emitida en forma de fotones, ya que no todas las transiciones que se dan en el material producen luminiscencia, si observamos la figura (1.3) se puede ver por ejemplo, que si un electrón al inicio del proceso de excitación se encuentra en cualquier estado dentro de la banda de energía del estado base, y si este recibe una cantidad de energía $E + E_Q$, este podría ser excitado de tal forma que pueda retornar al estado base sin una cantidad significativa de radiación, esta misma situación podría ocurrir si el electrón es térmicamente estimulado de tal forma que alcance el punto Q, donde la energía de activación nuevamente seria $E+E_Q$, así se puede definir una probabilidad de que ocurran transiciones no radiativas como sigue

$$q = \nu e^{-\frac{\left(E+E_Q\right)}{k_B T}} \tag{1.15}$$

donde ν (= $10^{12} - 10^{13}s^{-1}$) es la frecuencia asociada a las transiciones no radiativas. Las transiciones radiativas solamente ocurren cuando al electrón se le excita con una energía de activación E, así también es posible definir una probabilidad de ocurrencia de las transiciones radiativas

$$p = se^{-\frac{(E)}{k_B T}}.$$
 (1.16)

donde s representa el factor de frecuencia para transiciones radiativas. En el proceso de luminiscencia ambas transiciones son posibles, así es posible clasificar a los materiales luminiscentes mediante una cantidad llamada eficiencia

luminiscente (η) que se define como el cociente entre la energía emitida y la energía recibida, y se expresa como sigue

$$\eta = \left(\frac{h\nu}{h\nu_0}\right) = \frac{\lambda_0}{\lambda} \tag{1.17}$$

donde λ_0 representa la longitud de onda del haz de excitación y λ representa la longitud de onda del fotón emitido. Por lo tanto η es proporcional a la longitud de onda de excitación. A grandes longitudes de onda la luminiscencia no puede ser excitada y η se va a cero. Las transiciones que dan origen a procesos radiativos son aquellas expresadas por la ecuación (1.16) y estas son las que dan origen a la luminiscencia y las que dan origen a pérdidas de energía son aquellas expresadas por la ecuación (1.15), por lo tanto, el total de la energía recibida será la suma de q+p, entonces la eficiencia luminiscente se puede expresar como sigue [39]

$$\eta = \frac{radia.}{no - radia. + radia.} = \frac{p}{p+q}$$
(1.18)

y usando las ecuaciones (1.16-1.15), obtenemos la conocida expresión para la eficiencia luminiscente

$$\eta = \frac{1}{\left(1 + \frac{\nu}{s}e^{-\left(\frac{E_Q}{k_BT}\right)}\right)} \tag{1.19}$$

1.2.3. Tiempo de vida del estado excitado y duración de la luminiscencia

El tiempo transcurrido después del cese de la radiación (t_0) sobre el material y el instante en que la persistencia luminiscente termina es conocido como duración de la luminiscencia (τ) . Sea $n_i(0)$ la población de electrones del i-ésimo estado excitado al instante t_0 cuando comienza a generarse la luminiscencia (fluorescencia), debido a que el número de electrones atrapados inicialmente en el estado (i) comienza a decrecer, esto ocasionado por transiciones electrónicas a niveles de menor energía (j), lo cual se esquematiza en la figura (1.5). Sí $n_i(t)$ es la población de electrones atrapados en el nivel de energía (i) en el instante t, la disminución de la población de electrones $(-dn_i)$ en el estado i es

$$(-dn_i) \propto n_i(t)dt$$

aunque, como se pude ver en las ecuaciones (1.15) y (1.16), existen dos tipos de transiciones permitidas, aquellas que dan origen a radiación y las que no, por lo tanto, es posible asociar a cada transición una cierta probabilidad de ocurrencia, esto lo podemos expresar como sigue [39]

$$dn_i = -\left(\sum_j A_{ij} + \sum_j B_{ij}\right) n_i(t)dt \tag{1.20}$$

donde $\sum_j A_{ij}$ y $\sum_j B_{ij}$ representan las probabilidades de transiciones radiativas y no-radiativas respectivamente. Integrando esta expresión desde t' = 0 a t' = t, y de $n_i(0)$ a n(t), obtenemos

$$n_i(t) = n_i(0)e^{-\frac{t}{\tau}}$$
(1.21)

donde

$$\tau = \left(\sum_{j} A_{ij} + \sum_{j} B_{ij}\right)^{-1} \tag{1.22}$$

se reconoce a τ como el tiempo de vida del estado excitado. Se puede también

----- *l* (no ocupado)



Figura 1.5: Tiempo de vida del estado excitado.

demostrar que el tiempo de vida del estado excitado es igual al promedio del tiempo de vida por partícula en ese estado [25]. Diferenciando la ecuación (1.21)

$$dn_i(t) = \frac{1}{\tau} n_i(0) e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)} (-dt)$$
(1.23)

y por otra parte el tiempo de vida promedio \bar{t} por partícula se expresa como sigue

$$\bar{t} = \frac{\int_0^\infty t \, dn_i}{\int_0^\infty dn_i} \tag{1.24}$$

sustituyendo la ecuación (1.23) en (1.24) y usando la condición de normalización se llega a

$$\bar{t} = \frac{1}{\tau} \int_0^\infty t e^{-\frac{t}{\tau}} \, dt = \tau \tag{1.25}$$

típicamente la cantidad A_{ij} es del orden de $10^8 s^{-1}$ y por lo tanto su tiempo de vida es del orden de $10^{-8}s$ (Fluorescencia).

1.3. Cinética del decaimiento luminiscente

El mecanismo luminiscente depende en gran medida de los procesos que se llevan a cabo entre electrones y agujeros dentro de los llamados sitios de trampa y/o centros de recombinación, estos sitios se crean debido a la introducción de impurezas en la estructura cristalina, creando estados metaestables dentro de la banda prohibida de energía (gap) de un aislante o semiconductor. Estos estados pueden ser tipo trampa o centros de recombinación, estos últimos son más inestables que las trampas y suelen realizar respuestas luminiscentes casi inmediatas, que dan origen al mecanismo fluorescente. Dentro de estos sitios pueden ocurrir procesos de recombinación entre agujeros (móviles en la banda de valencia) y electrones (móviles en la banda de conducción) o procesos de re-atrapamiento, que en el caso de la termoluminiscencia dan origen a diferentes ordenes de cinéticas (b), en el mecanismo luminiscente, estas cinéticas pueden ser de primero o segundo orden, y en casos especiales de orden general. Cabe mencionar que la determinación del parámetro b juega un papel muy importante a la hora de determinar parámetros luminiscentes, tales como energía de activación E, factores de frecuencia S, etc., la mala determinación de este parámetro a conducido a grandes inconsistencias [5] [25] [39] [60].

1.3.1. Decaimiento fluorescente

Los materiales que se califican como fluorescentes se caracterizan por tener un número elevado de centros luminiscentes comparado con el número de trampas presentes. En el proceso fluorescente la energía incidente es absorbida directamente por el centro de recombinación y reemitida en forma de luz en un tiempo considerablemente corto de aproximadamente 10^{-8} s. Durante el proceso de excitación los centros luminiscentes son poblados por electrones, una vez que la fuente de radiación excitante es apagada, los centros excitados comienzan a decaer de forma que la tasa de decaimiento $\left(-\frac{dn}{dt}\right)$ de estos centros depende esencialmente del número de centros de recombinación excitados en cualquier instante t, esto es

$$-\frac{dn}{dt} = \alpha n(t) \tag{1.26}$$

donde $\alpha = \frac{1}{\tau}$ representa la probabilidad de reatrapamiento. Integrando

$$\int_{n_0}^n \frac{1}{n'} \, dn' = \int_0^t \alpha t' \, dt' \tag{1.27}$$

que nos lleva a:

$$n(t) = n_0 e^{-\alpha t}.$$
 (1.28)

donde n_0 representa el número de centros excitados en el instante (t = 0)cuando la radiación excitante es apagada, y n(t) representa el número de centros excitados en un instante t. La intensidad de emisión está dada por

$$I = -c\frac{dn}{dt} = c\alpha n \tag{1.29}$$

y con (1.28) llegamos a:

$$I = I_0 e^{-\alpha t} \tag{1.30}$$

donde $I_0 = c\alpha n_0$. Esta es la intensidad característica de la cinética de primer orden o monomolecular (aquí se considera α independiente de la temperatura).

Si después del proceso de irradiación los electrones fueran excitados, estos podrían cruzar de la banda de valencia a la de conducción dejando en promedio un número igual de huecos en esta última como se ilustra en la figura (1.6) (aquí se supone que la probabilidad de re-atrapamiento es nula). Duran-



Figura 1.6: Modelo de Randall-Wilkins

te la irradiación la pérdida de electrones en la banda de valencia compite con la luminiscencia, pero después del cese de la irradiación la tasa de pérdida de electrones en la banda de conducción y de huecos en la banda de valencia que se combinan en el centro de recombinación está dada como

$$-\frac{dn}{dt} = rn^2 \tag{1.31}$$

donde r,representa la probabilidad de recombinación entre electrones y huecos. Integrando

$$n = \frac{n_0}{1 + n_0 r t} \tag{1.32}$$

y usando la expresión (1.30) llegamos a:

$$I = \frac{I_0}{(1+n_0 r t)^2} \tag{1.33}$$

esta ecuación representa el decaimiento hiperbólico de la fluorescencia, y es característica de la cinética de segundo orden.

1.3.2. Decaimiento fosforescente

A diferencia de la fluorescencia en la que los tiempos característicos son demasiado rápidos, en la fosforescencia los tiempos de vida son más largos ya que están gobernados por los tiempos de vida de las trampas, y, por lo tanto, la emisión ahora involucra el rol de las trampas. Los niveles de trampa pueden pertenecer tanto al átomo huésped en sí mismo, bajo la influencia perturbativa causada por un átomo activador vecino, así como a los defectos de red causados por la incorporación de átomos activadores, en la cinética de primer orden la tasa de liberación de electrones de la trampa es

$$-\frac{dn}{dt} = \frac{n(t)}{\tau} \tag{1.34}$$

donde τ representa el tiempo de vida de la trampa. Esta última ecuación nos lleva a una intensidad de emisión dada por

$$I = \frac{cn_0}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}} \tag{1.35}$$

la fuerte dependencia en temperatura de los niveles de trampa (debida a que los tiempos de vida son más largos) nos lleva a incluir el factor de Boltzmann, sustituyendo (1.1) en (1.35), obtenemos

$$I(t,T) = csn_0 e^{-\left(\frac{\epsilon}{k_BT}\right)} e^{-ste^{-\left(\frac{\epsilon}{k_BT}\right)}}$$
(1.36)

donde ϵ representa la energía de activación. De (1.36) se nota la principal diferencia entre la fosforescencia y la fluorescencia, ya que en la primera se necesita proporcionar una cantidad de energía ϵ para producir la luminiscencia, en cambio en el mecanismo fluorescente la transición es instantánea.

En la cinética de segundo orden para la fosforescencia se asume que el electrón después de ser liberado de la banda de conducción tiene igual probabilidad de ser reatrapado o recombinado con el hueco liberado de la banda de valencia. Si N representa la concentración de trampas, n representa el número de trampas ocupadas y m es la concentración de huecos, entonces la probabilidad (p) de que el electrón escape de la trampa y se recombine con el hueco es

$$p = \frac{m}{(N-n)+m} \tag{1.37}$$

la neutralidad del cristal exije que m = n, por lo tanto

$$\frac{n}{(N-n)+n} = \frac{n}{N} \tag{1.38}$$
ahora la intensidad I está dada por el decrecimiento de la densidad de trampas ocupadas que resulta en la recombinación

$$I = -cp\frac{dn}{dt} = c\frac{n}{N}\frac{n}{\tau}$$
(1.39)

integrando la ecuación (1.39) para $n \ge t$

$$n = \frac{n_o N \tau}{[n_o t + N \tau]} \tag{1.40}$$

y sustituyendo (1.40) en (1.39)

$$I = \frac{cn_0^2}{N\tau} \frac{1}{\left(1 + \frac{n_0 t}{N\tau}\right)^2}$$
(1.41)

que da la forma hiperbólica del decaimiento fosforescente y surge de la inclusión del rol jugado por el mecanismo de reatrapamiento.

1.4. Termoluminiscencia en sólidos

La emisión de luminiscencia en el proceso fosforescente no es espontanea como se ha visto en las secciones precedentes ya que es necesario suministrar una cantidad de energía E para desprender electrones atrapados en los distintos sitios de defecto del cristal, de hecho, en la realidad estos distintos niveles de trampa producen curvas de brillo con distribuciones tipo gaussianas superpuestas. Después de la irradiación del material luminiscente, el cual contiene distintos tipos de trampa, los electrones de la banda de conducción son excitados y realizan transiciones a estados metaestables o sitios de trampa, si después de esto los electrones son estimulados térmicamente, calentando el material a una tasa constante de temperatura $\beta = \frac{dT}{dt}$, los electrones adquieren la energía necesaria para escapar de las trampas y pasar a la banda de conducción, de donde en su intento por retornar a la banda de valencia pueden ser reatrapados o recombinados en los niveles de trampa o centros de recombinación distribuidos en el cristal, esto dará origen a distintos mecanismos de producción de luz (cinética). Si este proceso es controlado experimentalmente mediante el equipo necesario y el software adecuado, es posible registrar la intensidad luminiscente en función de la temperatura, y obtener una curva de resplandor o brillo, que en general estará compuesta por varias componentes TL, que son el producto de las distintas distribuciones de trampa y centros de recombinación, y así cada una de estas componentes estará descrita por los siguientes parámetros:

- 1. Profundidades de trampas.
- 2. Densidades de trampa electrón/hueco.
- 3. Factores de frecuencia, s.
- 4. Movilidad de portadores.
- 5. Secciones de captura a través de trampas.

1.4.1. Modelo de bandas de Randall-Wilkins

Este modelo asume la existencia de un solo nivel de trampa en la banda prohibida de energía como se muestra en la figura (1.6), cuando se asume que el electrón no puede ser reatrapado y solamente tiene posibilidad de ir directamente al centro luminiscente, esto constituye la base de la cinética de primer orden de la termoluminiscencia. Como la temperatura incrementa a una tasa lineal constante β (ó hiperbólica en algunos casos), las trampas próximas a la trampa principal a una profundidad E por debajo de la banda de conducción comienzan a liberarse. El pico en la curva de brillo así relaciona el máximo en la distribución de densidad de las trampas ocupadas alrededor de la trampa principal de energía de activación E.

1.4.2. Determinación de parámetros de trampa mediante métodos termoluminiscentes

Como se ha visto en las secciones anteriores, a temperatura T, el desprendimiento térmico de electrones es proporcional al número de electrones presentes en ese estado de energía, es decir

$$-\frac{dn}{dt} \propto n(t)$$

con un factor de probabilidad que viene dado por las transiciones radiactivas (p) dado por la ecuación (1.16), es decir aquellas que dan origen a emisión de luz y que se registran en las curvas luminiscentes

$$-\frac{dn}{dt} = pn = sne^{-\frac{E}{k_B T}} \tag{1.42}$$

donde s es el factor de frecuencia y E es la energía de activación de la trampa. Despejando

$$-\frac{dn}{n} = se^{-\frac{E}{k_B T}}dt$$

sustituyendo $q=\frac{dT}{dt}$ en la expresión anterior

$$\frac{dn}{n} = -\frac{s}{q}e^{-\frac{E}{k_BT}}dT$$

e integrando

$$\int_{n_0}^n \frac{1}{n'} dn' = -\int_{T_i}^T \frac{s}{q} e^{-\frac{E}{k_B T'}} dT'$$
(1.43)

realizando la integración obtenemos

$$n = n_0 e^{-\int_{T_i}^T \frac{s}{q} e^{-\frac{E}{k_B T'}} dT'$$
(1.44)

donde n_0 denota el número de electrones atrapados en la trampa en el instante cuando la radiación cesa. La curva termoluminiscente surge cuando los electrones atrapados son liberados mediante estimulación térmica y se recombinan con los huecos en los centros de recombinación [5] [42], esta intensidad está dada mediante la siguiente relación

$$I = -c\frac{dn}{dt} = snce^{-\frac{E}{k_BT}}$$
(1.45)

donde c es una constante para ajustar dimensiones. Sustituyendo la ecuación (1.42) en (1.45) é integrando, llegamos a

$$I = cn_0 s e^{-\frac{E}{k_B T}} e^{-\int_{T_i}^T \frac{s}{q}} e^{-\frac{E}{k_B T'}} dT'$$
(1.46)

la ecuación (1.46) representa la intensidad TL para una cinética de primer orden y fue derivada por primera vez por Randall y Wilkins [46]. A bajas temperaturas ($T \approx T_i$), la integral en la ecuación (1.46) tiende a cero y por lo tanto la exponencial tiende a la unidad, mientras que a altas temperaturas, el segundo término exponencial se vuelve más importante, y la termoluminiscencia decrece, así se observa que la ecuación (1.46) presentará un máximo en intensidad a cierta temperatura T_m . Notemos que $\frac{dln(I)}{dT} = \frac{1}{I} \frac{dI}{dT} = 0$ (evaluado en $T = T_m$), así la condición de máximo se puede escribir como

$$-\frac{s}{q}e^{-\frac{E}{k_B T_m}} + \frac{E}{k_B T_m^2} = 0$$
(1.47)

o bien de forma alternativa

$$\frac{qE}{k_B T_m^2} = se^{-\frac{E}{k_B T_m}} \tag{1.48}$$

la ecuación (1.48) nos permite conocer el valor de s cuando E es determinada por algún método adicional, T_m y q son provistos por mediciones experimentales.

En 1948 Garlick y Gibson sugirieron la posibilidad de una cinética de segundo orden [27], la cual surge de postular que el electrón tiene la misma probabilidad de ser recombinado o reatrapado en los centros luminiscentes, aunque en este caso solamente trataremos el proceso de reatrapamiento como dominante. Con lo anterior la razón de desprendimiento de electrones (1.42) se convierte ahora en

$$-\frac{dn}{dt} = s'n^2 e^{-\frac{E}{k_B T}} \tag{1.49}$$

donde s' representa el factor de frecuencia para la cinética de segundo orden. Si introducimos en la ecuación (1.49) una tasa constante de calentamiento $\beta = \frac{dT}{dt}$, obtendremos que

$$-\frac{dn}{n^2} = \frac{s'}{q} e^{-\frac{E}{k_B T}} dT \tag{1.50}$$

y realizando nuevamente la integración como en ecuación (1.43)

$$\int_{n_0}^{n} \frac{1}{n'^2} dn' = -\int_{T_i}^{T} \frac{s'}{q} e^{-\frac{E}{k_B T'}} dT'$$

$$n = n_0 \left(1 + \frac{s' n_0}{q} \int_{T_i}^{T} e^{-\frac{E}{k_B T'}} dT' \right)^{-1}$$
(1.51)

y usando la ecuación (1.49)

$$I = cs' n_0^2 e^{-\frac{E}{k_B T}} \left(1 + \frac{s' n_0}{q} \int_{T_i}^T e^{-\frac{E}{k_B T'}} dT' \right)^{-2}.$$
 (1.52)

la ecuación anterior describe el comportamiento luminiscente de la cinética de segundo orden. Las diferencias entre las ecuaciones (1.46) y (1.52) se muestran en la figura (1.7).

Existe también la posibilidad de una cinética de orden general, la cual fue



Figura 1.7: Curvas de brillo, la curva a representa la cinética de orden intermedio, la curva b representa una cinética de segundo orden (más simétrica) y la curva c se muestra más asimétrica (primer orden)..

introducida por Chen en 1981 [16]. En este caso la tasa de decrecimiento del número de portadores en la banda de conducción es descrita mediante ecuaciones similares a (1.42) y (1.49) que describen cinéticas de primero y segundo orden respectivamente, así la tasa de decrecimiento en el número de portadores liberados para una cinética de orden general será

$$-\frac{dn}{dt} = s'' n^b e^{-\frac{E}{k_B T}} \tag{1.53}$$

donde s'' es el equivalente al factor de frecuencia para una cinética de orden general y b es esencialmente una medida de la capacidad que tienen los portadores liberados de la banda de conducción de ser reatrapadas o recombinados con las trampas o centros luminiscentes respectivamente, por ejemplo para las cinéticas de primer orden en la ecuación (1.42), b = 1 representa la imposibilidad de que el electrón sea reatrapado o recombinado por alguna trampa o centro de recombinación y en la ecuación (1.49), b = 2 nos dice que el electrón liberado tiene la misma probabilidad de ser reatrapado o recombinado, según el modelo de Garlick-Gibson, este parámetro b, está definido por las propiedades físicas y químicas de los fósforos luminiscentes y se le conoce como orden de cinética. Reacomodando términos e integrando la ecuación (1.53), llegamos a

$$\int_{n_0}^n \frac{1}{n'^b} \, dn' = -\int_{t_0}^t s'' e^{-\frac{E}{k_B T'}} \, dt$$

usando nuevamente un calentamiento a incremento constante de temperatura $\beta = \frac{dT}{dt}$, obtenemos que

$$\int_{n_0}^n \frac{1}{n'^b} dn' = -\int_{T_i}^T \frac{s''}{\beta} e^{-\frac{E}{k_B T'}} dT'$$
(1.54)

integrando el lado izquierdo y después de algunos pasos algebraicos, llegamos a

$$n^{1-b} = n_0^{1-b} \left(1 + \frac{(b-1)s'' n_0^{b-1}}{\beta} \int_{T_i}^T e^{-\frac{E}{k_B T'}} dT' \right)$$

simplificando términos

$$n(T) = n_0 \left(1 + \frac{(b-1)s'' n_0^{b-1}}{\beta} \int_{T_i}^T e^{-\frac{E}{k_B T'}} dT' \right)^{\frac{1}{1-b}}$$
(1.55)

esta ecuación nos da el número de portadores liberados de las trampas a la banda de conducción en función de la temperatura (T). Usando las expresiones (1.45) y (1.53) obtenemos la intensidad de emisión TL en función del número de portadores de carga y de la temperatura (T) para el caso de una cinética de orden general

$$I(T) = cs'' n^b e^{-\frac{E}{k_B T}} \tag{1.56}$$

ahora sustituyendo n de la ecuación (1.55) llegamos finalmente a la expresión para la intensidad luminiscente en función de la temperatura (T) en el caso de una cinética de orden general

$$I(T) = cs'' n_0^b e^{-\frac{E}{k_B T}} \left(1 + \frac{(b-1)s'' n_0^{b-1}}{\beta} \int_{T_i}^T e^{-\frac{E}{k_B T'}} dT' \right)^{\frac{b}{1-b}}$$
(1.57)

definiendo

$$s' \equiv s'' n_0^{b-1}$$

y así la expresión (1.57) se convierte en

$$I(T) = cs'n_0 e^{-\frac{E}{k_B T}} \left(1 + \frac{(b-1)s'}{\beta} \int_{T_i}^T e^{-\frac{E}{k_B T'}} dT' \right)^{\frac{b}{1-b}}$$
(1.58)

como en los casos anteriores, el primer término de la exponencial incrementa conforme incrementa la temperatura y el segundo término decrece conforme decrece la temperatura y por lo tanto (1.58) tendrá un máximo.

Para obtener la condición de máxima emisión en el caso de una cinética de orden general se puede proceder de forma similar a como se hizo para una cinética de primer y segundo orden, tomemos la expresión (1.58) y derivemos logarítmicamente, después igualemos a cero

$$\frac{dln(I)}{dT}\Big]_{T=T_m} = \frac{1}{I}\frac{dI}{dT}\Big]_{T=T_m} = 0$$

efectuando los cálculos sobre la ecuación (1.58) obtenemos la condición de máximo para una cinética de orden general

$$\frac{s'bk_B T_m^2}{\beta E} e^{-\frac{E}{k_B T_m}} = 1 + \frac{(b-1)s'}{\beta} \int_{T_i}^{T_m} e^{-\frac{E}{k_B T}} dT$$
(1.59)

que puede ser resuelta por el método de las dos tasas o mediante una serie asintótica, como lo mostró Chen [14] estos procedimientos se muestran en las siguientes secciones.

1.5. Método Geométrico de Chen

El método geométrico de Chen [14], ha sido empleado en trabajos previos por Azorín et al [7], Algarve and Caldas [2] entre otros muchos autores para determinar parámetros cinéticos en BeO : Mg, Si y otros dosimetros TL, tales como energía de activación y factores de frecuencia etc. El método geométrico es muy utilizado en el TLD-100 y en el $CaSO_4$ así como en otros dosímetros TL. El método de Chen es empleado en la actualidad para contrastar resultados ya que debido a su confiabilidad se considera como una buena referencia, a la hora de calcular parámetros cinéticos. Sin embargo, estudios de simulación realizados por E. Cruz et al., en 2006 [34] han demostrado que los métodos basados en la forma de pico y los llamados métodos heurísticos ofrecen una aproximación poco aceptable para los valores de los parámetros TL y por lo tanto no pueden ser utilizados en la determinación de parámetros TL en forma aislada, es decir sin comparar con otros métodos de determinación de parámetros TL

. Este método es empleado como referencia en la determinación del orden de cinética (b), energía de activación (E) y el factor de frecuencia (s), Chen [15] ha discutido antes este procedimiento que está basado en la determinación experimental de los parámetros $\omega = T_2 - T_1$, $\tau = T_m - T_1$, $\delta = T_2 - T_m$ y el factor de simetría μ_g , este último determina el orden de cinética (b), y esta expresado en la ecuación (1.60)

$$\mu_g = \frac{\delta}{\omega} = \frac{T_2 - T_m}{T_2 - T_1} \tag{1.60}$$

donde T_2 , T_1 y T_m son mostrados es la figura (1.8). Estudios experimentales realizados por Chen y Kirsh et al [16], permitieron expresar una relación empírica para el cálculo de la energía de activación dada por la ecuación (1.61)

$$E_{\alpha} = \frac{C_{\alpha}k_B T_m^2}{\alpha} - 2k_B T_m a_{\alpha} \tag{1.61}$$

donde α representa cualquiera de los tres parámetros ω , τ y δ . Los valores para C_{α} y a_{α} han sido sugeridos por Chen [15] para el caso de una cinética de orden general y están dados por las ecuaciones (1.62-1.64) para C_{α}

$$C_{\tau} = 1.51 + 3(\mu_g - 0.42) \tag{1.62}$$

$$C_{\delta} = 0.976 + 7.3(\mu_g - 0.42) \tag{1.63}$$

$$C_{\omega} = 2.52 + 10.2(\mu_g - 0.42) \tag{1.64}$$

si se considera que el factor de frecuencia (S) no depende de la temperatura, a_{α} puede ser expresada como se muestra en las ecuaciones (1.65-1.67)

$$a_{\tau} = 1.58 + 4.2(\mu_q - 0.42) \tag{1.65}$$

$$a_{\delta} = 0 \tag{1.66}$$

$$a_{\omega} = 1 \tag{1.67}$$

donde μ_g está dado por (1.60). Existen otros métodos que utilizan la forma del pico, tales como el método sugerido por Halperin y Bramer [28], Patridge



Figura 1.8: Curva de brillo típica. Donde $\omega = T_2 - T_1$, $\tau = T_m - T_1$, $\delta = T_2 - T_m$, parámetros utilizados para el cálculo de la energía y el factor de simetría ($\mu_g = \frac{\delta}{\omega}$) introducido por Halperin y Braner, y que como ha sido mostrado por Chen un valor igual a 0.42 representa una cinética de primer orden, y un valor cercano a 0.52 representa una cinética de segundo orden

y May [43] entre otros, que sirve para determinar la energía de activación y otros parámetros TL, en aquellos casos donde el orden de cinética está bien definido, es decir donde el factor de simetría es aproximadamente $\mu_g = 0.42$ (que corresponde a una cinética de primer orden) o $\mu_g = 0.52$ (que corresponde a una cinética de segundo orden). De datos experimentales, Halperin y Bramer [28], dieron una relación para la determinación de la energía en el caso de una cinética de primer orden (ver la figura (1.8)), dada por

$$E_1 = \frac{(1.52)k_B T_m^2}{\tau} - (1.58)(2k_B T_m)$$
(1.68)

que puede ser obtenida sustituyendo las ecuaciones (1.62) y (1.65) en (1.61) y considerando $\mu_q = 0.42$. Para una cinética de segundo orden tendremos

$$E_2 = \frac{(1.81)k_B T_m^2}{\tau} - 2k_B T_m \tag{1.69}$$

el primer término puede obtenerse de la misma forma que la expresión (1.67), sin embargo, el segundo término aparece multiplicado por un factor de dos, por lo tanto las expresiones de Chen y Halperin difieren por un factor de 2.

Para determinar el factor de simetría μ_g y el correspondiente orden de cinética, se puede usar la curva dadas por Chen en 1969 [14], quien utilizó la expresión para una cinética de orden general introducida por May y Partridge [43], que está dada por la expresión (1.53). Chen aproximo la integral que aparece en la expresión (1.59), en forma de un número de términos de una serie asintótica (ecuación (1.70)),

$$\int_{T_i}^T e^{-\frac{E}{k_B T'}} dT' \approx T e^{-\frac{E}{k_B T}} \sum_n \left(\frac{k_B T}{E}\right)^n (-1)^{n-1} n! \tag{1.70}$$

entonces, la ecuación (1.59), se puede escribir como sigue

$$\frac{s'\alpha k_B T_m^2}{\beta E} e^{-\frac{E}{k_B T_m}} = 1 + \frac{(\alpha - 1)s'}{\beta}$$

$$\left(T_m e^{-\frac{E}{k_B T_m}} \sum_n \left(\frac{k_B T_m}{E}\right)^n (-1)^{n-1} n!\right)$$
(1.71)

Chen resolvió numéricamente esta ecuación para α , s, E y q (asumiendo que $T_m \gg T_i$), para valores de α , entre 0.7 y 2.5, valores de s entre 10^5 y 10^{13} s⁻¹, y valores de la energía entre 0.1 y 1.6 eV, estos intervalos de valores cubren completamente los valores calculados para el BeO : Mg, Si, los resultados de Chen son representados esquemáticamente en la Figura (1.9). A pesar de que el método de Chen fue desarrollado en la década de los 60, debido a su fiabilidad sigue siendo ampliamente utilizado hasta nuestros días, como un método para contrastar resultados con herramientas computacionales como la deconvolución, y métodos más modernos como el decaimiento isotérmico entre otros. El factor de frecuencia para una cinética de primer orden puede ser determinado usando la ecuación (1.48), sin embargo, la expresión (1.59) no puede ser utilizada directamente para calcular el factor de simetría en una cinética de segundo orden, esto problema puede ser resuelto por empleo de la ecuación (1.71) mediante una aproximación a segundo orden obtendremos

$$\frac{s'\alpha k_B T_m^2}{\beta E} e^{-\frac{E}{k_B T_m}} \approx 1 + \frac{(\alpha - 1)s'}{\beta} \left(\frac{k_B T_m^2 (1 - \Delta)}{E} e^{-\frac{E}{k_B T_m}}\right)$$

reacomodando términos, obtenemos

$$\frac{\beta E}{k_B T_m^2} \approx s \left[1 + (b-1)\Delta\right] e^{-\frac{E}{k_B T_m}} \tag{1.72}$$



Figura 1.9: Imagen tomada de *Chen*[1969] [14]. Factor de simetría (μ_g) calculado como función del orden de cinética (b). La línea central da el promedio, las líneas punteadas abajo y arriba dan la incertidumbre

donde se ha definido $\Delta = \frac{2k_B T_m}{E}$, si hacemos b = 1 la ecuación (1.72) se reduce a la ecuación (1.48) la cual nos da el factor de frecuencia para una cinética de primer orden. A pesar de que la ecuación (1.72) nos da un valor más aproximado de S la introducción del segundo término entre corchetes del lado derecho de esta ecuación solamente traería complicaciones en el cálculo del factor de frecuencia, y la corrección no sería de más del 1%, esto se ve desde que típicamente los valores de $T_m \approx 373 \ K \ y \ E \approx 1,00 \ eV$, y con los valores de $k_B=0.0000862 \ \frac{eV}{k}$ tenemos que $\Delta \approx 0.03215$, que como se ve de la ecuación (1.72) es irrelevante en el cálculo, entonces podemos aproximar a

$$s \approx \frac{\beta E}{k_B T_m^2} e^{\frac{E}{k_B T_m}} \tag{1.73}$$

la incertidumbre que se obtiene en el cálculo del factor de frecuencia con métodos que utilizan cálculos previos de la energía introduce grandes incertidumbres en el cálculo del factor de frecuencia, esto viene directamente de la ecuación (1.73), sacando logaritmo en ambos lados

$$Ln\left(\frac{\beta E}{k_B T_m^2}\right) = Ln(s) - \left(\frac{E}{k_B T_m}\right) \tag{1.74}$$

si se asume que el cálculo de β y T_m no implica incertidumbre, diferenciando la ecuación (1.74), tenemos

$$\frac{\Delta s}{s} = \frac{\Delta E}{E} + \frac{\Delta E}{k_B T_m} = \frac{\Delta E}{E} \left(1 + \frac{E}{k_B T_m} \right) \tag{1.75}$$

y de lo dicho en los cálculos anteriores $1 \ll \frac{E}{k_B T_m},$ con lo que se tiene que

$$\frac{\Delta s}{s} \gg \frac{\Delta E}{E} \tag{1.76}$$

de donde se encuentra que cualquier incertidumbre en la evaluación de la energía, introduciría grandes incertidumbres en el cálculo del factor de frecuencia, lo cual hace énfasis en la dependencia entre el factor de frecuencia y la energía de activación, y por lo tanto las posibles inconsistencias que se pueden tener en los métodos heurísticos o de forma del pico [34]. Además debe tenerse en cuenta que para este tratamiento se ha considerado que el factor de frecuencia es independiente de la temperatura, lo cual es una suposición que puede conducir a valores de incertidumbre elevados en los valores de la energía de activación, ya que en general el factor de frecuencia es dependiente de la temperatura [24].

Para este trabajo de tesis se emplearon modelos de deconvolución relativamente sencillos que no toman en cuenta la dependencia de la temperatura en el factor de frecuencia y demás parámetros, estos métodos son descritos a continuación.

1.6. Deconvolución

La deconvolución es el proceso mediante el cual una curva de brillo es separada en picos singulares a través del ajuste de componentes TL individuales descritos por diversos modelos teóricos tales como: el modelo de Halperin y Braner [28], la expresión semi-análitica derivada del modelo de recombinación de una trampa [33] [51], el modelo descrito por Kitis et al., 1998 [32], el modelo de la distribución exponencial de trampas que ofrece un método mas sofisticado de deconvolución [17] [22], entre muchos otros. En los últimos 30 años la deconvolución ha sido elegida como uno de los métodos favoritos en el cálculo de parámetros TL [19] [2] [31] [22] [2] [4] [51], aunque también se ha empleado en procedimientos rutinarios de dosimetría de radiación ionizante, un paso importante para establecer a la deconvolución en una fuente de investigación confiable, se desarrolló en el llamado proyecto 'GLOCANIN' [11], que consistió en una intercomparación de los diferentes métodos computacionales de análisis de la curva TL.

En el presente trabajo se utilizaron dos softwares para realizar el análisis de la curva TL, Glow-Fit y el paquete 'tgcd' en R, el primero es empleado en curvas de brillo que exhiben una cinética de primer orden, su principal ventaja radica en resolver complejas curvas de brillo que consisten en picos fuertemente superpuestos. Glow- Fit utiliza el método de mínimos cuadrados de Levenberg-Marquardt [42], para ajustar una función no lineal que describe un único pico luminoso, a un conjunto de datos experimentales (curva de brillo) [45], una de las principales ventajas de Glow-Fit es su uso amigable, ya que a diferencia de sus antecesores (GCA, MTT-type, etc.) permite un modo más interactivo de fijar los parámetros TL, ya que estos son fijados a través de un clic en la curva de brillo, después el programa inicia el ajuste y el paso final es el ajuste manual. El paquete de deconvolución 'tgcd' en 'R' utiliza la expresión empírica de orden general o la expresión semi-analítica derivada del modelo de recombinación de una trampa (o por sus siglas en inglés the one trap-one recombination (OTOR) model) [33] [55], utilizando un algoritmo modificado de Levenberg-Marquardt [44]. Proporciona la posibilidad de imponer restricciones o hacer correcciones a los parámetros. Al igual que Glow-Fit ofrece una forma interactiva de iniciar la fijación de los parámetros, haciendo clic en cada posición donde se crea que se centran los máximos de intensidad de cada pico, la estimación óptima se obtiene mediante 'prueba y error', este software también proporciona rutinas para simular picos de brillo de primer orden, segundo orden y orden general (curvas).

La estimación de la incertidumbre en la deconvolución viene dada por una expresión conocida como la figura de mérito (FOM) [44] [45], y está dada por

$$FOM = \sum_{j_i}^{j_f} \frac{100|y_i - y(x_j)|}{A}$$

donde FOM=Figura de Mérito (%), j_i = primer canal en la región de interes; j_f =último canal en la región de interés; y_j =contenido de información

del canal; $y(x_j)$ =valor de la función de aproximación es el canal j; A=integral de la curva Glow aproximada en la región de interés. El FOM es una expresión más conveniente que el Chi-cuadrado porque la desviación estándar de la intensidad TL en cada canal, usada en la expresión para el Chi-cuadrado, usualmente no se conoce en aplicaciones TLD [3]. Cabe mencionar que estos modelos son solo una aproximación a curvas de brillo relativamente sencilla que requerirán más estudios en el futuro. A continuación, se describirán los modelos de deconvolución empleados para el análisis de las curvas de brillo estudiadas en este trabajo de tesis.

1.6.1. Deconvolución GLOW-FIT

El análisis de la curva de brillo, mediante el software Glow-Fit está basado en el modelo para una cinética de primer orden de Randall-Wilkins (ecuación 1.46), a través de una modificación hecha por Horowitz y Yossian en 1995 [30], quienes introdujeron la siguiente expresión

$$I(T) = I_m \exp\left(-\frac{E}{k_B T_m^2} \int_{T_m}^T \exp\left(\frac{E}{k_B T_m} - \frac{E}{k_B T'}\right) dT'\right)$$
$$\exp\left(\frac{E}{k_B T_m} - \frac{E}{k_B T}\right)$$
(1.77)

la ecuación anterior toma en cuenta el parámetro T_m que es de fundamental importancia en la caracterización de parámetros TL, en esta expresión, $T(t) = T_0 + \beta t$. La ecuación (1.77), no se puede resolver analíticamente, es por eso por lo que se han hecho diversas aproximaciones, tales como la suma dada en la ecuación (1.70), introducida por Chen [14], en el caso de Glow-Fit, M. Puchalska y P. Bilski [45] utilizaron la aproximación de Abramowitz y Stegun [1972] de la integral

$$\int_{0}^{T} \exp\left(-\frac{E}{k_{B}T'}\right) dT' \approx \frac{E}{k_{B}} \int_{x}^{\infty} x'^{-2} \exp\left(-x'\right) dx' = \frac{E}{k_{B}} \frac{1}{x} E_{2}(x) \quad (1.78)$$

donde $x = \frac{E}{k_B T}, x' = \frac{E}{k_B T'}$ y $E_2(x) = \alpha(x) \exp(-x)$, donde $\alpha(x)$, es un cociente de polinomios de cuarto orden [Abramowitz y stegun [1972]]

$$\alpha(x) = 1 - \frac{a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + x^4}{b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3 + x^4}$$
(1.79)

con lo que finalmente obtenemos la siguiente expresión, que es usada para describir un pico aislado en la curva de brillo (Bos et al. 1994 [11])

$$I(T) = I_m \exp\left(\frac{E}{k_B T_m} \left(\alpha \left(\frac{E}{k_B T_m}\right) - \frac{T}{T_m} \exp\left(\frac{E}{k_B T_m} - \frac{E}{k_B T}\right) \alpha \left(\frac{E}{k_B T}\right)\right)\right)$$
$$\exp\left(\frac{E}{k_B T_m} - \frac{E}{k_B T}\right)$$
(1.80)

Esta expresión demuestra que la curva de brillo es una función no lineal de los parámetros T_m y E, y además contiene un parámetro libre adicional (I_m) . Glow-Fit utiliza la expresión (1.80), para a través de un proceso iterativo encontrar el mejor ajuste posible a los datos experimentales. Glow-Fit según M. Puchalska y P. Bilski, es capaz de realizar la deconvolución de 10 picos de manera individual. El proceso de minimización comienza con los valores de prueba. En este programa, se eligió el método de Levenberg-Marquardt para la minimización de la función no lineal. Para permitir que el usuario controle los parámetros de ajuste de pico, el algoritmo original se modificó para excluir o restringir cualquier parámetro dado del pico. Glow-Fit utiliza un total de 33 parámetros desconocidos, para realizar el mejor ajuste posible a los datos experimentales, los 3 parámetros adicionales surgen de los parámetros de fondo desconocidos, dados por la ecuación (1.81)

$$I_q = a + be^{\frac{T}{c}} \tag{1.81}$$

en esta ecuación, a, b y c, representan los 3 parámetros desconocidos de fondo.

1.6.2. Deconvolución con 'tgcd' en 'R'

Este método desarrollado por J.Peng [44] ayuda en la deconvolución de las curvas de brillo de la termoluminiscencia a través de la expresión empírica de orden general o la expresión semi-analítica derivada del modelo de recombinación de una sola trampa (OTOR) [51], desarrollada por Kitis y Vlachos en 2013 [33], la deconvolución 'tgcd' en 'R' emplea el algoritmo de minimización de Lenvenberg-Marquardt más modificaciones que permiten introducir constricciones y fijar algunos parámetros. La expresión desarrollada por Kitis [32] se da a través de la ecuación (1.82)

$$I(T) = I_m b^{\frac{b}{b-1}} \left((b-1)(1-x_a) \frac{T^2}{T_m^2} expv + Z_m \right) expv^{\frac{-b}{b-1}}$$
(1.82)

 ${\rm donde}$

$$x_a = \frac{2k_BT}{E}$$
$$x_b = \frac{2k_BT_m}{E}$$
$$expv = exp(\frac{E}{k_BT}\frac{T-T_m}{T_m})$$
$$Z_m = 1 + (b-1)x_b$$

donde *b* es el orden de cinética (se encuentra entre 1 y 2), *I* es la intensidad de respuesta TL en *u.a*, *E* es la energía de activación en eV, k_B la constante de Boltzmann en $\frac{eV}{K}$, *T* la temperatura en *K* con velocidad de calentamiento constante $\frac{K}{S}$, T_m la temperatura a la máxima intensidad de termoluminiscencia en *K* e I_m la intensidad máxima. Los cuatro parámetros para este modelo son: I_m , *E*, T_m y *b*.

Este método de deconvolución permite además la fijación de parámetros e introducir constricciones, lo cual permite al usuario reducir las incertidumbres en los cálculos, al igual que Glow-Fit este programa permite una forma interactiva al usuario, dando la posibilidad de ajustar hasta 10 picos TL a una curva de brillo. Como se ha dicho antes estos modelos consideran una distribución de trampas continuas que no necesariamente corresponde con la realidad física, esto ha sido discutido antes en trabajos de termoluminiscencia por diversos autores [30] [22]. Con la finalidad de tener una idea más acertada de las distribuciones de trampas en el BeO : Mg, Si se pueden hacer estudios de estado sólido, los métodos empleados en esta tesis para la caracterización morfológica y estructural se detallan a continuación, cabe mencionar que estos métodos no son suficientes para obtener una descripción completa de la distribución de trampas en el material, pero serán suficientes para los propósitos de este trabajo.

1.7. Caracterización de sólidos cristalinos

El problema de caracterizar morfológicamente a un sólido cristalino nos conduce directamente a la física del estado sólido y la cristalografía [35]. Métodos experimentales como la difracción de rayos X y la microscopia electrónica de barrido y transmisión ofrecen herramientas que ayudan en la difícil tarea de caracterizar físicamente a un material. La distribución de impurezas en materiales TL dopados, puede obtenerse mediante el análisis por espectroscopia de energía dispersa (EDS) y rayos X de fluorescencia [19] [40] [59]. Tales métodos de análisis han sido usados con anterioridad en la determinación de impurezas atómicas en TLD (dosímetros termoluminiscentes) como el LiF : Mg, Ti [9], o en la caracterización de pirofosfato de calcio dopado con ion cerio trivalente, donde se usó la difracción de rayos X y la microscopia SEM para la determinación de la morfología del material así como la concentración de impurezas en el mismo [38].

La EDS hace uso del espectro de rayos X emitido por una muestra sólida cuando sobre esta actúa un haz enfocado de electrones, este espectro consiste en un continuo (bremstrahlung) y un conjunto de líneas discretas características que aparecen a cierto voltaje y que son características de un material dado (XRD). Por escaneo el haz de electrones rastrea una línea selecta de rayos X y muestra su intensidad, de esta forma se produce una imagen de distribuciones. El análisis del espectro de rayos X se divide en dos partes, una cualitativa y la otra cuantitativa, en la primera simplemente se identifican las líneas de rayos X características de un elemento particular y en la segunda se miden las intensidades de dichas líneas espectrales para cada elemento en la muestra, y se comparan con los estándares de calibración de composición conocida.

La SEM (Scanning Electron Microscopy) por sus siglas en inglés, está estrechamente relacionada con las sondas de electrones, y está diseñada principalmente para la producción de imágenes con electrones, además, también puede ser usada para mapeo con electrones y análisis de puntos si un espectrómetro de rayos X es añadido al SEM.

Las intensidades de rayos X son medidas por conteo de fotones y por lo tanto la exactitud obtenida estará limitada por una incertidumbre estadística. Para elementos ligeros la incertidumbre puede ser del orden de más o menos 1%, aunque en general las incertidumbres pueden oscilar hasta un 2%, esto debido a diversos factores, tales como incertidumbres en la composición de los estándares en las correcciones que se necesitan aplicar a los datos en bruto.

En procedimientos de rutina los límites de detección son alrededor de las $1000 \ ppm$ (en peso) pero pueden mejorarse para periodos de conteo largos. La resolución espacial es gobernada por la penetración y dispersión del haz de electrones en la muestra, dado que los electrones penetrantes tienen una masa aproximadamente homogénea la resolución espacial dependerá de la

densidad de la muestra, para un análisis cuantitativo es deseable un tamaño de grano mínimo de varios micrómetros. La mejor resolución espacial es obtenida con muestras ultradelgadas (100 nm) ya que el haz de electrones no se puede extender tanto dentro de la muestra. Tales muestras pueden ser analizadas en un microscopio electrónico de transmisión (TEM) con un espectrómetro de rayos X adjunto, también conocido como un microscopio electrónico analítico (AEM).

1.7.1. Difracción de rayos X (XRD)

Los rayos X fueron nombrados así por su descubridor el físico alemán Roentgen debido a que su naturaleza era desconocida en aquel entonces [21]. Este tipo de radiación se utilizó por primera vez por físicos e ingenieros en el año de 1895, para determinar la estructura interna de objetos opacos. Esto se logró a través de radiografías, las cuales se producen colocando una fuente de rayos X de un lado del objeto y una placa fotográfica del otro, produciendo zonas de alta y baja atenuación al pasar por zonas de mayor y menor densidad respectivamente.

En el año de 1912 se estableció la naturaleza corpuscular y ondulatoria de los rayos X (dualidad), en este año se descubría también el fenómeno de la difracción de rayos X por cristales [35], lo cual inicio una nueva era en el estudio de la estructura fina de la materia, la resolución de esta técnica es del orden de 10^{-8} cm, mientras que la radiografía solo permitía resoluciones del orden de 10^{-1} cm.

los rayos X son radiaciones en el espectro electromagnético de longitudes de onda de 0.1 nm o menores. Los rayos X se producen cuando una partícula cargada es rápidamente desacelerada en el blanco de un tubo de rayos X, tales tubos están compuestos de una fuente de electrones y dos electrodos metálicos, a través de la cual se establece una diferencia de potencial generalmente del orden de unos miles de *Volts* (Figura 1.10). Según la física clásica la desaceleración de una partícula cargada resulta en la emisión de un espectro continuo de radiación electromagnética. El alto voltaje sostenido entre los electrodos provoca que los electrones producidos en el cátodo se aceleren rápidamente al ánodo, donde impactan, produciéndose en este punto de impacto los rayos X, los cuales son radiados en todas direcciones. El electrón de masa $m (m=9.11 \times 10^{-31} Kg)$ y energía cinética inicial, K, interactúa con el núcleo cargado mediante el campo de Coulomb y transfiere impulso al núcleo, la desaceleración del electrón da origen al fotón. Si K' es la energía cinética del electrón después de la interacción, la energía del fotón será entonces

$$h\nu = K - K'. \tag{1.83}$$

de forma alternativa podemos escribir

$$\frac{hc}{\lambda} = K - K' \tag{1.84}$$

donde λ es la longitud de onda del fotón producido. Como se sabe de la



Figura 1.10: Tubo de rayos X. Los electrones son emitidos térmicamente desde el cátodo y se aceleran hacia el ánodo mediante el potencial aplicado V, los rayos X se emiten desde el ánodo en todas direcciones y a distintas longitudes de onda, formando un espectro continuo.

experiencia la mayor parte de la energía se convertirá en calor, solo el 1 % de esta se convertirá en rayos X. Al chocar con el núcleo los electrones pueden perder distintas cantidades de energía cinética, llegando al reposo solamente después de muchos choques. Así los rayos X producidos por muchos electrones son los que constituyen los espectros continuos mostrados en la Figura (1.11) y los electrones producidos tendrán longitudes de onda que varían desde λ_{min} hasta $\lambda \to \infty$, que corresponden a las diferentes perdidas de energía en los choques individuales. En la Figura (1.11) se puede apreciar también λ_{min} que corresponde a la longitud de onda a la cual el electrón pierde toda su energía cinética en una sola colisión, la longitud de onda mínima para el proceso de desaceleración se sigue de K' = 0, lo cual nos da

$$h\nu = K \tag{1.85}$$



Figura 1.11: Espectro de rayos X del Molibdeno, las líneas por debajo de los 20 kV representan bremstrahlung, la línea a 25 kV además presenta líneas características del Mo.

pero la energía cinética de un electrón que se mueve entre dos electrodos con una diferencia de potencia V es K = eV, de aquí se sigue que

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{eV} \tag{1.86}$$

entonces el mínimo de la longitud de onda de corte representa la conversión completa de la energía cinética del electrón en radiación X. A los espectros continuos mostrados en la Figura (1.11) para voltajes inferiores a 20 kV se conocen como bremstrahlung, sin embargo, también se pueden apreciar un conjunto de líneas características conocidas como espectro de líneas de rayos X, tales líneas son propias del blanco utilizado y aparecen a voltajes relativamente altos. El espectro de líneas de rayos X se forma cuando uno o más electrones del haz pasan en la proximidad de un electrón de las subcapas internas del átomo, generalmente por 1s, debido a esta interacción el electrón atómico podría recibir la suficiente energía como para salir de su nivel negativo y escapar del átomo dejando un agujero en la capa interna del átomo, quedando este último en un estado altamente excitado [21], eventualmente, el átomo regresará a su estado base, emitiendo un conjunto de fotones de alta energía, que corresponderá a su espectro de líneas de rayos X (Figura

1.11). La notación comúnmente empleada se muestra en la Tabla (1.2) y es la utilizada en el estudio de las transiciones electrónicas de los átomos. El efecto

n	1	2	3	4	5	6	
Notación espectroscópica	K	L	Μ	Ν	Ο	Р	

Tabla 1.2: Notación espectroscópica para rayos X.

neto de cada paso es que el agujero va saltando a niveles de energía cada vez menos negativos, hasta llegar a la subcapa más externa, donde finalmente es llenado por el electrón originalmente desprendido, o más típicamente con algún electrón del ánodo. Estas transiciones del agujero se pueden representar mediante un diagrama de niveles de energía como el mostrado en la Figura (1.12), como el agujero representa la ausencia de un electrón, las transiciones de estos diagramas serán positivas. En los diagramas mostrados en la Figura



Figura 1.12: Niveles de energía de rayos X (Esquemático), donde se representan las transiciones de la serie K, L y M, para un átomo típico.

(1.12), se nota que todas las transiciones que se producen desde la capa K, producen líneas de la llamada línea K. Cualquier transición de la capa K a la capa L es denotada por K_{α} , de la capa K a la capa M como K_{β} y así sucesivamente, las transiciones de la capa L producen transiciones de la capa L y así sucesivamente.

Como se sabe de la teoría atómica no todas las transiciones son permitidas sino que se deben cumplir ciertas reglas de selección (Ecuaciones 1.87 y 1.88)

$$\Delta l = \pm 1 \tag{1.87}$$

$$\Delta j = 0, \pm 1 \tag{1.88}$$

donde l representa el eigenvalor del momento angular orbital y j representa el eigenvalor del impulso angular total. Para estimar la longitud de onda de una transición electrónica puede ser empleada la descripción burda de la teoría de Hartree

$$E_k \approx 13.6 \frac{Z_n^2}{n^2} \tag{1.89}$$

donde Z_n es el número atómico efectivo para las distintas capas n. Así se pueden determinar las longitudes de onda para cada transición y se encuentra que en general las líneas K_{α} tienen longitudes de onda en la escala de Anstrong, que son las longitudes de onda típicas de las moléculas y distancias entre planos de los distintos sólidos, es así como en la difracción de rayos X se emplean estas líneas para la difracción de rayos X en sólidos. Sin embargo, para estimular una línea K, se deben estimular también todas las demás transiciones posibles entonces para evitar dispersión y ruidos no deseados en los experimentos es necesario el empleo de filtros apropiados para los distintos materiales.

Redes cristalinas

Un cristal puede ser definido como un sólido compuesto de átomos arreglados en forma periódica en un sistema tridimensional [35] [20]. Para abordar el estudio de los cristales a menudo es conveniente ignorar la composición atómica y su arreglo periódico en el espacio. En lugar de ello es conveniente imaginar puntos que tienen una relación fija en el espacio con los átomos del cristal. Un conjunto de puntos de este tipo constituye una red puntual, tales puntos deben cumplir condiciones de simetría, es decir cada punto deberá tener un entorno idéntico al de cualesquiera otro de la red. Una red típica es mostrada en la figura (1.13), Cada punto de esta red cumple con las condiciones de simetría y por lo tanto es posible elegir cualquier punto como origen de un sistema de 3 vectores cristalográficos \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , con ángulos α , β y γ entre ellos, tal arreglo define una celda primitiva como se muestra en la Figura (1.14). Tales vectores también definen todas las posibles traslaciones dentro del arreglo de puntos, que se puede representar por $P\vec{a} + Q\vec{b} + R\vec{c}$, donde $P, Q \neq R$ deben ser números enteros para cumplir con las condiciones de periodicidad. Con base en lo anterior, hay un total de 14 arreglos que



Figura 1.13: Red puntual.

cumplen todas las condiciones de simetría exigidos, y pueden agruparse en 7 sistemas cristalinos [20], como se muestra en la Figura (1.15).



Figura 1.14: Celda unitaria.

El número de puntos de la red por celda esta dado por

$$N = N_i + \frac{N_c}{2} + \frac{N_e}{8} \tag{1.90}$$

donde N_i es el número de puntos en el interior de la celda, N_c es el número de puntos en las caras y N_e es el número de puntos en las esquinas. Tanto las redes de Bravais como los cristales reales deben cumplir con ciertas relaciones de simetría, en total existen 4 operaciones o elementos de simetría: reflexión, rotación, inversión e inversión-rotación, se dice que un sistema es simétrico cuando cumple con todas o algunas de estas reglas. Así la posesión de un conjunto mínimo de elementos de simetría es una propiedad fundamental de cada sistema cristalino, y un sistema se distingue de otro tanto por sus elementos de simetría como por los valores de sus longitudes axiales y ángulos.



Figura 1.15: Redes de Bravais.

Para denotar la dirección de cualquier línea en una red, se pueden utilizar los ejes cristalográficos, y dar las coordenadas de cualquier punto que pase por el origen de la celda unitaria, generalmente denotadas por *uvw*. Como el cristal es infinito y la celda unitaria puede elegirse al azar, cualquier línea paralela a la línea dada, estará también denotada por los índices [*uvw*]. La orientación de algún plano en una red puede también ser representada simbólicamente de acuerdo con un sistema creado por el cristalografo ingles Miller y comúnmente llamado índices de Miller, este sistema se define como recíprocos de las intersecciones fraccionarias que hace el plano con los ejes cristalográficos [20].

Ley de Bragg

Los rayos X son ondas electromagnéticas en el intervalo de 0.01 a 1 nm, y como se describió anteriormente los cristales están formados por un conjunto de planos ordenados que constituyen un red periódica, estos planos en las redes tienen una separación del orden de 0.2 a 0.6 nm, y así un mate-

rial cristalino puede ser considerado como una rejilla natural de difracción de rayos X. El primero en realizar experimentos de difracción por rayos X fue el físico alemán von Laue en 1912, quien utilizó sulfato de cobre para obtener los patrones de difracción de los rayos X, sin embargo, fue el equipo conformado por W.H. Bragg y W.L. Bragg el que llegó a la famosa condición de difracción conocida como ley de Bragg. La ley de Bragg da la condición para la interferencia constructiva de rayos X que inciden sobre un plano. En la figura (1.16) se muestra esquemáticamenta la ley de Bragg, el espaciado entre los planos es denotado por d, así cuando un haz de rayos X inciden a un ángulo θ y atraviesa dos planos, los rayos X reflejados de ambos planos tienen que viajar una distancia extra, que es dada por $2dsen(\theta)$. Para interferencia constructiva esta distancia tiene que ser igual a un múltiplo entero de la longitud de onda $n\lambda$, dando así

$$2dsen(\theta) = n\lambda \tag{1.91}$$



Figura 1.16: Ley de Bragg.

Esta es la conocida ley de Bragg que puede ser empleada para determinar estructuras cristalinas y para análisis químico de compuestos, a través de los siguientes métodos:

- 1. Utilizando un haz de rayos X monocromático, con longitud de onda λ conocida, y medir el ángulo de difracción (θ), y usar este para encontrar la distancia interplanar (d). Este es el llamado análisis estructural.
- 2. Alternativamente puede usarse una red con espaciamiento conocido (d), medir (θ) y de ahí calcular (λ) , esta es la llamada espectrometría de rayos X y es una forma de hacer análisis químicos con rayos X.

Un diagrama esquemático de un espectrómetro de rayos X es mostrado en la figura (1.17) en donde a partir de un tubo de rayos X (T) se emite un espectro

continuo de rayos X superpuesto con líneas características provenientes del blanco, los cuales posteriormente impactan sobre el blanco (C) a un ángulo (θ), de donde son difractados a diferentes ángulos, y son detectados por el detector (D) y así de esta forma un espectro de (I) en función de (λ) puede ser obtenido. Este análisis resulta útil para la calibración de nuevos equipos de rayos X y análisis químico. Para realizar un análisis estructural es necesario colocar filtros apropiados que permitan el paso de rayos X de una sola longitud de onda, para de esta forma poder obtener el espaciamiento entre los planos (d) a partir del ángulo de difracción. Basado en las posibles formas en las cuales se puede variar (λ) o (θ) existen 3 métodos de análisis de difracción por rayos X, mostrados en la tabla (1.3).



Figura 1.17: Diagrama esquemático de un espectrómetro de rayos X (tomado de Elements of X-Ray Diffraction de Cullity [20]).

Método	λ	θ
Método de Laue	variable	fijo
Cristal rotatorio	fijo	variable
Polvos	fijo	variable

Tabla 1.3: Métodos de difracción de rayos X.

1.7.2. Microscopia electrónica de barrido

Alrededor del año 1920 se descubrió que los electrones, al ser acelerados en un ambiente al vacío, se comportan como luz normal. La longitud de onda para los electrones es más pequeña y por lo tanto su resolución es mayor, esto dio la idea de utilizar a los electrones como fuente de luz en un nuevo tipo de microscopio. En este tipo de microscopios se emplean campos magnéticos como análogos de las lentes en la microscopia óptica. Fue hasta el año de 1931 que el físico Ernst Ruska combinó todas estas características y construyó el primer microscopio electrónico de transmisión (TEM), esto debido a que los electrones se transmitían a través de la muestra observada.

Los electrones en el microscopio electrónico se producen por efecto termoiónico en un filamento o cátodo, y son acelerados a través de un potencial (E) en un sistema sometido al vacío. Una vez que los electrones son dirigidos a la muestra o espécimen, estos pueden interaccionar de distintas formas, lo cual da origen a las distintas técnicas de microscopia electrónica.

La microscopia electrónica de barrido (SEM por sus siglas en inglés), emplea a los electrones secundarios de baja energía para producir una imagen. Para facilitar la emisión de electrones se emplean ciertos materiales conductores como el oro o carbón para recubrir la muestra. El haz de electrones puede ser concentrado en un espacio muy pequeño ($\approx 1 nm$) que puede barrer la superficie de la muestra al ser deflectado por las bobinas adecuadas. Los electrones secundarios se detectan por encima del espécimen y la imagen muestra la intensidad de los electrones secundarios emitidos por las diferentes partes de la muestra. El esquema de un microscopio SEM se muestra en la figura (1.18). La microscopia SEM es útil en la detección de defectos puntuales tipo Frenkel y Schottky [35], el estudio de estos defectos lineales es muy importante para entender la respuesta de los materiales a esfuerzos mecánicos principalmente en el caso de metales y aleaciones. Así como para entender los procesos de emisión de luminiscencia en los distintos procesos conocidos (Termoluminiscencia, Fotoluminiscencia, Radioluminiscencia, etc.).

Los métodos descritos a lo largo de este capítulo se emplearon en el estudio de la luminiscencia térmicamente estimulada de BeO: Mg, Si, los detalles de los experimentos se detallan en el capítulo 2 y los resultados se muestran en el capítulo 3.



Figura 1.18: Esquema de SEM. (Figura tomada de: D.A. Skoog et al. Principios de Análisis Instrumental. Mc Graw Hill, Madrid (2002)).

Capítulo 2

Desarrollo experimental

2.1. Planteamiento del problema

Investigaciones previas realizadas en el BeO por diversos grupos de investigación [2] [60] [7] [59] [52] [4] muestran discrepancias en los valores reportados para los parámetros TL, esto introduce un problema para las posibles aplicaciones de este material en el monitoreo de radiación ionizante en distintas aplicaciones además estudios realizados por Bhatt et al., en 1981 [36] han mostrado que este material también presenta ciertas dificultades en la respuesta TL cuando se utiliza la curva de brillo completa del BeO: Mg, Si. Sin embargo, como fue señalado por G. Scarpa et al., en 1970 [52], [53], y Rao [60] este material presenta propiedades muy atractivas para la dosimetría TL, tales como; su alta conductividad térmica, alta sensibilidad a la radiación y su número atómico efectivo $(Z_{efec} = 7.1)$ casi igual al del tejido humano. El estudio del BeO fue abandonado por muchas décadas debido a que en el pasado era muy difícil obtener muestras sólidas, y debido a su alta toxicidad esto suponía una limitante [58] [60]. En la actualidad es posible obtener este material en forma de discos solidos a través de Brush Beryllium Co. comúnmente llamados Ceramic Be0 Thermalox 995, esto gracias a su alta demanda como material refractario y aislante en la industria electrónica.

2.2. Objetivo

El objetivo de este trabajo de investigación es el estudio de la luminiscencia térmicamente estimulada de BeO: Mg, Si mediante el método de la deconvolución empleando una aproximación a curvas relativamente sencillas a través de modelos básicos de distribución continua de trampa que involucra la determinación y estudio de la dependencia en dosis de los distintos parámetros TL de los picos que componen la curva de brillo de este material, así como también el estudio de la respuesta TL en función de la dosis de irradiación para cada componente de la curva de brillo mediante el método de la deconvolución. Se pretende también investigar las propiedades fotoluminiscentes y la caracterización morfológica y estructural de dicho material.

2.3. Método experimental

Los experimentos en termoluminiscencia se dividen en dos partes; las irradiaciones y las lecturas (ver apéndice C). Para este trabajo las irradiaciones se llevaron a cabo en el Instituto de Ciencias Nucleares (ICN) de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), donde los dosímetros fueron colocados en el isócentro de un irradiador modelo Gammacell-200 con fuente de cobalto-60, que emite gammas de 1.17 y 1.33 MeV (1.25 MeV en promedio) de energía y que genera una tasa de irradiación de 0.13 $\frac{Gy}{min}$. Como se sabe el cobalto-60 decae a un estado excitado del níquel-60 a través de la emisión de una partícula β de 0.31 MeV, posteriormente el estado excitado del níquel emite dos rayos γ de 1.17 y 1.33 MeV para alcanzar su estado más estable.

Las pastillas se irradiaron en dos lotes, ya que se pretendían observar las diferencias que existen entre las muestras expuestas a la luz visible y a un ángulo aleatorio, con aquellas que se expusieron a un solo ángulo de irradiación (ángulo rasante) y protegidas del contacto con la luz, esto debido al desvanecimiento antes reportado por autores como Tochilin et al., en 1969 [59] y Rao et al., en 2010 [60], esto ha ocasionado hasta la fecha limitaciones en las posibles aplicaciones como dosímetro TL [49] [60], sin embargo representa una gran ventaja en la aplicación como dosímetro OSL, Bulur [13] en un intervalo corto de dosis. En el primer lote las pastillas de BeO : Mg, Si, se colocaron distribuidos de forma tal que la radiación incidiera sobre ellos a distintos ángulos, se distribuyeron en papel aluminio y se colocaron dentro de la fuente Gammacell-200, colocando 5 pastillas por dosis de 0.13, 0.65, 1.3, 2.6, 5.2, 10.4, 15.6, 19.5 y 23.4 Gy. El segundo lote fue irradiado de tal forma que el ángulo de incidencia de los dosímetros no variara de un dosímetro a otro, es decir, los dosímetros se irradiaron apilados dentro de una cápsula que

impedía que el dosímetro se moviera causando así variaciones en el ángulo de incidencia, los dosímetros se etiquetaron y en cada cápsula se introdujeron 6 dosímetros que servirían para realizar lecturas a dos tasas de calentamiento después de esto se irradiaron desde 1.3 hasta 23.4 Gy, separados en dosis de 1.3, 2.6, 5.2, 10.4, 15.6, 19.5 y a 23.4 Gy. Posteriormente a la irradiación, las pastillas se leyeron en un equipo HARSHAWTLD-3500, usando una tasa de calentamiento de $5\frac{K}{S}$ para el primer lote mientras que para el segundo lote se emplearon dos tasas de calentamiento de 5 y $7\frac{K}{S}$ en todos los casos se empleó un precalentamiento de 303 K, durante 5 s, y la fase de lectura se realizó desde 303 a 633 K. Posterior a la lectura se realizaron graficas de repetibilidad para cada conjunto de dosímetros (5 y 6 dosímetros por dosis en el caso del primer y segundo lote), y se seleccionaron los 3 cuyas curvas de brillo tuvieran menos dispersión como se muestra en el apéndice A y B para las curvas del primer y segundo lote respectivamente.

Los determinación de los parámetros TL y las curvas de respuesta TL en función de la dosis para cada pico se realizaron usando 3 métodos de análisis, los cuales son; deconvolución, usando una fuente abierta de Package 'tgcd' en R [44], (que utiliza la expresión semi-empírica de orden general, o la expresión semi-analítica que deriva del modelo de un nivel de trampa o centro de recombinación), deconvolución en Glow-Fit [45], (que utiliza una cinética de primer orden para ajustar curvas TL) y los 3 métodos geométricos de Chen [14], estos métodos emplean el modelo más simple basado en una distribución uniforme de trampas, se debe tener en cuenta que existen otros modelos más sofisticados para entender los mecanismos del fenomeno TL [39] [34] [7]. Además se analizó la estructura cristalina mediante difracción de rayos X, para tal efecto se empleó un tubo de difracción de cobre (Cu-Ka) modelo D8-Advance de Bruker, empleando la técnica de Bragg-Brentano para polvos, este estudio se realizó desde $2\theta = 5^{\circ}$ hasta $2\theta = 70^{\circ}$ en pasos de 0.020415°, se comparó con un patron de difracción de muestras casi puras obtenida del centro internacional para datos de difracción. También se determinó el contenido de impurezas presentes en el BeO: Mg, Si por EDS, la cual se realizó en un microscopio electrónico de barrido de la marca Jeol USA, Inc., donde se llevó a cabo un análisis elemental con un voltaje de aceleración de 20 kV, las muestras se recubrieron con grafito para facilitar la determinación de las principales impurezas presentes en las muestras de BeO. Además, se realizaron pruebas de fotoluminiscencia y se obtuvieron los espectros de emisión y excitación para las muestras irradiadas (23.4 Gy) y sin irradiar. El espectro de emisión se obtuvo a una longitud de onda $\lambda_{exc} = 330 \ nm$ mientras que el espectro de excitación se obtuvo a una longitud de onda $\lambda_0 = 400 \ nm$ para ambas muestras irradiadas y sin irradiar.

Es importante mencionar que durante el desarrollo experimental las muestras fueron manejadas con el mayor cuidado posible de tal forma que se evitara el contacto directo con ellas ya que como es sabido el BeO es un material altamente toxico, la inhalación de este material puede traer consecuencias como la enfermedad crónica por berilio y otro tipo de enfermedades que pueden terminar por ocasionar cáncer pulmonar entre otras enfermedades [58], [60]. La manipulación del óxido de berilio se debe realizar empleando guantes estériles y pinzas, se debe etiquetar y resguardar en un sitio adecuado para evitar riesgos a personas no capacitadas en el uso de este material [58]. A pesar de que algunos gases producidos por el BeO al ser incinerado pueden llegar a ocasionar riesgos a la salud, el calentamiento de este material es seguro siempre y cuando se caliente por debajo de los 1000 °C y se trabaje en una atmosfera relativamente libre de humedad [59] [1] [12].

Capítulo 3

Resultados y discusión

El estudio de las propiedades morfológicas y ópticas del *BeO* tienen una larga historia, fue Sir William Crookes el primero en observar una maravillosa luz azul proveniente del *BeO* bajo la acción de rayos catódicos [18]. Sin embargo no fue sino hasta 1956 que se realizaron estudios espectroscópicos de luminiscencia ópticamente estimulada, los cuales fueron realizados por Albrecht y Mandeville en 1956 [1], quien encontró que se tiene un máximo de emisión para una longitud de onda de 410 nm de estimulación, tal máximo de emisión puede estar asociado a trampas doblemente ocupadas que son análogas a los centros F en los haluros alcalinos. Autores como G. Scarpa [52] [53] y Tochilin [59] señalaron que el estudio de las posibles aplicaciones del *BeO* como un material TL fue lenta dibido a su alta toxicidad en forma de polvo. Los principales riesgos del *BeO* son a través de la inhalación y subsecuente deposición pulmonar, lo cual puede llegar a generar la enfermedad por berilio o beriliosis. Existen dos tipos de beriliosis: la beriliosis aguda y la crónica que difieren en la duración de la enfermedad. Aunque la inhalación de polvos y gases provenientes de la incineración del *BeO* puede llegar a causar riesgos crónicos a la salud, el calentamiento de este material por debajo de los 1000 °C es inofensivo siempre y cuando se trabaje en una atmosfera con humedad relativamente baja. El manejo de *BeO* en forma solida es seguro siempre y cuando las partes se limpien completamente de polvo con las debidas precauciones y se evite cuidadosamente cualquier acción de abrasión, además como consecuencia de la no solubilidad en agua el contacto con este material generalmente es inofensivo [1]. En las recientes décadas el desarrollo de materiales de BeO con una alta calidad óptica ha estimulado futuras investigaciones en luminiscencia y excitaciones electrónicas, los resultados de tales investigaciones se contrastan con los obtenidos en este trabajo de tesis en las siguientes secciones (3.1-3.5).

3.1. Difracción por rayos X

La difracción por rayos X para muestras sin irradiar mostró que este material presenta una estructura cristalina hexagonal (wurtzita hexagonal) con parámetros de red de a=2.69790 y c=4.37720, el patrón de difracción de rayos X para el BeO : Mg, Si se muestra en la figura (3.1), en tal imagen también se muestra un patrón de difracción para muestras de BeO que fueron tomadas del centro internacional para datos de difracción, estos datos están acorde con otras investigaciones realizadas en aerosoles de BeO [58] y en estudios de aleaciones de BeO - ZnO que muestran un patrón de difracción idéntico que el mostrado en la figura (3.1) [37].



Figura 3.1: Patrón de difracción de rayos X en muestras sin irradiar de BeO: Mg, Si. b) Patrón de difracción en muestras de BeO puras [Tomadas del centro internacional para datos de difracción para una fase de Wurtzita hexagonal].

3.2. Microscopia electrónica de barrido

El análisis por microscopia electrónica de barrido (EDS) mostro el contenido de trazas de magnesio y silicio con un porcentaje en masa de 0.11 y 0.21% respectivamente. Muy probablemente estas impurezas son las causantes de los diferentes niveles de trampa y centros luminiscentes en el BeO : Mg, Si, las cuales podrían ser responsables de la emisión de luminiscencia en el material, aunque para confirmar tales resultados es necesario realizar estudios de luminiscencia más completos [23] [60] [1]. Los resultados obtenidos en este trabajo se muestran en la tabla (3.1).

	(04)		- () ()
Elemento	P. Peso (%)	P. Peso (sigma%)	P. atómico (%)
C K	2.48	0.14	3.28
O K	97.20	0.15	96.53
Mg K	0.11	0.04	0.07
Al K	0.00	0.00	0.00
Si K	0.21	0.03	0.01
Ca K	0.00	0.00	0.00
Fe K	0.00	0.00	0.00
Total	100.00		

Tabla 3.1: Resultados de la microscopia SEM para el BeO: Mg, Si, se confirma el contenido de impurezas de Si y Mg.

3.3. Fotoluminiscencia

El espectro de excitación y emisión para las pastillas de BeO : Mg, Sisin irradiar se muestra en la figura (3.3a) y para las muestras irradiadas en la figura (3.3b). De acuerdo con lo reportado por Tochilin et al., 1969 el BeO presenta un máximo de estimulación en 410 nm [59], por tal motivo el espectro de excitación se obtuvo a una $\lambda_0 = 400 \ nm$ que cae dentro del azul en el espectro visible, lo cual corresponde con las primeras observaciones realizadas por Sir William Crookes [18], mientras que el espectro de emisión se obtuvo a una $\lambda_{exc} = 330 \ nm$ (para muestras irradiadas y sin irradiar) que corresponde a uno de los máximos obtenidos en el espectro de excitación, tal banda fue reportada antes por diversos autores [59] [12] [57] quienes han sugerido que la mejor estimulación se obtiene para una $\lambda_{exc} = 325 \ nm$. Los estudios realizados mediante deconvolución muestran que el espectro de emisión para las pastillas sin irradiar (figura 3.4a) se componen de 4 bandas centradas en 404, 430, 468 y 545 nm estas bandas están presentes también en las pastillas irradiadas, aunque en estas últimas (figura 3.4b) se presenta una banda de emisión extra centrada en 416 nm. La banda que se presenta a 404 nm ha sido reportada antes por Tochilin [59] y Bulur et al., 1998 [12], este último también reporto una banda centrada a 435 nm, la cual fue posteriormente utilizada para estudios de posibles aplicaciones a la dosimetría OSL por Sommer et al., 2007 [56], además Jahn et al., 2013 aplico exitosamente la banda cercana a los 468 nm para estudios de dosimetría OSL. Para el espectro de excitación de las pastillas sin irradiar (Figura 3.5a) la deconvolución mostro que este se compone de dos bandas centradas en 307 y 331 nm, para muestras irradiadas (Figura 3.5b) se tienen 3 componentes centradas en 297, 334 y 317 nm, la banda centrada a aproximadamente 330 nm corresponde a la región del ultravioleta cercano al visible y corresponde a la banda de estimulación reportada antes por Bulur et al., 1998 y Tochilin [12] [59]. La banda centrada en aproximadamente 545 nm no ha sido reportada, esto tal vez se deba a que la mayoría de los autores citados han trabajado en una región por debajo de los 500 nm. La principal observación de este trabajo es el desdoblamiento de las bandas centradas a 330 y 400 nm para el espectro de excitación y emisión por causa de la radiación. Se deben realizar estudios mas completos para poder atribuir estas bandas a las impurezas presentes en el BeO: Mq, Si.

La deconvolución se realizó por empleo de OriginPro9.0, para tal efecto origin ajusta un conjunto de curvas gaussianas a una colección de datos experimentales de tal forma que se asegure la condición de minimización. Los resultados de la deconvolución para el espectro de emisión en muestras sin irradiar se dan en la tabla (3.2) y para muestras irradiadas en la tabla (3.3). Los resultados de los espectros de excitación para muestras irradias y sin irradiar se dan en la tabla (3.4) y (3.5) respectivamente. Se notan cambios en el área y altura de los picos entre muestras irradiadas y sin irradiar, además se nota la formación de una nueva banda por causa de la radiación, sin embargo, los demás parámetros permanecen casi iguales. En la figura (3.5) se hace una comparación entre los espectros de emisión y excitación de muestras irradiadas y sin irradiar, se aprecia la creación de una nueva banda y la pérdida de señal al irradiar la muestra.


Figura 3.2: a) Espectro de excitación (línea roja) y de emisión (línea verde) para muestras sin irradiar. b) Espectro de excitación (línea punteada azul) y de emisión (línea roja) para muestras irradiadas, se nota un pico extra en ambos espectros comparados con aquellos sin irradiar).



Figura 3.3: Resultados de deconvolución para muestras sin irradiar. a) Espectro de emisión. b) Espectro de excitación.

Se puede apreciar la creación de una nueva banda de emisión, que puede ser originada por la creación de nuevos centros de defecto, o por el desdoblamiento del nivel presente a 400 nm para el espectro de emisión o 330 nm para el espectro de excitación, esto es inducido por la radiación con rayos gamma de 1.25 Mev y con una intensidad de 23.4 Gy de irradiación. Esto podría ser detectado por técnicas de microscopia SEM o resonancia paramagnética



Figura 3.4: Resultados de deconvolución para muestras irradiadas. a) Espectro de emisión. b) Espectro de excitación.

Pico	Área	FWHM	Altura máxima	λ_0	P. área (%)
1	116433	27	4017	404	74
2	31073	22	1328	431	20
3	5993	13	422	468	4
4	3769	13	267	545	2

Tabla 3.2: Resultados de deconvolución para el espectro de emisión en muestras sin irradiar.

Pico	Área	FWHM	Altura máxima	λ_0	P. área (%)
1	40309	21	1834	399	37
2	34520	17	1871	417	31
3	20133	18	1060	433	18
4	5859	21	262	471	5
5	9273	25	350	549	8

Tabla 3.3: Resultados de deconvolución para el espectro de emisión en muestras iradiadas.

de espín o resonancia de espín electrónico, tales experimentos se dejan para trabajos futuros, ya que la confirmación de esta observación esta fuera del alcance de los objetivos de este trabajo de tesis.

Pico	Área	FWHM	Altura máxima	λ_{exc}	P. área (%)
1	54316	20	2534	331	69
2	24555	28	822	307	31

Tabla 3.4: Resultados de deconvolución para el espectro de excitación en muestras sin irradiar.

Pico	Área	FWHM	Altura máxima	λ_{exc}	P. área (%)
1	5352	12	428	297	10
2	36857	23	1481	316	66
3	13843	13	963	334	25

Tabla 3.5: Resultados de deconvolución para el espectro de excitación en muestras irradiadas.



Figura 3.5: Comparación entre los espectros de las muestras radiadas (líneas negras) y sin irradiar (líneas azules). a) Espectros de emisión. b) Espectros de excitación.

3.4. Parámetros termoluminiscentes

Las curvas termoluminiscentes (TL) obtenidas presentan dos máximos centrados en aproximadamente 471 y 597 K, esto es consistente con los valores antes reportados por Rao et al., 2010 quien encontró dos máximos de emisión TL centrados en 481 y 590 K [60] y otros autores como Algarve y Caldas en 2018 [2] quienes encontraron valores similares de la temperatura máxima. Estudios de ESR (Electron Spin Resonance por sus siglas en inglés) realizados por Rao et al., 2010 [60] mostraron dos centros de defecto ($O^$ y Al^+) los cuales se atribuyen el pico TL centrado a 471 K, sin embargo Albrecht y Mandeville en 1956 [1] discutieron que tal máximo de emisión TL puede estar relacionado con la banda de emisión centrada a 410 nm de la fotoluminiscencia y que ambas pueden estar asociadas a trampas doblemente ocupadas que son análogas a los centros F en los haluros alcalinos. Tal discusión nos lleva a pensar que se requieren estudios más profundos de TL para poder atribuir estos picos de intensidad TL a trampas o centros de defecto en la red cristalina del BeO : Mg, Si. En la figura 3.6 se muestran dos curvas de



Figura 3.6: Curvas TL del BeO: Mg, Si, la curva BeO39, se obtuvo a una tasa de calentamiento lineal de $7\frac{K}{s}$ (línea verde), y exhibió dos picos de máxima intensidad a temperaturas de $(485\pm1)K$ y $(609\pm5)K$, mientas que la curva BeO40 se obtuvo a una tasa lineal de calentamiento de $5\frac{K}{s}$ (línea roja), exhibiendo dos picos de máxima intensidad a $(471\pm0)K$ y $(597\pm2)K$.

brillo obtenidas para una dosis de 1.3 Gy, la curva roja se obtuvo a una tasa de calentamiento de $5\frac{K}{s}$ y la verde a una de $7\frac{K}{s}$. En tal grafica se ve que se da un corrimiento en la temperatura para ambas tasas de calentamiento, esto podría ser atribuido a el cambio en la tasa de calentamiento [39], o a una posible distribución de trampas tipo exponencial [23] o a la posible existencia de una cinética de orden intermedio que como ha sido discutido por E. Cruz et al., 2006 ocasiona un corrimiento en la temperatura máxima por causa de un incremento de portadores de carga atrapados en las respectivas trampas [22]. En el futuro será necesario realizar estudios más sofisticados que permitan determinar las posibles distribuciones de trampas en el BeO : Mg, Si para que se puedan modelar estudios de deconvolución más precisos que permitan determinarar con menor incertidumbre los parámetros de BeO : Mg, Si [23] [31] [26]. En la sección 3.4.1 se discuten los resultados para los parámetros TL obtenidos por el método de Chen, en la sección 3.4.2 se discuten los resultados obtenidos mediante deconvolución en Glow-Fit [45] y en la sección 3.4.3 se discuten los resultados obtenidos mediante la deconvolución en "tgcd en R".

3.4.1. Método de Chen

El método de Chen es sin duda la forma más directa de calcular parámetros TL, ya que a través de las temperaturas máximas (T_M) de cada pico, es posible caracterizar las diversas componentes que integran a una curva de brillo TL, esto sin duda es muy útil en los casos en los que las curvas presentan picos poco superpuestos. Sin embargo, debe tenerse presente que este método es solo una aproximación a la realidad física, y que los métodos que solo se basan en el valor del pico máximo presentan muchas ambigüedades [34]. En el caso del BeO: Mg, Si es posible el empleo de este método de forma simple debido a que los máximos en intensidades (I_M) se presentan a temperaturas (T_M) muy alejadas ($\approx 100 \ K$) entre sí. Para las curvas del primer y segundo lote se encontraron dos máximos de intensidad TL, las temperaturas máximas para las distintas dosis en el primer lote se muestran en la tabla (3.6), y para el segundo lote en la tabla (3.7). Al observar la figura (3.6) se puede observar que la temperatura sufre un corrimiento en ambos picos al variar la tasa de calentamiento, esto podría deberse a la variación de la tasa de calentamiento y/o a la variación de la temperatura máxima en función de la dosis de irradiación [22]. La variación de la temperatura máxima en función de la tasa de calentamiento ha sido antes señala por Rao et al., 2010 [60] quien encontró que al variar la tasa de calentamiento de 1 a 4 $\frac{K}{s}$ la temperatura del primer pico se desplaza por casi 100 K para el primer pico y casi 40 K para el segundo, que como puede verse está acorde con lo reportado en este trabajo. La variación de la temperatura máxima también podría deberse a la variación en el contenido de impurezas al pasar de una muestra a otra, lo cual podría provocar un cambio en el número de trampas disponibles, lo que causaría una variación de la sensibilidad del material a la radiación [25], lo que finalmente podría provocar un corrimiento en la temperatura máxima [22].

El método de Chen fue aplicado para el cálculo del factor de simetría, orden de cinética, energía de activación y el factor de frecuencia, los resultados de estos cálculos emplean la metodología expuesta en la sección (1.5), donde

Dosis(Gy)	$T_1(K)$	$T_2(\mathbf{K})$
1.3	465 ± 3	591 ± 2
2.6	471 ± 3	591 ± 4
5.2	475 ± 2	589 ± 1
10.4	476 ± 4	585 ± 3

Tabla 3.6: Resultados de las temperaturas máximas para el primer lote ($\beta = 5\frac{K}{S}$) en un intervalo de dosis de 1.3 a 10.4 *Gy*, las cuales fueron obtenidas directamente del experimento.

	$\beta =$	$5\frac{K}{S}$	$\beta =$	$7\frac{K}{S}$
Dosis(Gy)	$T_1(K)$	$T_2(K)$	$T_1(K)$	$T_2(K)$
1.3	472 ± 1	597 ± 2	475 ± 1	604 ± 4
2.6	476 ± 2	595 ± 1	482 ± 3	607 ± 2
5.2	474 ± 3	587 ± 4	$480{\pm}4$	596 ± 3
10.4	479 ± 2	587 ± 3	488 ± 2	595 ± 2

Tabla 3.7: Resultados de las temperaturas máximas encontradas en el primer lote para ambas tasas de calentamiento, donde se ve que para $\beta_2 > \beta_1$, $T_2 > T_1$, es decir a mayor tasa de calentamiento mayor será la temperatura máxima del pico de mayor intensidad.

se describe el procedimiento sugerido por Chen, los resultados de los cálculos se muestran en a continuación, debe señalarse que estos estudios consideran el modelo mas simple de una distribución de trampas homogeneas de un mismo tipo y que además la incertidumbre en la determinación del factor de frecuencia es alta debido a que este método utiliza los resultados de la evaluación de la energía para calcular dicho parametro (S) lo que ocasiona un incremento en la incertidumbre (ver sección 1.5) [34].

Factor de simetría y orden de cinética

Para la determinación del factor de simetría por el método de Chen se empleó la ecuación (1.60) y la figura (1.9) sirvió como referencia en la determinación del orden de cinética. Las operaciones se realizaron en una hoja de cálculo de Microsoft Excel, donde se obtuvieron los parámetros presentes en la expresión (1.60), es decir T_M , T_1 y T_2 para ambos picos de las curvas de brillo obtenidas en un intervalo de dosis de 1.3 a 23.4 Gy esto para ambos lotes estudiados, con esto se calculó el factor de simetría para cada lote a cada una de las tasas de calentamiento empleadas, con el factor de simetría y la figura (1.9) se determinó el orden de cinética, los resultados para el primer lote a una tasa de calentamiento de $5\frac{K}{S}$ se muestran en la tabla (3.8).

	Pico 1		Pico 2	
Dosis(Gy)	μ_g	b	μ_g	b
1.3	$0.43 {\pm} 0.03$	1.1	$0.41 {\pm} 0.01$	1.1
2.6	$0.39 {\pm} 0.02$	0.8	$0.41 {\pm} 0.02$	1.1
5.2	$0.39 {\pm} 0.01$	1.1	$0.44 {\pm} 0.01$	1.1
10.4	$0.41 {\pm} 0.01$	1.1	$0.45 {\pm} 0.03$	1.1
15.6	$0.42 {\pm} 0.01$	1.0	$0.46 {\pm} 0.01$	1.1
23.4	$0.42 {\pm} 0.01$	1.0	$0.48 {\pm} 0.01$	1.5

Tabla 3.8: Resultados del factor de simetría (μ_g) y orden de cinética (b) obtenidos por el método de Chen, para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

Se puede apreciar que los valores del primer pico oscilan entre 1.0 y 1.1, mientras que para el segundo pico la cinética es de 1.1 en casi todo el intervalo de dosis. Los resultados del segundo lote, para el factor de simetría y orden de cinética se calcularon en el mismo intervalo de dosis (1.3 a 23.4 Gy), los resultados no parecen sufrir cambios bruscos en cuanto a los valores de cinética de un lote a otro como es de esperarse. Los resultados para el factor de simetría y orden de cinética en el segundo lote para una $\beta = 5\frac{K}{S}$ se muestran en la tabla (3.9), y para una $\beta = 7\frac{K}{S}$ se muestran en la tabla (3.10).

Se aprecia que, para ambos lotes y ambas tasas de calentamiento, el dosímetro exhibe cierta consistencia en cuanto al factor de simetría y por ende el orden de cinética parece mostrar cierta estabilidad en todo el intervalo de dosis estudiado [1.3 Gy a 23.4 Gy]. Para el primer pico se obtiene una cinética que se puede considerar entre valores de 1.0 y 1.1, mientras que para el segundo pico se tiene una cinética de aproximadamente 1.1 que presenta una mayor estabilidad para ambos lotes y ambas tasas de calentamiento. Estos valores de cinética servirán para justificar el empleo de Glow-Fit. Los valores de cinética que son reportados en este trabajo son muy consistentes con aquellos obtenidos por Azorín et al., en 2016 [7] para el primer pico mediante el método del decaimiento isotérmico, tal método es independiente del tipo de distribución de trampa, otro método que podría utilizarse para

	Pico 1		Pico 2	
Dosis(Gy)	μ_g	b	μ_g	b
1.3	$0.42 {\pm} 0.01$	1.0	$0.40 {\pm} 0.01$	1.1
2.6	$0.40 {\pm} 0.02$	1.1	$0.41 {\pm} 0.03$	1.1
5.2	$0.41 {\pm} 0.01$	1.1	$0.43 {\pm} 0.01$	1.1
10.4	$0.43 {\pm} 0.02$	1.1	$0.45 {\pm} 0.01$	1.1
15.5	$0.42 {\pm} 0.01$	1.0	$0.46 {\pm} 0.02$	1.1
19.5	$0.43 {\pm} 0.01$	1.1	$0.47 {\pm} 0.01$	1.5
23.4	$0.42 {\pm} 0.02$	1.0	$0.43 {\pm} 0.01$	1.1

Tabla 3.9: Resultados del factor de simetría para el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$, donde no se aprecian variaciones con los valores reportados en la tabla (3.8), el primer pico muestra una cinética de 1.0 a 1.1, mientras que en el segundo pico la cinética es de 1.1 en todo el intervalo de dosis.

	Pico 1		Pico 2	
Dosis(Gy)	μ_g	b	μ_g	b
1.3	$0.41 {\pm} 0.02$	1.1	$0.40 {\pm} 0.01$	1.1
2.6	$0.43 {\pm} 0.02$	1.1	$0.41 {\pm} 0.03$	1.1
5.2	$0.42 {\pm} 0.01$	1.0	$0.42 {\pm} 0.03$	1.0
10.4	$0.42 {\pm} 0.01$	1.0	$0.45 {\pm} 0.02$	1.1
15.6	$0.42 {\pm} 0.01$	1.0	$0.46 {\pm} 0.02$	1.1
19.5	$0.43 {\pm} 0.01$	1.1	$0.46 {\pm} 0.03$	1.1
23.4	$0.43 {\pm} 0.01$	1.1	$0.44 {\pm} 0.02$	1.1

Tabla 3.10: Resultados de los factores de simetría para el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$, donde se aprecia nuevamente que el primer pico tiene una cinética de 1.0 a 1.1, y el segundo una cinética de 1.1 en todo el intervalo de dosis.

verificar este resultado podría ser el método de la subida inicial (IR por sus siglas en inglés) que como ha sido demostrado por E. Cruz et al., 2006 es independiente de la distribución de trampas. Dicho método fue empleado por Bacci et al., 1989 para determinar los parámetros TL en este material, tal estudio demostró que el orden de cinética para el primer pico esta entre 1.5 a 2 y para el segundo pico entre 1 y 1.01 [10]. Estudios recientes realizados por Algarve y Caldas et al 2018 [7], por distintos métodos de deconvolución y por el método del área han sugerido que el primer pico puede presentar una cinética de orden intermedio y que el segundo pico podría tener una cinética de primer oren tal y como se ha encontró en este trabajo de tesis.

Determinación de la energía de activación

CAPÍTULO 3

Los valores de la energía de activación para cada pico se obtuvieron mediante los 3 métodos de Chen, en un intervalo de dosis que iba desde 1.3 a 10.4 Gy, esto sólo con la finalidad de evitar confusiones a la hora de analizar resultados. Las energías se obtuvieron utilizando las ecuaciones (1.61-1.67), las temperaturas (T_1 , T_m y T_2) se midieron directamente del experimento tal y como se describió en la sección anterior. Los valores del factor de simetría presente en las ecuaciones (1.62-1.65) se tomaron de las tablas (3.8), (3.9) y (3.10). Se calcularon las energías de activación de cada dosímetro individualmente, posteriormente se promediaron estos resultados para cada dosis y cada tasa de calentamiento (β), el error se determinó mediante desviación estándar. Las energías calculadas para el primer pico en el lote 1 a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ se muestra en las tablas (3.11).

Dosis(Gy)	$E_{\tau}(eV)$	$E_{\delta}(eV)$	$E_{\omega}(eV)$
1.3	$0.95 {\pm} 0.10$	$0.93 {\pm} 0.03$	$0.96 {\pm} 0.11$
2.6	$0.89 {\pm} 0.08$	$0.85 {\pm} 0.12$	$0.88 {\pm} 0.09$
5.2	$0.89 {\pm} 0.03$	$0.85 {\pm} 0.03$	$0.88 {\pm} 0.03$
10.4	$1.08{\pm}0.11$	$1.07 {\pm} 0.11$	$1.08 {\pm} 0.11$

Tabla 3.11: Resultados obtenidos para la energía de activación por el método de Chen para el primer pico de las curvas de brillo en el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

De los resultados presentados en la tabla (3.11) se ve que la energía obtenida para el primer pico en el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ sufren incrementos al aumentar la dosis de irradiación, llegando a un valor de 1.08 eV para una dosis de 10.4 Gy aunque tales valores concuerdan en buena medida con los reportados por Algarve y Caldas en 2018 [2] y con los de Bacci et al., 1989 [10] falta hacer una evaluación más profunda de la naturaleza y distribución de las trampas [60], para de esta forma modelar el sistema a través de un procedimiento más preciso [22] [34]. Para el segundo pico de las curvas de brillo obtenidas en el primer lote, los resultados de las energías calculadas a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ se muestran en la tabla (3.12).

Dosis(Gy)	$E_{\tau}(eV)$	$E_{\delta}(eV)$	$E_{\omega}(eV)$
1.3	$1.12 {\pm} 0.01$	$1.18 {\pm} 0.01$	1.14 ± 0.02
2.6	$1.10 {\pm} 0.02$	$1.09 {\pm} 0.06$	$1.10 {\pm} 0.04$
5.2	$1.17 {\pm} 0.02$	$1.20 {\pm} 0.01$	$1.19 {\pm} 0.01$
10.4	$1.19 {\pm} 0.15$	$1.23 {\pm} 0.15$	$1.17 {\pm} 0.15$

Tabla 3.12: Resultados obtenidos para la energía de activación por el método de Chen para el segundo pico de las curvas de brillo en el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

Los resultados para la energía de activación obtenidos para el segundo pico presentados en las tablas (3.12) muestran que para este pico hay menos variaciones en los valores obtenidos para la energía de activación, se puede ver que este pico ofrece una mayor estabilidad en la energía, es decir que la energía no varía con la dosis de irradiación.

Para el segundo lote, las energías de activación se calcularon a dos tasas de calentamiento a $\beta = 5\frac{K}{S}$ y a $\beta = 7\frac{K}{S}$. Los resultados para el primer pico de las curvas de brillo en el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ se muestran en la tabla (3.13) y para una $\beta = 7\frac{K}{S}$ en la tabla (3.14).

Dosis(Gy)	$E_{\tau}(eV)$	$E_{\delta}(eV)$	$E_{\omega}(eV)$
1.3	$0.93 {\pm} 0.01$	$0.94{\pm}0.01$	$0.94{\pm}0.01$
2.6	$0.93 {\pm} 0.05$	$0.88 {\pm} 0.06$	$0.92 {\pm} 0.05$
5.2	$1.01 {\pm} 0.01$	$0.98 {\pm} 0.01$	$1.01 {\pm} 0.01$
10.4	$1.11{\pm}0.07$	$1.11{\pm}0.09$	$1.12{\pm}0.01$

Tabla 3.13: Resultados obtenidos para la energía de activación por el método de Chen para el primer pico de las curvas de brillo en el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

Comparando los resultados para el primer pico obtenidos a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ reportados en las tablas (3.11) y (3.13) para el primer y segundo lote respectivamente, se puede decir que la energía no varía de un lote a otro, lo cual viene a confirmar que la energía aumenta al aumentar la dosis de irradiación, variando desde 0.90 eV (a 1.3 Gy) a 1.1 eV (a 10.4 Gy), comparando las tablas (3.13) y (3.14) vemos que no hay cambios apreciables en estos valores

Dosis(Gy)	$E_{\tau}(eV)$	$E_{\delta}(eV)$	$E_{\omega}(eV)$
1.3	$0.87 {\pm} 0.01$	$0.86 {\pm} 0.04$	$0.87 {\pm} 0.01$
2.6	$0.93 {\pm} 0.06$	$0.94{\pm}0.08$	$0.94{\pm}0.07$
5.2	$1.02 {\pm} 0.01$	$1.00 {\pm} 0.01$	$1.02 {\pm} 0.01$
10.4	$1.07 {\pm} 0.02$	$1.04{\pm}0.01$	$1.07 {\pm} 0.01$

Tabla 3.14: Resultados obtenidos para la energía de activación por el método de Chen para el primer pico de las curvas de brillo en el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$.

para los 3 métodos de Chen al variar la tasa de calentamiento. Los resultados de la energía de activación para el segundo pico del segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ se muestran en la tabla (3.15) y para una $\beta = 7\frac{K}{S}$ en la tabla (3.16).

Dosis(Gy)	$E_{\tau}(eV)$	$E_{\delta}(eV)$	$E_{\omega}(eV)$
1.3	$1.12 {\pm} 0.05$	$1.10 {\pm} 0.05$	$1.12 {\pm} 0.05$
2.6	$1.18 {\pm} 0.18$	$1.18 {\pm} 0.25$	$1.19{\pm}0.21$
5.2	$1.18 {\pm} 0.01$	$1.22 {\pm} 0.01$	$1.21 {\pm} 0.01$
10.4	$1.22 {\pm} 0.07$	$1.27{\pm}0.07$	$1.25{\pm}0.07$

Tabla 3.15: Resultados obtenidos para la energía de activación por el método de Chen para el segundo pico de las curvas de brillo en el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

Dosis(Gy)	$E_{\tau}(eV)$	$E_{\delta}(eV)$	$E_{\omega}(eV)$
1.3	1.13 ± 0.02	$1.13 {\pm} 0.01$	1.14 ± 0.02
2.6	$1.08 {\pm} 0.01$	$1.04 {\pm} 0.01$	$1.07 {\pm} 0.01$
5.2	$1.20 {\pm} 0.01$	$1.24{\pm}0.01$	$1.23 {\pm} 0.01$
10.4	$1.19{\pm}0.06$	$1.24{\pm}0.07$	$1.22{\pm}0.07$

Tabla 3.16: Resultados obtenidos para la energía de activación por el método de Chen para el segundo pico de las curvas de brillo en el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$.

Al comparar los resultados reportados para el segundo pico en las tablas

(3.15) y (3.16) vemos que la energía varia de 1.1 eV a 1.2 eV, sin embargo, esta variación es muy pequeña y se puede considerar que la energía para el segundo pico es más estable que para el primero. De estos cálculos se puede decir que, en el primer máximo, las energías crecen en proporción a la dosis, es decir a mayor dosis, mayor energía, a bajas dosis la energía es de aproximadamente 0.83 a 0.95 eV, mientras que a altas dosis crece a 1.1 eV, mientras que el segundo pico exhibe una mejor estabilidad en cuanto a este parámetro, que va desde 1.1 a 1.2 eV lo cual sugiere que el segundo pico es más estable en términos energéticos que el primero. La energía de activación para cada pico de la curva de brillo del BeO: Mg, Si fue reportada antes por Bacci et al., 1989 usando diferentes métodos de evaluación, tales métodos han sugerido que la energía de activación para el primer pico podría estar entre 1 a $1.5 \ eV$ y para el segundo entre 1 a $1.2 \ ev$ [10], esto señala que la determinación de la energía de activación para el primer pico no es concluyente del todo, y que se requerirán en un futuro estudios más sofisticados para la evaluación de la energía de activación de las trampas o distribuciones de trampa presentes en el BeO: Mg, Si [60] [34].

Determinación del factor de Frecuencia

El factor de frecuencia es considerado como uno de los parámetros de pico más importantes en toda la literatura [8], [2], es conocido como el factor de escape, y es interpretado como la probabilidad de escape de los electrones en los diversos niveles de trampa. El factor de frecuencia está directamente asociado a la entropía [25]. El máximo valor esperado del factor de frecuencia está en el intervalo de 10^{12} a $10^{14} s^{-1}$, que podría ser similar a la frecuencia de vibración de la red. Una forma sencilla para determinar el factor de frecuencia es que recurramos a la condición de máximo en el caso de una cinética de primer orden, esto es podría ser válido para el caso del BeO: Mg, Si sólo en el intervalo de intensidades elegido donde se determinó que la cinética para ambos picos es de aproximadamente 1.1, se podría discutir por qué no se emplea la expresión (1.72) que nos da la expresión de la frecuencia para una cinética de orden general, pero la respuesta se obtiene en la sección 1.5, donde se demuestra que el empleo de la ecuación (1.72) en lugar de (1.73)solo traería correcciones del 1%, y las incertidumbres crecerían de forma apreciable, también recordemos que en este trabajo se está considerando que el BeO: Mg, Si presenta una distribución de trampas idénticas, lo cual no es correcto del todo [19]. Partiendo de la ecuación (1.73), se calcularon los

factores de frecuencia, para el primer lote, los resultados del primer pico a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ se muestran en la tabla (3.17), en la tabla (3.18) se muestran los resultados del segundo pico.

Dosis(Gy)	$S_{\tau}(s^{-1})$	$S_{\delta}(s^{-1})$	$S_{\omega}(s^{-1})$
1.3	4.99×10^{09}	2.53×10^{09}	6.29×10^{09}
2.6	7.73×10^{08}	2.88×10^{08}	6.35×10^{08}
5.2	6.41×10^{08}	2.22×10^{08}	5.09×10^{08}
10.4	8.52×10^{10}	6.27×10^{10}	9.55×10^{10}

Tabla 3.17: Resultados obtenidos para el factor de frecuencia por el método de Chen para el primer pico de las curvas de brillo en el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

Dosis(Gy)	$S_{\tau}(s^{-1})$	$S_{\delta}(s^{-1})$	$S_{\omega}(s^{-1})$
1.3	7.02×10^{08}	2.36×10^{09}	1.03×10^{09}
2.6	3.94×10^{08}	3.17×10^{08}	4.35×10^{08}
5.2	1.80×10^{09}	3.74×10^{09}	2.92×10^{09}
10.4	3.86×10^{09}	8.74×10^{09}	2.54×10^{09}

Tabla 3.18: Resultados obtenidos para el factor de frecuencia por el método de Chen para el segundo pico de las curvas de brillo en el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

Los resultados de las tablas (3.17) y (3.18) muestran que para el primer pico el factor de frecuencia oscila entre valores con órdenes de magnitud de 1×10^{08} a $1 \times 10^{10} s^{-1}$, mientras que el segundo pico oscila entre valores con órdenes de magnitud de 1×10^{08} a $1 \times 10^{09} s^{-1}$. En la figura (3.8) se muestran las correspondientes correlaciones entre el factor frecuencia y la dosis de irradiación para el primer (a) y segundo pico (b), donde se muestra que para el primer pico el aumento del factor de frecuencia con respecto a la dosis de radiación es cuadrático, mientras que, para el segundo pico, no se encuentra como tal una correlación, pero si se aprecia un aumento del factor de frecuencia con la dosis de irradiación.

En el caso del segundo lote se calcularon los factores de frecuencia empleando los 3 métodos de forma de pico de Chen, los resultados obtenidos



Figura 3.7: Factores de frecuencia contra dosis de irradiación para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Factor de frecuencia contra dosis de irradiación para el primer pico, la correlación es cuadrática $S = (1,88605 \times 10^9)D^2 - (1,34171 \times 10^{10})D - 2,05768 \times 10^{10}$ (donde *D* representa la dosis de irradiación), con un R^2 =0.995. b) Factores de frecuencia contra dosis de irradiación para el segundo pico, donde se aprecia un incremento del factor de frecuencia con respecto a la dosis, pero como tal no se aprecia una correlación.

para el primer pico a una $\beta = 5\frac{K}{S}$, se muestran en la tabla (3.19) y para el segundo pico en la tabla (3.20).

Dosis(Gy)	$S_{\tau}(s^{-1})$	$S_{\delta}(s^{-1})$	$S_{\omega}(s^{-1})$
1.3	3.51×10^{07}	1.40×10^{09}	3.34×10^{07}
2.6	1.43×10^{09}	3.62×10^{09}	3.34×10^{08}
5.2	1.69×10^{08}	2.97×10^{08}	2.48×10^{08}
10.4	2.40×10^{10}	4.19×10^{09}	6.13×10^{10}

Tabla 3.19: Resultados obtenidos para el factor de frecuencia por el método de Chen para el primer pico de las curvas de brillo en el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

De las tablas (3.19) y (3.20) se ve que los factores de frecuencia varían con la dosis de irradiación, con valores cuyos órdenes de magnitud van desde 1×10^{07} (a 1.3 Gy) a $1 \times 10^{10} s^{-1}$ (a 10.4 Gy), mientras que para el segundo pico el intervalo de variación es más corto y va desde 1×10^{08} (a 1.3 Gy) a $1 \times 10^{09} s^{-1}$ (a 5.2 Gy). En la figura (3.9) se muestran la correspondientes correlaciones entre el factor de frecuencia y la dosis de irradiación para el primer (a) y segundo (b) pico, donde se puede ver que para el primer pico

Dosis(Gy)	$S_{\tau}(s^{-1})$	$S_{\delta}(s^{-1})$	$S_{\omega}(s^{-1})$
1.3	5.37×10^{08}	3.51×10^{08}	5.38×10^{08}
2.6	1.89×10^{09}	1.78×10^{09}	2.26×10^{09}
5.2	2.92×10^{09}	6.39×10^{09}	4.91×10^{09}
10.4	6.22×10^{09}	1.68×10^{10}	1.16×10^{10}

Tabla 3.20: Resultados obtenidos para el factor de frecuencia por el método de Chen para el segundo pico de las curvas de brillo en el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ se obtiene una correlación cuadrática entre la el factor de frecuencia y la dosis de irradiación, mientras que para el segundo pico se obtiene una correlación lineal, que como se ve de las gráficas coincide de forma muy satisfactoria con lo obtenido para el primer lote.



Figura 3.8: Factores de frecuencia contra dosis de irradiación en el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Factor de frecuencia contra dosis de irradiación (primer pico), la correlación es $S = (2,0034 \times 10^9)D^2 - (1,00352 \times 10^{10})D + 1,25567 \times 10^{10}$ con una $R^2 = 0,99874$. b) Factor de frecuencia contra dosis de irradiación (segundo pico), se observó una dependencia lineal del factor de frecuencia en el segundo pico.

Para el primer pico de las curvas de brillo del BeO: Mg, Si en el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$ los resultados para distintas dosis de irradiación se muestran en la tabla (3.21) y para el segundo pico en la tabla (3.22).

De las tablas (3.21) y (3.22) se ve que el factor de frecuencia para el primer pico oscila nuevamente en un intervalo que va desde aproximadamente 1×10^{08} (a 1.3 Gy) a $1 \times 10^{10} s^{-1}$ (a 10.4 Gy), lo cual coincide con los cálculos

Dosis(Gy)	$S_{\tau}(s^{-1})$	$S_{\delta}(s^{-1})$	$S_{\omega}(s^{-1})$
1.3	4.46×10^{08}	3.75×10^{08}	4.94×10^{08}
2.6	1.63×10^{09}	2.26×10^{09}	2.23×10^{09}
5.2	$1.37{ imes}10^{10}$	9.80×10^{09}	$1.47{ imes}10^{10}$
10.4	3.52×10^{10}	$1.87{ imes}10^{10}$	3.40×10^{10}

Tabla 3.21: Resultados obtenidos para el factor de frecuencia por el método de Chen para el primer pico de las curvas de brillo en el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$.

hechos a una $beta = 5\frac{K}{S}$ y también con los resultados del primer lote, para el segundo lote se confirma nuevamente una variación del factor de frecuencia un poco más corta, desde 1×10^{08} (a $1.3 \ Gy$) a $1 \times 10^{09} \ s^{-1}$ (a $10.4 \ Gy$), lo cual confirma la estabilidad del segundo pico en cuanto al factor de frecuencia. En la figura (3.10) se muestran las correspondientes correlaciones entre el factor de frecuencia y la dosis de irradiación para el primer (a) y segundo (b) pico, donde se puede ver que para el primer pico a una $\beta = 7\frac{K}{S}$ se obtiene una correspondencia cuadrática, mientras que para el segundo pico no se obtiene ninguna correlación del factor de frecuencia con respecto a la dosis de irradiación.

Dosis(Gy)	$S_{\tau}(s^{-1})$	$S_{\delta}(s^{-1})$	$S_{\omega}(s^{-1})$
1.3	6.68×10^{08}	6.92×10^{08}	8.03×10^{08}
2.6	2.00×10^{08}	9.09×10^{07}	1.71×10^{08}
5.2	3.59×10^{09}	8.08×10^{09}	6.12×10^{09}
10.4	3.20×10^{09}	8.79×10^{09}	5.94×10^{09}

Tabla 3.22: Resultados obtenidos para el factor de frecuencia por el método de Chen para el segundo pico de las curvas de brillo en el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$.

Se puede ver que a pesar de que en la mayor parte de los casos se obtiene una dependencia cuadrática del factor de frecuencia con respecto a la dosis de irradiación para el primer pico, no se puede dar una fórmula general para el cálculo de este parámetro ya que la ecuación varía de una condición a otra, aunque sí se puede decir que el factor de frecuencia en el primer pico se



Figura 3.9: Factores de frecuencia contra dosis de irradiación para el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$. a) Dependencia del factor de frecuencia con respecto a la dosis de irradiación, la correlación es $S = (9,97328 \times 10^7)D^2 - (2,78448 \times 10^9)D - 4,412 \times 10^9$ con una $R^2 = 0,99874$. b) Factor de frecuencia con respecto a la dosis de irradiación donde no se observó ninguna correlación entre la dosis recibida y el factor de frecuencia, aunque se observa que el factor de frecuencia se ve afectado por la dosis de irradiación.

encuentra en un intervalo de 1×10^{08} a $1 \times 10^{10} s^{-1}$, y para el segundo pico se puede ver que se encuentra en un intervalo de 1×10^{08} a $1 \times 10^{09} s^{-1}$, lo cual sugiere una mejor estabilidad del factor de frecuencia para el segundo pico, esta estabilidad se puede traducir en la lenta respuesta de los electrones y por lo tanto influye sobre la baja intensidad TL para el segundo pico. El factor de frecuencia y demás parámetros TL fueron estudiados con anterioridad por Bacci et al., 1989 y por Algarve y Caldas en el 2018 encontrando valores de 1×10^{15} y $1 \times 10^{09} s^{-1}$ para el factor de frecuencia, lo cual sugiere nuevamente la necesidad de realizar estudios más profundos de la naturaleza especifica de las trampas en este material, tal y como los realizados por Rao et al., 2010 [60] y Cruz et al.,2006 [22].

3.4.2. Método de la deconvolución en Glow-Fit

El uso de Glow-Fit es descrito en la sección (1.6.1). Este método aplica la Ecuación de Randall-Wilkins para una cinética de primer orden, a través de una aproximación mediante un cociente de polinomios de cuarto orden dado por la ecuación (1.79), el software realiza el mejor ajuste a través del método de Lenvenberg-Marquardt, este modelo es el más simple de deconvolución computarizada empleado en el cálculo de parámetros cinéticos y en el futuro

se requerirán estudios más sofisticados de deconvolución para la confirmación o refutación de estos resultados [23]. La ecuación (1.80), describe un pico en la curva de brillo, y tiene 3 parámetros libres que se fijan a través de iteraciones sucesivas. Al igual que para el método de Chen, se encontraron 2 picos termoluminiscentes, y se determinaron las temperaturas esta vez empleando deconvolución con una cinética de primer orden, los resultados para el primer lote se muestran en la tabla (3.23) y para el segundo lote en la tabla (3.24)

Dosis(Gy)	$T_1(K)$	$T_2(K)$
1.3	465 ± 3	591 ± 2
2.6	471 ± 3	591 ± 4
5.2	475 ± 2	589 ± 1
10.4	476 ± 4	585 ± 3

Tabla 3.23: Resultados de las temperaturas máximas para el primer lote ($\beta = 5\frac{K}{S}$) en un intervalo de dosis de 1.3 Gy a 10.4 Gy, las cuales se obtuvieron por ajuste de dos picos TL a la curva de brillo del BeO : Mg, Si, a través de Glow-Fit.

	$\beta =$	$5\frac{K}{S}$	$\beta =$	$7\frac{K}{S}$
Dosis(Gy)	$T_1(K)$	$T_2(K)$	$T_1(K)$	$T_2(K)$
1.3	472 ± 1	595 ± 2	480 ± 5	606 ± 2
2.6	481 ± 4	599 ± 4	$480{\pm}1$	601 ± 4
5.2	472 ± 2	586 ± 3	$480{\pm}1$	596 ± 1
10.4	477 ± 1	585 ± 2	489 ± 1	598 ± 1

Tabla 3.24: Resultados de las temperaturas máximas para el primer lote en un intervalo de dosis de 1.3 Gy a 10.4 Gy, las cuales se obtuvieron por ajuste de dos picos TL a la curva de brillo del BeO : Mg, Si, a través de Glow-Fit.

En el primer lote se utilizaron 4 dosímetros para el cálculo de parámetros TL y se empleó una $\beta = 5\frac{K}{S}$ mientras que para el segundo lote se utilizaron dos tasa de calentamiento con el fin de observar la variación de los parámetros TL con respecto a la tasa de calentamiento, también se pueden comparar los parámetros TL a las dos condiciones experimentales estudiadas en este trabajo. Se aprecia que para dosis de irradiación de 1.3 a 5.2 Gy hay discrepancias en los valores calculados para la temperatura en ambos picos, mientras que

para una dosis de 10.4 Gy, no se aprecia que existan esas variaciones, encontrándose que a esta dosis la temperatura en el primer pico es de ≈ 477 y 585 K para ambos lotes, mientras que para los ajustes realizados a una tasa de 7 $\frac{K}{S}$ las temperaturas para el primer y segundo pico se corren a ≈ 489 y 598 K respectivamente.Este corrimiento en la temperatura puede deberse al incremento en la tasa de calentamiento tal y como ha sido encontrado antes por Rao et al., 2010 [60], o a descuidos experimentales en la preparación de las muestras que causarían respuestas TL distintas en los dosímetros [22].

Determinación de la energía de activación

Las energías de activación se obtuvieron en el mismo intervalo de dosis que en el método de Chen (1.3 Gy a 10.4 Gy), esto fue posible gracias a que con el método de Chen se determinó que el orden de cinética para ambos picos presentes en el BeO: Mg, Si es de aproximadamente primer orden. Gracias a esto podemos emplear la deconvolución por el método de Glow-Fit, que es descrito en la sección (1.6.1), donde se dan los detalles principales del programa y donde se describe su uso, este programa no solamente es beneficioso para el cálculo de parámetros TL, sino que también puede ser empleado en procedimientos rutinarios de dosimetría termoluminiscente. Con la deconvolución se determinó que posiblemente existen dos niveles de trampa centrados en las temperaturas dadas en la sección anterior. Mediante Glow-Fit se obtuvieron los parámetros de ambos lotes al igual que en el método de Chen. Los valores obtenidos mediante deconvolución para el primer lote, se muestran en la tabla (3.25), para este lote se empleó una tasa de calentamiento de $5\frac{K}{S}$, mientras que en el segundo lote se emplearon dos tasas de calentamiento y los resultados para ambas tasas de calentamiento se muestran en la tabla (3.26).

Los resultados mostrados en las tablas (3.25) y (3.26) muestran que la energía para ambos picos no varía de un lote a otro, ni de una tasa de calentamiento a otra, sin embargo analizando cada pico de forma individual se puede ver que para el primer pico la energía de activación aumenta muy ligeramente al aumentar la dosis de irradiación, aunque se puede considerar aproximadamente entre 1.0 a 1.1 eV, mientras que para el segundo pico se obtiene una energía de 1.2 eV que es ligeramente mayor que para el primer pico, y no parece variar con la dosis de irradiación. Aunque estos resultados están acorde con el método de Chen, no están en completo acuerdo con lo reportado por otros investigadores [7] [10], lo cual puede deberse a que en

Dosis(Gy)	$E_1(eV)$	$E_2(eV)$
1.3	$0.94{\pm}0.02$	1.17 ± 0.01
2.6	$1.01 {\pm} 0.02$	$1.16 {\pm} 0.01$
5.2	$1.05 {\pm} 0.02$	$1.10 {\pm} 0.02$
10.4	$1.10 {\pm} 0.03$	$1.06 {\pm} 0.01$

Tabla 3.25: Resultados obtenidos para la energía de activación mediante el método de la deconvolución Glow-Fit para los dos picos presentes en la curva de brillo del BeO: Mg, Si en el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

	$\beta = 5\frac{K}{S}$			$7\frac{K}{S}$
Dosis(Gy)	$E_1(eV)$	$E_2(eV)$	$E_1(eV)$	$E_2(eV)$
1.3	$0.98 {\pm} 0.04$	$1.16 {\pm} 0.02$	$0.93 {\pm} 0.02$	$1.14{\pm}0.02$
2.6	$1.02 {\pm} 0.05$	$1.16 {\pm} 0.01$	$1.03 {\pm} 0.04$	$1.15 {\pm} 0.02$
5.2	$1.08 {\pm} 0.01$	$1.12 {\pm} 0.01$	$1.08{\pm}0.01$	$1.12 {\pm} 0.02$
10.4	$1.10 {\pm} 0.01$	$1.07 {\pm} 0.01$	$1.14 {\pm} 0.01$	$1.05 {\pm} 0.01$

Tabla 3.26: Resultados obtenidos para la energía de activación mediante el método de la deconvolución Glow-Fit, para los dos picos presentes en la curva de brillo del BeO: Mg, Si en el segundo lote a dos tasas de calentamiento.

la mayoría de estos estudios no se considera la naturaleza de las trampas involucradas en los procesos de luminiscencia y termoluminiscencia.

Determinación del factor de frecuencia

Mediante le deconvolución también es posible obtener los valores del factor de frecuencia, ya que este es uno de los parámetros libres en la expresión (1.80). Para el primer lote los ajustes fueron realizados a una $\beta = 5\frac{K}{S}$, los resultados para ambos picos de las curvas de brillo en el primer lote en un intervalo de dosis de 1.3 a 10.4 Gy se reportan en la tabla (3.27).

Nuevamente se observa que el factor de frecuencia varía con la dosis de irradiación. El primer pico mantiene una correlación cuadrática creciente entre el factor de frecuencia y la dosis de irradiación (Figura (3.11a)), mientras que el factor de frecuencia del segundo pico exhibe un decrecimiento al aumentar la dosis de irradiación (Figura (3.11b)). Para el primer pico en el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$, se puede ver que el intervalo de variación del

Dosis(Gy)	$S_1(s^{-1})$	$S_2(s^{-1})$
1.3	8.28×10^{09}	3.68×10^{09}
2.6	$3.87{ imes}10^{10}$	3.10×10^{09}
5.2	7.99×10^{10}	1.02×10^{09}
10.4	$2.57{ imes}10^{11}$	4.71×10^{08}

Tabla 3.27: Resultados obtenidos para el factor de frecuencia por el método de la deconvolución en Glow-Fit para ambos picos de las curvas de brillo en el primer lote obtenidas a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

factor de frecuencia va desde aproximadamente 1×10^{09} (a 1.3 Gy) a 1×10^{11} s^{-1} (a 10.4 Gy), mientras que para el segundo pico va desde 1×10^{09} (a 1.3 Gy) a $1 \times 10^{08} s^{-1}$ (a 10.4 Gy).



Figura 3.10: Factores de frecuencia contra dosis de irradiación para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Para el primer pico, donde se puede apreciar una dependencia cuadrática que se expresa como $S = (1,65313 \times 10^9)D^2 - (7,47671 \times 10^9)D - 2,48266 \times 10^8$ (donde *D* representa la dosis de irradiación), con un $R^2 = 0,99$. b) Para el segundo pico.

En la tabla (3.28) se dan los resultados del factor de frecuencia para ambas tasas de calentamiento empleadas en el segundo lote, en esta tabla se puede ver que para el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ el factor de frecuencia oscila en un intervalo que va de 1×10^{10} a $1 \times 10^{11} s^{-1}$, mientras que para una $\beta = 7\frac{K}{S}$ este factor varía desde 1×10^{09} a $1 \times 10^{11} s^{-1}$, con lo cual se ve que el factor de frecuencia no se ve afectado de forma significativa al pasar de un lote a otro, pero sufre pequeños cambios al variar la tasa de calentamiento. Para el segundo pico a una tasa de calentamiento de $\beta = 5\frac{K}{S}$ el intervalo de variación va desde 1×10^{09} a $1 \times 10^{08} s^{-1}$, mientras que a una $\beta = 7\frac{K}{S}$ el intervalo va de $1 \times 10^{09} s^{-1}$ a $1 \times 10^{08} s^{-1}$, con lo cual se vuelve a confirmar que el factor de frecuencia en el segundo pico varía menos que el factor de frecuencia del primer pico con respecto a la dosis.

	$\beta =$	$5\frac{K}{S}$	$\beta =$	$7\frac{K}{S}$
Dosis(Gy)	$S_1(s^{-1})$	$S_2(s^{-1})$	$S_1(s^{-1})$	$S_2(s^{-1})$
1.3	1.87×10^{10}	2.58×10^{09}	2.50×10^{09}	1.18×10^{09}
2.6	4.14×10^{10}	2.43×10^{09}	5.32×10^{10}	$1.97{ imes}10^{09}$
5.2	$1.87{ imes}10^{11}$	1.62×10^{09}	1.20×10^{11}	$1.17{ imes}10^{09}$
10.4	2.44×10^{11}	5.92×10^{08}	3.54×10^{11}	2.06×10^{08}

Tabla 3.28: Resultados obtenidos para el factor de frecuencia por el método de la deconvolución Glow-Fit para ambos picos de las curvas de brillo en el segundo lote obtenidas a dos tasas de calentamiento diferentes.



Figura 3.11: Factores de frecuencia contra dosis de irradiación para el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Para el primer pico. b) Para el segundo pico donde se aprecia una correlación lineal, que se expresa como la siguiente función $S = -2,25389 \times 10^8 D - 2,90406 \times 10^9$, con $R^2 = 0,99$.

En las figuras (3.12a) y (3.13a) podemos observar que el factor de frecuencia sufre un aumento al aumentar la dosis de irradiación, y en las figuras (3.12b) y (3.13b) podemos notar que en el segundo pico el factor de frecuencia disminuye al aumentar la dosis de irradiación. Con esto podemos decir que con deconvolución Glow-Fit se encuentra que para el primer pico el factor de frecuencia varía entre 1×10^{09} a $1 \times 10^{11} s^{-1}$, mientras que el segundo pico sufre una variación menor, la cual está entre 1×10^{09} a $1 \times 10^{08} s^{-1}$, de menor



Figura 3.12: a) Factor de frecuencia contra dosis de irradiación en el segundo pico para aquellas curvas obtenidas a una tasa de calentamiento de 7 $\frac{K}{S}$, donde se aprecia una correlación lineal que es $S = 3,83207 \times 10^{10} D - 5,46307 \times 10^{10}$, con un $R^2 = 0,99$. b) Factor de frecuencia contra dosis de irradiación, en este caso se aprecia nuevamente que para el segundo pico la frecuencia disminuye con respecto a la dosis de irradiación.

a mayor dosis. Con referencia a las discrepancias existentes a diferentes tasas de calentamiento se puede decir que en el primer pico cuando se aumenta la tasa de calentamiento se aumenta ligeramente el factor de frecuencia. En nuestro caso se aumentó $\beta = 7\frac{K}{S}$, y se encontró que el factor de frecuencia del primer pico aumentó de 2.44 ×10¹¹ a 3.54 ×10¹¹ s⁻¹, mientras que el del segundo pico disminuyó de 5.92 ×10⁰⁸ a 2.06 ×10⁰⁸ s⁻¹.

3.4.3. Método de Deconvolución en 'tgcd' en R

El uso del paquete 'tgcd' en R para deconvolución es descrito en la sección (1.6.2). Este método realiza la deconvolución de curvas de brillo a través de la ecuación (1.82), la cual describe la intensidad de una curva TL utilizando una cinética de orden general, esta expresión fue derivada por primera vez por Kitis en 1998 [32],tal modelo es el más simple para modelar distribuciones de trampa y se requieren estudios más precisos para determinar la naturaleza especifica de las distribuciones de trampas presentes en este material para obtener de esta forma resultados más precisos de todos los parámetros TL estudiados [23] [22] [60]. La deconvolución de las curvas de brillo obtenidas a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ mostró dos componentes TL, las temperaturas máximas para el primer lote se dan en la tabla (3.29)

	β :	$=5\frac{K}{S}$
Dosis(Gy)	$T_1(K)$	$T_2(K)$
1.3	455 ± 2	596.65 ± 2
2.6	464 ± 1	596.40 ± 2
5.2	465 ± 3	591.40 ± 2
10.4	471 ± 2	590.67 ± 3

Tabla 3.29: Resultados obtenidos para la temperatura máxima por el método de la deconvolución 'tgcd' en 'R' para las curvas de brillo en el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

Para el segundo lote fueron empleadas dos tasas de calentamiento (5 y $7\frac{K}{S}$) para obtener las curvas de brillo, los resultados de las temperaturas máximas para el segundo lote a ambas tasas de calentamiento se resumen en la tabla (3.30).

	$\beta =$	$5\frac{K}{S}$	$\beta =$	$7\frac{K}{S}$
Dosis(Gy)	$T_1(K)$	$T_2(K)$	$T_1(K)$	$T_2(K)$
1.3	471 ± 1	595 ± 2	474 ± 1	602 ± 5
2.6	478 ± 5	596 ± 5	479 ± 1	601 ± 5
5.2	473 ± 3	558 ± 3	480 ± 4	598 ± 1
10.4	478 ± 2	587 ± 3	488 ± 2	596 ± 1

Tabla 3.30: Resultados obtenidos para la temperatura máxima por el método de la deconvolución 'tgcd' en 'R' para las curvas de brillo en el segundo lote a ambas tasas de calentamiento.

Se puede ver que existe una variación en los valores de la temperatura máxima obtenida con la función 'tgcd' en 'R' para distintas dosis de irradiación obteniéndose que para una dosis de 10.4 Gy la temperatura para el primer pico de las curvas de brillo del primer lote, es de aproximadamente de 471 K y para el segundo lote de aproximadamente 478 K, lo cual representa un corrimiento en el valor de este parámetro de casi 7 K, mientras que para el segundo pico la temperatura se mantiene muy estable al cambiar de un lote a otro, aproximadamente 590 K, lo cual sugiere una gran estabilidad en este pico de la curva de brillo. Para el caso del segundo lote se calentó a dos tasas de calentamiento y se aprecia que a una tasa de 7 $\frac{K}{S}$, las temperaturas para el primer y segundo pico son de 488 y 596 K respectivamente. El resultado de la deconvolución a través de la función 'tgcd' en 'R, nos permite presentar valores de FOM muy bajos en comparación con los obtenidos con Glow-Fit, algunos resultados para el primer lote se dan en las figuras (3.14).



Figura 3.13: Resultados de la deconvolución en 'tgcd' en 'R' para el primer lote. a) Deconvolución a 5.2 Gy con un FOM=1.86, b) Deconvolución a 10.4 Gy con un FOM=1.92, c) Deconvolución a 15.6 Gy con un FOM=1.40, d) Deconvolución a 23.4 Gy con un FOM=1.34.

En la figura (3.15) se presentan algunas curvas de deconvolución para el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$, se puede notar que los valores del FOM disminuyen al aumentar la dosis de irradiación.

Factor de simetría y orden de cinética

A diferencia de Glow-Fit que utiliza curvas TL con cinéticas de primer orden para resolver curvas de brillo, la herramienta 'tgcd' en 'R' utiliza curvas TL con cinéticas de orden general para realizar la misma función, esto



Figura 3.14: Resultados de la deconvolución en 'tgcd' en 'R' para el segundo lote a $\beta = 7\frac{K}{S}$. a) Deconvolución a 2.6 Gy con un FOM=2.18, b) Deconvolución a 5.2 Gy con un FOM=1.91, c) Deconvolución a 10.4 Gy con un FOM=1.82, d) Deconvolución a 15.6 Gy con un FOM=1.42.

permite al usuario el cálculo del factor de simetría y con ello la obtención del orden de cinética. Los resultados para el factor de simetría (μ_g) y orden de cinética (b) para el primer lote se muestran en la tabla (3.31), donde se puede ver que para el primer pico la cinética varia un poco de un lote a otro sobre todo para bajas dosis de radiación (1.3 a 2.6 Gy).

Para el primer lote se puede ver que los resultados del primer pico sufren cambios conforme la dosis se incrementa pasando de una cinética de orden intermedio, de aproximadamente 1.2 a 5.2 Gy a una cinética de aproximadamente 1.03 para una dosis de irradiación de 23.4 Gy, lo cual sugiere que este pico no es muy estable en cuanto a parámetros nos referimos, mientras que para el segundo pico se puede apreciar que la cinética es de aproximadamente 1 para prácticamente todo el intervalo de dosis, con lo cual se aprecia una

3.4. PARÁMETROS TERMOLUMINISCENTES

	Pi	ico 1	Pico 2		
Dosis(Gy)	μ_g	b	μ_g	b	
1.3	$0.50 {\pm} 0.01$	$1.814{\pm}0.001$	$0.43 {\pm} 0.02$	1.00001 ± 0.00001	
2.6	$0.47 {\pm} 0.01$	$1.42 {\pm} 0.01$	$0.43 {\pm} 0.02$	$1.00001 {\pm} 0.00002$	
5.2	$0.45 {\pm} 0.03$	$1.17 {\pm} 0.01$	$0.42 {\pm} 0.01$	$1.00001 {\pm} 0.00001$	
10.4	$0.42 {\pm} 0.01$	$1.04{\pm}0.01$	$0.42 {\pm} 0.01$	$1.00003 {\pm} 0.00001$	
15.6	$0.43 {\pm} 0.02$	$1.04{\pm}0.01$	$0.42 {\pm} 0.02$	$1.0001 {\pm} 0.0001$	
23.4	$0.43 {\pm} 0.01$	$1.03 {\pm} 0.04$	$0.43 {\pm} 0.01$	$1.02 {\pm} 0.01$	

Tabla 3.31: Resultados obtenidos para el factor de simetría (μ_g) y orden de cinética (b) por el método de la deconvolución 'tgcd' en 'R' para las curvas de brillo en el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

gran estabilidad de este pico TL.

Para el segundo lote el intervalo sobre el cual se calculó el factor de simetría fue el mismo que para el primero, aunque para este lote se emplearon dos tasas de calentamiento, para una $\beta = 5\frac{K}{S}$ los resultados se presentan en la tabla (3.32) mientras que para una $\beta = 7\frac{K}{S}$ se presentan en la tabla (3.33).

Se puede apreciar que no existen cambios significativos en los valores de

	Pico 1		Pico 2	
Dosis(Gy)	μ_g	b	μ_g	b
1.3	$0.45 {\pm} 0.02$	$1.141 {\pm} 0.09$	$0.42{\pm}0.01$	1.00001 ± 0.00002
2.6	$0.43 {\pm} 0.01$	$1.04{\pm}0.02$	$0.43 {\pm} 0.01$	$1.00001 {\pm} 0.00001$
5.2	$0.44 {\pm} 0.01$	$1.04{\pm}0.04$	$0.421 {\pm} 0.003$	$1.00001 {\pm} 0.00001$
10.4	$0.42 {\pm} 0.01$	$1.02 {\pm} 0.01$	$0.42{\pm}0.01$	$1.01 {\pm} 0.01$
15.6	$0.43 {\pm} 0.01$	$1.07 {\pm} 0.01$	$0.43 {\pm} 0.01$	$1.06 {\pm} 0.03$
19.5	$0.44 {\pm} 0.02$	$1.11 {\pm} 0.01$	$0.45 {\pm} 0.01$	$1.11 {\pm} 0.03$
23.4	$0.44 {\pm} 0.01$	$1.16 {\pm} 0.04$	$0.45 {\pm} 0.01$	$1.16 {\pm} 0.05$

Tabla 3.32: Resultados obtenidos para el factor de simetría (μ_g) y orden de cinética (b) por el método de la deconvolución 'tgcd' en 'R' para las curvas de brillo en el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

cinética para ambos picos al pasar de un lote a otro, con lo que se puede decir que el primer lote exhibe una cinética de orden intermedio que varía ligeramente con la dosis de irradiación, pero que se centra en un valor de aproximadamente 1.1, mientras que para el segundo pico se puede apreciar que se tiene una cinética de aproximadamente 1.

Se puede observar de la tabla (3.33) que no existen variaciones significativas al variar la tasa de calentamiento en ambos picos, con lo cual se puede confirmar que el primer pico exhibe una cinética de orden intermedio de aproximadamente 1.1, mientras que el segundo pico exhibe una cinética de primer orden en gran parte del intervalo de dosis estudiado, sin embargo, se puede ver que para altas dosis la tendencia en el primer pico es hacia una cinética de orden intermedio (≈ 1.2).

-	Pic	eo 1	Ι	Pico 2
Dosis(Gy)	μ_g	b	μ_g	b
1.3	$0.446{\pm}0.034$	$1.168 {\pm} 0.106$	$0.423 {\pm} 0.017$	1.00005 ± 0.00001
2.6	$0.428 {\pm} 0.008$	$1.067 {\pm} 0.015$	$0.434{\pm}0.001$	1.00001 ± 0.00001
5.2	$0.429 {\pm} 0.022$	$1.044{\pm}0.023$	$0.424{\pm}0.015$	$1.00001 {\pm} 0.00001$
10.4	$0.423 {\pm} 0.013$	$1.050 {\pm} 0.014$	$0.432{\pm}0.008$	$1.04200 {\pm} 0.00001$
15.6	$0.431 {\pm} 0.025$	$1.091{\pm}0.037$	$0.420{\pm}0.003$	$1.103 {\pm} 0.08$
19.5	$0.441{\pm}0.017$	$1.129 {\pm} 0.055$	$0.464{\pm}0.017$	$1.294{\pm}0.15$
23.4	$0.439 {\pm} 0.012$	$1.129 {\pm} 0.025$	$0.449 {\pm} 0.006$	$1.221{\pm}0.05$

Tabla 3.33: Resultados obtenidos para el factor de simetría (μ_g) y orden de cinética (b) por el método de la deconvolución 'tgcd' en 'R' para las curvas de brillo en el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$.

Determinación de la energía de activación

La energía de activación es uno de los 4 parámetros libres que se utiliza el paquete 'tgcd' en 'R' para ajustar curvas TL a una curva de brillo, por lo tanto, es posible calcular este parámetro a través de la deconvolución computarizada con 'tgcd' en 'R'. Para el primer lote los resultados se muestran en la tabla (3.34).

Para el primer lote se puede apreciar que los valores difieren entre si ligeramente al modificarse la dosis de irradiación, lo cual es muy consistente con lo encontrado con los otros dos métodos de análisis presentados en este trabajo, se puede decir que este resultado es favorable ya que permite la obtención de forma más efectiva de la energía de activación, para el primer pico se encuentra que $E_1 \approx 1.1 \ eV$, para el segundo $E_2 \approx 1.2 \ eV$. Para el segundo lote

Dosis(Gy)	E_1	E_2
1.3	$1.22 {\pm} 0.05$	1.07 ± 0.02
2.6	$1.06 {\pm} 0.02$	$1.16 {\pm} 0.01$
5.2	$1.04{\pm}0.03$	$1.18 {\pm} 0.04$
10.4	$1.04{\pm}0.01$	$1.17 {\pm} 0.01$

Tabla 3.34: Resultados de la energía de activación obtenidos por deconvolución con 'tgcd' en 'R' para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

se emplearon tasas de calentamiento de 5 y 7 $\frac{K}{S}$ los resultados se muestran en la tabla (3.35).

Se puede apreciar que no existen cambios significativos entre los dos lotes y

	$\beta =$	$5\frac{K}{S}$	$\beta =$	$7\frac{K}{S}$
Dosis(Gy)	E_1	E_2	E_1	E_2
1.3	$1.06 {\pm} 0.02$	$1.17 {\pm} 0.02$	$1.06 {\pm} 0.01$	1.18 ± 0.03
2.6	$1.05 {\pm} 0.04$	$1.18 {\pm} 0.01$	$1.08 {\pm} 0.03$	$1.17 {\pm} 0.03$
5.2	$1.09 {\pm} 0.05$	$1.14 {\pm} 0.01$	$1.11 {\pm} 0.02$	$1.14 {\pm} 0.01$
10.4	$1.11{\pm}0.02$	$1.12{\pm}0.01$	$1.17{\pm}0.01$	$1.13 {\pm} 0.01$

Tabla 3.35: Resultados de la energía de activación obtenidos por deconvolución con 'tgcd' en 'R' para el segundo lote a ambas tasas de calentamiento.

las dos tasas de calentamiento empleadas en los valores de la energía, para el primer pico la energía es de 1.1 eV y para el segundo pico de 1.2 eV, con lo cual se ve la gran ventaja que existe al emplear un método de deconvolución con una cinética de orden general para el cálculo de parámetros TL.

Determinación del factor de frecuencia

El factor de frecuencia depende de la tasa de calentamiento, por lo cual a la hora de realizar los ajustes con cualquier método de deconvolución es importante indicarle al programa a que tasa se obtuvieron las gráficas, en este trabajo se determinaron los factores de frecuencia con la función 'tgcd' en 'R', los resultados para las curvas del primer lote obtenidas a una tasa de calentamiento de 5 $\frac{K}{S}$ se muestran en la tabla (3.36).

Dosis(Gy)	S_1	S_2
1.3	2.1073×10^{13}	3.43×10^{08}
2.6	$2.7319{ imes}10^{11}$	$1.37{ imes}10^{09}$
5.2	5.9848×10^{10}	2.46×10^{09}
10.4	4.4603×10^{10}	1.89×10^{09}

Tabla 3.36: Resultados obtenidos para el factor de frecuencia por el método de deconvolución 'tgcd' en 'R' para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

A partir de estos resultados se puede decir que el factor de frecuencia para el primer pico oscila entre valores que van desde 1×10^{10} hasta $1 \times 10^{13} s^{-1}$ y para el segundo pico se puede ver que estos valores oscilan desde 1×10^{08} hasta $1 \times 10^{09} s^{-1}$, con lo cual se puede ver que el primer pico sufre menos variaciones con respecto a la dosis de irradiación que el segundo, esto probablemente influenciado por los resultados del factor de simetría reportados anteriormente. La figura (3.16a) muestra los resultados del factor de frecuencia para el primer pico y la figura (3.16b) para el segundo pico, como tal no se encontró una correlación entre el factor de frecuencia y la dosis de irradiación.

Los resultados para el segundo lote se muestran en la tabla (3.37), donde se



Figura 3.15: Factores de frecuencia contra dosis de irradiación para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Para el primer pico, se puede notar que el factor de frecuencia disminuye al aumentar la dosis. b) Para el segundo pico, no se aprecia como tal una correlación, pero si se aprecia una variación del factor de frecuencia con la dosis de irradiación.

reportan los valores para el factor de frecuencia para las dos tasas de calentamiento empleadas en este lote, se puede ver que los resultados para este lote son más consistentes con los obtenidos con ayuda del método de la deconvolución en glow-fit, obteniéndose en este caso que el factor de frecuencia para el primer pico aumenta conforme la dosis aumenta, mientras que para el segundo, el factor de frecuencia disminuye al disminuir la dosis. De la tabla (3.37) se ve que no existen variaciones significativas en los factores de frecuencia al variar la tasa de calentamiento, se puede ver que el primer pico tiene un factor de frecuencia que se encuentra en un intervalo que va desde 1×10^{10} hasta $1 \times 10^{11} S^{-1}$, mientras que para el segundo va de 1×10^{09} hasta $1 \times 10^{08} S^{-1}$, los resultados del factor de frecuencia para el segundo lote a una $\beta = 5 \frac{K}{S}$ se muestran en las figuras (3.17a) y(3.17b) para el primer y segundo pico respectivamente, para una $\beta = 7 \frac{K}{S}$ en las figuras (3.18a) y (3.18b) para el primer y segundo pico respectivamente.

CAPÍTULO 3

	$\beta =$	$5\frac{K}{S}$	$\beta =$	$7\frac{K}{S}$
Dosis(Gy)	S_1	S_2	S_1	S_2
1.3	7.12×10^{10}	8.03×10^{08}	7.25×10^{10}	2.23×10^{09}
2.6	4.29×10^{10}	1.66×10^{09}	1.06×10^{11}	1.77×10^{09}
5.2	1.88×10^{11}	1.04×10^{09}	$1.73{ imes}10^{11}$	1.07×10^{09}
10.4	1.54×10^{11}	7.24×10^{08}	4.91×10^{11}	9.37×10^{08}

Tabla 3.37: Resultados obtenidos para el factor de frecuencia por el método de deconvolución 'tgcd' en 'R' para el segundo lote a dos tasas de calentamiento diferentes.

Se puede ver que existen diferencias entre las gráficas del primer y segundo lote en ambos picos, aunque se debe hacer notar que existe mucha consistencia en los intervalos de variación de la frecuencia, ya que ambos lotes muestran variaciones de entre 1×10^{10} y 1×10^{11} S^{-1} para el primer pico, mientras que para el segundo la variación es de entre 1×10^{08} y 1×10^{09} S^{-1} , lo cual sugiere que los factores de frecuencia para ambos picos oscilan entre estos valores. Vale la pena hacer notar que los valores del factor de frecuencia calculados a una tasa de 7 $\frac{K}{S}$ son más consistentes con los resultados obtenidos por el método de la deconvolución en Glow-Fit, se puede decir que el factor de frecuencia para el primer pico está en un intervalo de 1×10^{11} S^{-1} , mientras que para el segundo la variación es de entre 1×10^{08} y 1×10^{09} S^{-1} ,



Figura 3.16: Factores de frecuencia contra dosis de irradiación para el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Para el primer pico, se puede notar que el factor de frecuencia aumenta al aumentar la dosis. b) Para el segundo pico, no se aprecia como tal una correlación, pero si se aprecia una variación del factor de frecuencia con la dosis de irradiación.

tanto con Glow-Fit como para la función 'tgcd' en 'R'.



Figura 3.17: Factores de frecuencia contra dosis de irradiación para el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$. a) Para el primer pico, se aprecia que existe una correlación tipo parabólica creciente entre la dosis de irradiación y el factor de frecuencia con una relación dada por $S = 3804797353D^2 +$ $885856079D + 696666666666 con un R^2=0.997$. b) Para el segundo lote, se aprecia que existe una correlación tipo parabólica decreciente entre la dosis de irradiación y el factor de frecuencia con una relación dada por $S = 29698734D^2 - 490797767D + 2827833333$ con un $R^2=0.999$

3.5. Respuesta Termoluminiscente

Las mediciones de la respuesta TL en función de la dosis por área bajo la curva y por intensidades máximas se llevaron a cabo para los dos picos identificados en la curva de brillo del BeO: Mq, Si de forma independiente, esto se realizó en ambos lotes y para cada tasa de calentamiento empleada. Las mediciones se realizaron sobre un intervalo de dosis de 1.3 Gy hasta 23.4 Gy, encontrándose que en este intervalo el primer pico exhibe un comportamiento cuadrático de la respuesta TL con respecto a la dosis de irradiación basada en la amplitud del pico de máxima intensidad mientras que el segundo pico exhibe un comportamiento lineal. Para la obtención de la respuesta TL en función de la dosis se emplearon los dos métodos de deconvolución: Glow-Fit y 'tgcd' en 'R'. La medición utilizando el valor máximo del pico es relativamente sencilla ya que ambos programas utilizan este parámetro para ajustar un conjunto de curvas TL a una curva de brillo. La medición mediante el área bajo la curva es sencilla para el programa Glow-Fit, ya que el programa calcula este valor para cada componente de la curva de brillo y lo reporta a través de una salida a un documento de Excel de donde es posible graficar, sin embargo, esto no ocurre para el paquete 'tgcd' en 'R' donde es necesario emplear otros métodos para calcular el área bajo la curva en este caso se empleó el programa 'OriginPro 9.0' para realizar las integrales. Los resultados de mediciones realizadas con Glow-Fit se presentan en la sección (3.4.1) y para deconvolución 'tgcd' en 'R' en la (3.4.2).

3.5.1. Respuesta TL en función de la dosis usando Glow-Fit

Glow-Fit emplea la ecuación de Randall-Willking para ajustar un conjunto de hasta 10 picos TL con cinéticas de primer orden a un conjunto de datos experimentales (curva de brillo). Glow-Fit utiliza 3 parámetros libres que son I_m , $E \ge T_m$, una vez que Glow-Fit realiza el ajuste, guarda los resultados en una hoja de cálculo de Microsoft Excel de donde es posible obtener la respuesta TL en función de la dosis mediante el pico máximo o mediante el área bajo la curva para cada pico.

Determinación de la respuesta TL en función de la dosis usando la amplitud del pico

Las curvas del primer lote se obtuvieron empleando una $\beta = 5\frac{K}{S}$, en un intervalo de dosis de 1.3 Gy a 23.4 Gy, los resultados de las mediciones mediante Glow-Fit para el primer lote utilizando el máximo en intensidad (I_m) se muestran en la tabla (3.38).

	Pico 1		Pico 2	
Dosis(Gy)	$I_M(nA)$	Error (%)	$I_M(nA)$	Error (%)
1.3	200266	8	414446	5
2.6	872559	6	634105	6
5.2	5205292	6	1201052	3
10.4	15735349	4	1794615	4
15.6	29242493	5	2647080	5
23.4	69271980	4	3791987	8

Tabla 3.38: Resultados obtenidos para la intensidad máxima por el método de la deconvolución en Glow-Fit para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

En las figuras (3.19a) y (3.19b) se presentan las gráficas de la intensidad máxima en función de la dosis de irradiación para el primer y segundo pico de la curva de brillo estudiada, para el primer pico se encuentra una correspondencia cuadrática, mientras que para el segundo se encuentra una correspondencia lineal.

La ecuación que nos da la correspondencia entre el máximo en intensidad y la dosis de irradiación para el primer pico del primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ esta dado en la ecuación (3.1)

$$I_M = 120764D^2 + 95086D + 350440 \tag{3.1}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_M$ es la intensidad máxima dada en nA. La ecuación (3.2) nos da la relación entre la intensidad máxima y la dosis de irradiación para el segundo pico

$$I_{TL} = 150776D + 277149 \tag{3.2}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en Gy é I_M es la intensidad máxima dada en nA. este pico exhibe el comportamiento típico de un dosímetro TL (Relación lineal entre la dosis de irradiación y la respuesta



Figura 3.18: Respuesta TL en función de la dosis usando intensidad máxima para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Intensidad máxima contra dosis de irradiación para el primer pico, la correlación es $I_{TL} = 120764D^2 + 95086D +$ 350440, con un $R^2 = 0,996$. b) Intensidad máxima contra dosis de irradiación para el segundo pico, la correlación es $I_{TL} = 150776D + 277149$, con un $R^2 = 0,9958$.

TL) y podría ser considerado para procedimientos rutinarios de dosimetría de radiación ionizante.

Los resultados para el segundo lote se obtuvieron a dos tasas de calentamiento, esto con la finalidad de comparar las diferencias en los parámetros TL y respuestas TL en función de la dosis al variar la tasa de calentamiento. Los resultados de la respuestas TL en función de la dosis por el método de la máxima intensidad de pico para el segundo lote a una tasa de calentamiento de 5 $\frac{K}{S}$ se presentan en la tabla (3.39).

	Pico 1		Pico 2	
Dosis(Gy)	$I_M(nA)$	Error (%)	$I_M(nA)$	Error (%)
1.3	383712	4	416844	2
2.6	1862475	4	579247	4
5.2	3280681	6	1234855	2
10.4	22551717	5	1843861	2
15.6	39417706	10	2497866	2
19.5	55321715	5	3026180	3
23.4	87250706	3	3686294	5

Tabla 3.39: Resultados obtenidos para la intensidad máxima por el método de la deconvolución en Glow-Fit para el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.



Figura 3.19: Respuesta TL en función de la dosis por intensidad máxima para el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Intensidad máxima contra dosis de irradiación para el primer pico, la correlación es $I_{TL} = 139722D^2 + 364135D -$ 291927, con un $R^2 = 0.989$. b) Intensidad máxima contra dosis de irradiación para el segundo pico, la correlación es $I_{TL} = 143259D + 301562$, con un $R^2 = 0.992$.

En la figura (3.20a) y (3.20b) se presentan las gráficas de la intensidad máxima en función de la dosis de irradiación para el primer y segundo pico respectivamente. De la figura (3.20a) se ve que la correlación entre la intensidad máxima y la dosis de irradiación para el primer pico es cuadrática y está dada por la ecuación (3.3)

$$I_{TL} = 139722D^2 + 364135D - 291927.$$
(3.3)

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_M$ es la intensidad máxima dada en nA. De la figura (3.20b) se ve que para el segundo pico la correlación es lineal y se da a través de la ecuación (3.4)

$$I_{TL} = 143259D + 301562 \tag{3.4}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_M$ es la intensidad máxima dada en nA. si se hace una comparación entre el coeficiente del término cuadrático de la ecuación (3.1) y el de la ecuación (3.3), se encuentra que

$$\frac{a_1}{a_1'} = \frac{120764}{139722} = 0.86$$

donde a_1 representa el coeficiente del término cuadrático en la ecuación (3.1) y a'_1 representa el coeficiente del término cuadrático de la expresión (3.3),
esta comparación hace notar que hay una discrepancia en los valores de la intensidad máxima obtenidos para ambos lotes en el primer pico. La comparación entre las respuestas TL en función de la dosis del segundo pico se lleva a cabo a través de los coeficientes lineales de las ecuaciones (3.6) y (3.2) y nos da

$$\frac{b_1}{b_1'} = \frac{143259}{150776} = 0.95$$

lo cual nos dice que el segundo pico sufre un desvió menor en respuestas TL en función de la dosis al cambiar las condiciones experimentales en comparación con el primer pico.

El método del pico de máxima intensidad expuesto anteriormente para la determinación de la respuesta TL en función de la dosis en el primero y segundo lote a una tasa de calentamiento de 5 $\frac{K}{S}$, se aplicó también para las curvas de brillo obtenidas a una tasa de calentamiento lineal de 7 $\frac{K}{S}$, obteniéndose resultados completamente distintos a los presentados para una tasa de calentamiento de 5 $\frac{K}{S}$. Los resultados de la respuesta TL en función de la dosis por el método del pico máximo para ambos picos de las curvas de brillo en el segundo lote a una tasa de calentamiento de 7 $\frac{K}{S}$ se presentan en la tabla (3.40).

	Pie	co 1	Pi	co 2
Dosis(Gy)	$I_M(nA)$	Error (%)	$I_M(nA)$	Error (%)
1.3	415486	8	375739	7
2.6	1187632	2	669187	4
5.2	3918756	2	902672	2
10.4	18497044	4	1564913	2
15.6	48110305	6	1805492	6
19.5	62159382	5	2104355	6
23.4	94983179	4	2733252	3

Tabla 3.40: Resultados obtenidos para la intensidad máxima por el método de la deconvolución en Glow-Fit para el segundo lote a una $\beta = 7 \frac{K}{S}$.

El ajuste mediante mínimos cuadrados mostró que en el primer pico se tiene nuevamente una dependencia cuadrática del máximo en intensidad en función de la dosis de irradiación, la correlación de los datos para el primer pico se muestra en la figura (3.21a), para el segundo pico se obtuvo una dependencia lineal, mostrada en la figura (3.21b).



Figura 3.20: Respuesta TL en función de la dosis por intensidad máxima para el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$. a) Intensidad máxima contra dosis de irradiación para el primer pico, se puede ver que, para el primer pico, la correlación es $I_{TL} = 156927D^2 + 390932D - 1079115$, con un $R^2 = 0.991$. b) Intensidad máxima contra dosis de irradiación para el segundo pico, se puede ver que, para el segundo pico, la correlación es $I_{TL} = 96917D - 370874$, con un $R^2 = 0.974$.

La ecuación (3.5) representa la respuesta TL en función de la dosis para el primer pico, de las curvas de brillo del segundo lote obtenidas a una tasa de calentamiento de 7 $\frac{K}{S}$,

$$I_{TL} = 156927D^2 + 390932D - 1079115 \tag{3.5}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_M$ es la intensidad máxima dada en nA. La relación entre el máximo en intensidad y la dosis de irradiación para el segundo pico es lineal y está dada por la ecuación (3.6).

$$I_{TL} = 96917D - 370874 \tag{3.6}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en Gy é I_M es la intensidad máxima dada en nA. De forma similar a como se hizo para los diferentes lotes a la misma tasa de calentamiento, se pueden comparar las variaciones de la respuesta TL en función de la dosis para ambas tasas a través de los coeficientes del término cuadrático de la ecuación (3.5) con la respuesta TL en función de la dosis de este mismo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ dados en la ecuación (3.3)

$$\frac{a_1}{a_1'} = \frac{139722}{156927} = 0.89$$

como se puede ver esto representa una variación en la respuesta TL en función de la dosis entre ambos lotes. La comparación para el segundo pico se lleva a cabo a través del coeficiente del término lineal de las ecuaciones (3.6) y (3.4)

$$\frac{b_1}{b_1'} = \frac{96917}{143259} = 0.67$$

Esto viene a recaer en el hecho de que a mayor tasa de calentamiento el pico máximo disminuye. Estos últimos resultados demuestran que para el método del pico máximo ocurren cambios significativos en las ecuaciones de respuesta TL en función de la dosis al cambiar la tasa de calentamiento.

Determinación de la respuesta TL en función de la dosis por el área bajo el pico

Los resultados de la respuesta TL en función de la dosis usando el área bajo el pico para el primer lote se presentan en la tabla (3.41), en esta tabla se puede ver que las incertidumbres crecen para el primer pico con respecto a las presentadas en la tabla (3.38), y que para el segundo pico las incertidumbres relativas disminuyen. En la figura (3.15) se muestran los resultados de la respuesta TL en función de la dosis para ambos picos de la curva de brillo del BeO: Mg, Si.

	Pice	o 1	Pic	eo 2
Dosis(Gy)	$I_{TL} (nC)$	Error (%)	$I_{TL} (nC)$	Error (%)
1.3	5684772	9	15116876	4
2.6	23540293	7	23271809	5
5.2	138638243	4	46022043	2
10.4	401281597	5	71371312	6
15.6	733123785	3	107166970	4
23.4	1799352600	4	167097085	4

Tabla 3.41: Resultados obtenidos para el área bajo la curva por el método de la deconvolución en Glow-Fit para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

En la figura (3.22a) se presentan los resultados de la respuesta TL en función de la dosis para el primer pico, donde se puede ver que por el método del área bajo la curva también se obtiene una correlación cuadrática de la respuesta TL en función de la dosis de irradiación, con una ecuación de



Figura 3.21: Respuesta TL en función de la dosis por área bajo la curva para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Respuesta TL contra dosis de irradiación para el primer pico, la correlación es $I_{TL} = 3268553D^2 - 1214930D + 19667240$, con un $R^2 = 0.994$. b) Respuesta TL contra dosis de irradiación para el segundo pico, la correlación es $I_{TL} = 6728983D + 6066764$, con un $R^2 = 0.994$.

respuesta TL en función de la dosis dada por la ecuación (3.7).

$$I_{TL} = 3268553D^2 - 1214930D + 19667240 \tag{3.7}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_{TL}$ es la respuesta TL dada en nC. El segundo pico exhibe una dependencia lineal de la respuesta TL con respecto a la dosis de irradiación, con una ecuación dada por (3.8), se puede ver que esta expresión tiene coeficientes distintos a la ecuación obtenida por el método del máximo en intensidad, aunque ambas presentan el comportamiento típico de un dosímetro TL.

$$I_{TL} = 6728983D + 6066764 \tag{3.8}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_{TL}$ es la respuesta TL dada en nC. Los resultados de respuesta TL en función de la dosis por el método del área bajo la curva para el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ se muestran en la tabla (3.42), los ajustes por mínimos cuadrados para encontrar las ecuaciones se realizaron en 'OriginPro' versión '9.0, y los resultados de estas se muestran en la figura (3.23)

Para el primer pico del segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ se encuentra una correlación cuadrática de la respuesta TL en función de la dosis de irradiación, la ecuación es

$$I_{TL} = 3460191D^2 + 11407325D - 11765426 \tag{3.9}$$

3.5. RESPUESTA TERMOLUMINISCENTE

	Pice	o 1	Pic	o 2
Dosis(Gy)	$I_{TL} (nC)$	Error (%)	$I_{TL} (nC)$	Error (%)
1.3	10845701	8	15524981	9
2.6	44507669	5	26002600	6
5.2	85088783	4	46693803	5
10.4	586500000	5	72795641	2
15.6	1015000000	6	105500000	5
19.5	1395000000	5	134500000	6
23.4	2220000000	2	169000000	3

Tabla 3.42: Resultados obtenidos para el área bajo la curva por el método de la deconvolución en Glow-Fit para el segundo lote a $\beta = 5\frac{K}{S}$.



Figura 3.22: Respuesta TL en función de la dosis por área bajo la curva para el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Respuesta TL contra dosis de irradiación para el primer pico, la correlación es $I_{TL} = 3460191D^2 + 11407325D - 11765426$, con un $R^2 = 0.986$. b) Respuesta TL contra dosis de irradiación para el segundo pico, la correlación es $I_{TL} = 6639792D - 7444755$, con un $R^2 = 0.993$.

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_{TL}$ es la respuesta TL dada en nC. Mientras que para el segundo pico se encuentra una respuesta lineal de la respuesta TL en función de la dosis de irradiación, la correspondiente ecuación es

$$I_{TL} = 6639792D - 7444755 \tag{3.10}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_{TL}$ es la respuesta TL dada en nC. Nuevamente se puede hacer una comparación entre el coeficiente del término cuadrático de la ecuación (3.7) que nos representa la respuesta TL en función de la dosis por área bajo la curva en el primer lote y el coeficiente del término cuadrático en la ecuación (3.9) con lo cual tenemos que

$$\frac{a_1}{a_1'} = \frac{3268553}{3460191} = 0.95$$

el resultado anterior muestra que para el primer pico el método del área bajo la curva ofrece menores desviaciones que aquellas obtenidas por el método de la intensidad máxima, donde este coeficiente era de 0.86. Comparando los coeficientes obtenidos mediante el método del área bajo la curva para el primer y segundo lote dados en las ecuaciones (3.8) y (3.10), tenemos que

$$\frac{b_1}{b_1'} = \frac{6639792}{6728983} = 0.99$$

esto muestra que no existen variaciones significativas en la respuesta TL en función de la dosis para el segundo pico al pasar de un lote a otro que implica pasar de condiciones experimentales completamente distintas, descritas en la sección anterior. Las comparaciones entre los dos métodos de obtención de la respuesta TL en función de la dosis apuntan a que el método del área bajo la curva ofrece la forma más apropiada de realizar esta determinación en ambos picos del BeO: Mg, Si y la comparación entre los factores de las ecuaciones de respuesta TL en función de la dosis entre ambos picos muestra que existe una menor desviación de estos valores para el segundo pico de la curva de brillo del BeO: Mg, Si y además se tiene que este pico ofrece una respuesta lineal de la respuesta TL en función de la dosis de irradiación.

La obtención de la respuesta TL en función de la dosis mediante el método del área bajo la curva para una tasa de calentamiento de 7 $\frac{K}{S}$ se presenta en la tabla (3.43), la correlación de la respuesta TL en función de la dosis de irradiación se muestra en la figura (3.24), donde se ve que nuevamente se tiene una correspondencia cuadrática para el primer pico, mientras que para el segundo se vuelve a obtener una correlación lineal.

Para la obtención de la respuesta TL en función de la dosis por el método del área bajo curva en el primer pico del segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$ se obtiene una respuesta lineal dada por la ecuación (3.11)

$$I_{TL} = 3561465D^2 + 20512600D - 51691908 \tag{3.11}$$

3.5. RESPUESTA TERMOLUMINISCENTE

	Pico 1		Pic	o 2
Dosis(Gy)	$I_T L (nC)$	Error (%)	$I_{TL} (nC)$	Error (%)
1.3	12263029	7	13814612	8
2.6	33562429	2	24665485	5
5.26	105500000	3	34427234	3
10.4	484500000	2	73005193	4
15.6	1265000000	6	86281630	7
19.5	1645000000	5	120000000	4
23.4	2375000000	7	157000000	6

Tabla 3.43: Resultados obtenidos para el área bajo la curva por el método de la deconvolución en Glow-Fit para el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$.



Figura 3.23: Respuesta TL en función de la dosis por área bajo la curva para el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$. a) Respuesta TL contra dosis de irradiación para el primer pico, la correlación es $I_{TL} = 3561465D^2 + 20512600D - 51691908$, con un $R^2 = 0.992$. b) Respuesta TL contra dosis de irradiación para el segundo pico, la correlación es $I_{TL} = 6072289D - 5079368$, con un $R^2 = 0.972$.

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_{TL}$ es la respuesta TL dada en nC. La correlación para el segundo pico se muestra en la figura (3.33), donde se ve nuevamente que existe una correspondencia lineal entre la respuesta TL y la dosis de irradiación, la ecuación es

$$I_{TL} = 6072289D - 5079368 \tag{3.12}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_{TL}$ es la respuesta TL dada en nC. Si se compara el coeficiente del término cuadrático de la ecuación (3.9) con el de la ecuación (3.11), se encuentra que

$$\frac{a_1}{a_1'} = \frac{3460191}{3561455} = 0.97$$

lo cual nos dice que la señal TL aumenta ligeramente con la tasa de calentamiento en el primer pico, sin embargo, se puede ver que existe menor variación con el método del área bajo la curva que con el método del máximo en intensidad. Análogamente se pude hacer este mismo análisis para el segundo pico, comparando las pendientes de las ecuaciones lineales (3.12) y (3.10)

$$\frac{b_1}{b_1'} = \frac{6072289}{6639792} = 0.91$$

se puede ver que nuevamente existe una diferencia significativa por ambas tasas de calentamiento, sin embargo, esto no apunta a que alguna de las tasas sea mejor para la obtención de la respuesta TL en función de la dosis, lo que si se debe notar es que el desvió de los valores del factor de comparación es menor cuando se utiliza el método del área bajo la curva, tanto para la comparación entre lotes como para la comparación entre distintas tasas de calentamiento.

3.5.2. Respuesta TL en función de la dosis usando 'tgcd' en 'R'

Como se explicó en las secciones precedentes, la función 'tgcd' en 'R' utiliza la aproximación hecha por Kitis et al. en 1998 [32] y Pagonis et al. en 2006 de la ecuación (1.58) para ajustar curvas TL con cinéticas de orden general a una curva de brillo experimental. Tales curvas TL tienen 4 parámetros libres que son; la intensidad máxima (I_m) , la temperatura máxima (T_m) , la energía (E) y el factor de simetría (μ_g) , esto permite al usuario emplear el programa en procedimientos de dosimetría rutinaria, ya que es posible obtener la ecuación de respuesta TL en función de la dosis del dosímetro utilizando la intensidad máxima de cada pico, además el programa permite graficar cada pico de forma individual debido a que nos proporciona el conjunto de datos a través de un archivo de salida en formato 'csv', con estos datos es posible obtener la ecuación de respuesta TL en función de la dosis por área bajo el pico ya que se puede emplear cualquier programa para calcular el área de los picos de forma individual, en nuestro caso se empleó la función 'Peak analyzer' de 'Origin' versión 9.0 para realizar dicha tarea.

Obtención de la respuesta TL en función de la dosis por intensidad máxima

La obtención de la respuesta TL en función de la dosis se realizó de la misma forma que para el caso de 'Glow-Fit', los datos de la determinación por intensidades máximas para el primer lote se resumen en la tabla (3.44) y las correspondientes curvas de respuesta TL en función de la dosis se muestran en la figura (3.25).

	Pico 1		Pi	co 2
Dosis(Gy)	$I_M(nA)$	Error (%)	$I_M(nA)$	Error (%)
1.3	226783	6	415706	5
2.6	933047	5	634411	4
5.2	4837180	5	1089500	3
10.4	16389109	5	1994242	4
15.6	31765418	4	2688988	5
23.4	50474993	4	3924485	6

Tabla 3.44: Resultados obtenidos para la intensidad máxima por el método de deconvolución 'tgcd' en 'R' para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.



Figura 3.24: Respuesta TL en función de la dosis por intensidad máxima para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Intensidad máxima contra dosis de irradiación para el primer pico, la correlación es $I_{TL} = 25898D^2 + 1722759D - 3393025$, con un $R^2 = 0.996$, b) Intensidad máxima contra dosis de irradiación para el segundo pico, la correlación es $I_{TL} = 158130D + 249457$, con un $R^2 = 0.999$.

Para el primer pico se encuentra una respuesta cuadrática de la intensidad máxima en función de la dosis de irradiación, esta correlación se muestra en la figura (3.25a), la ecuación para el primer pico es

$$I_M = 25898D^2 + 1722759D - 3393025 \tag{3.13}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_M$ es la intensidad máxima dada en nA. Para el segundo pico la relación que existe entre la dosis de irradiación y la intensidad máxima de la curva TL es lineal (Figura (3.25b)) y está dada por la siguiente ecuación (3.13)

$$I_M = 158130D + 249457. \tag{3.14}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_M$ es la intensidad máxima dada en nA. Los resultados de la respuesta TL en función de la dosis por el método del pico máximo para el segundo lote ($\beta = 5\frac{K}{S}$), ajustados mediante curvas TL de una cinética de orden general a través de 'tgcd' en 'R' se presentan en la tabla (3.45), las correspondientes correlaciones en la figura (3.26).

	Pie	co 1	Pi	co 2
Dosis(Gy)	$I_M(nA)$	Error (%)	$I_M(nA)$	Error (%)
1.3	387467	3	417629	2
2.6	1647451	4	704409	5
5.2	3287731	6	1240123	3
10.4	22543330	5	1862976	1
15.6	39488384	1	2556626	2
19.5	55625092	1	3145773	2
23.4	88183332	5	3995272	5

Tabla 3.45: Resultados obtenidos para el máximo en intensidad por el método de la deconvolución en 'tgcd' en 'R' para el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

El resultado de la respuesta TL en función de la dosis por intensidades máximas del primer pico en el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ es una dependencia cuadrática del pico máximo en función de la dosis de irradiación (Figura (3.26a)) y está dada por la siguiente ecuación

$$I_M = 143360D^2 + 313146D - 250705. (3.15)$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en Gy é I_M es la intensidad máxima dada en nA. Esta ecuación es válida en el intervalo de dosis de 1.3 Gy a 23.4 Gy. El resultado de la obtención de la respuesta TL en función de la dosis por el método de la intensidad máxima para el segundo pico es una respuesta lineal de la intensidad máxima en función de la dosis de irradiación (Figura (3.26b)) y está dada por la siguiente ecuación



Figura 3.25: Respuesta TL en función de la dosis por intensidad máxima para el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Intensidad máxima contra dosis de irradiación para el primer pico, la correlación es $I_{TL} = 143360D^2 + 313146D -$ 250705 con un $R^2 = 0.992$, b) Intensidad máxima contra dosis de irradiación para el segundo pico, la correlación es $I_{TL} = 152068D + 294496$ con un $R^2 = 0.993$.

$$I_{TL} = 152068D + 294496. \tag{3.16}$$

donde *D* representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_M$ es la intensidad máxima dada en *nA*. Comparando entre si los coeficientes de las ecuaciones cuadráticos de (3.15) y (3.13) para el primer pico, vemos que

$$\frac{a_1}{a_1'} = \frac{25898}{143360} = 0.18$$

lo cual muestra ciertas discrepancias para este pico entre ambos lotes. Para el segundo pico, tomemos la ecuación (3.16) y (3.14) y realicemos el mismo análisis

$$\frac{b_1}{b_1'} = \frac{152068}{158130} = 0.97$$

Este último resultado viene a confirmar la ventaja que se puede tener al emplear el segundo pico de la curva de brillo del BeO: Mg, Si en procedimientos de dosimetría termoluminiscente de radiación ionizante.

Para el segundo lote se emplearon dos tasas de calentamiento para obtener las curvas de respuesta TL en función de la dosis y calcular los parámetros TL, los resultados por intensidades máximas para el primer y segundo pico de las curvas de brillo obtenidas a una $\beta = 7\frac{K}{S}$ para el segundo lote se resumen en la tabla (3.46) y las correspondientes curvas de respuesta TL en función de la dosis en la figura (3.27).

	Pic	o 1	Pi	co 2
Dosis(Gy)	$I_M (nA)$	Error (%)	$I_M(nA)$	Error (%)
1.3	307317	2	442423	2
2.6	1114951	3	716786	3
5.2	3926114	4	909594	3
10.4	18549440	4	1596885	3
15.6	48377402	6	1947173	3
19.5	71140833	5	2227519	4
23.4	109859074	5	2692772	2

Tabla 3.46: Resultados obtenidos para el máximo en intensidad por el método de la deconvolución en 'tgcd' en 'R' para el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$.



Figura 3.26: Respuesta TL en función de la dosis por intensidades máximas para el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$. a) Intensidad máxima contra dosis de irradiación para el primer pico, la correlación es $I_{TL} = 220091D^2 - 535815D -$ 812718 con un $R^2 = 0.998$, b) Intensidad máxima contra dosis de irradiación para el segundo pico, la correlación es $I_{TL} = 96999 + 423890$ con un $R^2 = 0.99$.

Para el primer pico se encuentra una dependencia cuadrática entre la intensidad máxima y la dosis de irradiación, esta dependencia se expresa a través de la siguiente ecuación

$$I_M = 220091D^2 - 535815D - 812718 \tag{3.17}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en Gy é I_M es la intensidad máxima dada en nC. para el segundo pico se encuentra una correlación lineal entre la intensidad máxima y la dosis de irradiación, dada por la siguiente ecuación

$$I_M = 96999D + 423890 \tag{3.18}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en Gy é I_M es la intensi-

dad máxima dada en nC. comparando estos dos últimos resultados con las expresiones (3.15) y (3.16) puede verse que para el primer pico

$$\frac{a_1}{a_1'} = \frac{143360}{220091} = 0.65$$

este resultado nos da referencia del gran desvió que ocurre en las intensidades máximas al aumentar la tasa de calentamiento, de hecho, si se compara el coeficiente del término lineal de (3.15) y (3.17) puede verse que difieren en el signo, de hecho esto nos indica que la señal TL disminuye al aumentar la tasa de calentamiento. Para el segundo pico, se encuentra lo siguiente

$$\frac{b_1}{b_1'} = \frac{96999}{152068} = 0.64$$

este resultado nos dice que la intensidad TL cambia drásticamente al pasar de una $\beta = 5\frac{K}{S}$ a una de $7\frac{K}{S}$. Por lo tanto, si los resultados de estas mediciones fueran empleados en procedimientos de dosimetría será necesario indicar la tasa de calentamiento a la cual se realicen dichas mediciones.

Obtención de la respuesta TL en función de la dosis por área bajo la curva

Como se indicó a inicios de esta sección, la obtención de la respuesta TL en función de la dosis por área a través de 'tgcd' en 'R' se realizó mediante el cálculo del área bajo la curva de las dos componentes TL (primer y segundo pico) obtenidas mediante deconvolución, el área fue calculada empleando la herramienta 'Peak analyzer', de 'OriginPro' versión 9.0.

	Pice	o 1	Pic	eo 2
Dosis(Gy)	$I_{TL} (nC)$	Error (%)	$I_{TL} (nC)$	Error (%)
1.3	11295198	4	25075283	2
2.6	44468090	5	38810677	3
5.2	225000000	5	79900000	3
10.4	754000000	3	134000000	5
15.6	1590000000	2	223000000	4
23.4	3160000000	5	314000000	2

Tabla 3.47: Resultados obtenidos para el área bajo la curva por el método de la deconvolución en 'tgcd' en 'R' para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$.



Figura 3.27: Respuesta TL en función de la dosis por área bajo la curva para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Área bajo la curva contra dosis de irradiación para el primer pico, la correlación es $I_{TL} = 4410575D^2 + 34810419D - 63634552$, con un $R^2 = 0.9995$, b) Área bajo la curva contra dosis de irradiación para el segundo pico, la correlación es $I_{TL} = 13241546D + 6710098$, con un $R^2 = 0.997$.

Los resultados obtenidos para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ se muestran en la tabla (3.47), los resultados del ajuste polinómico y lineal realizados en el primer y segundo pico respectivamente se muestran en la figura (3.28). En la figura (3.28a) se muestra que el primer pico exhibe un comportamiento cuadrático de la respuesta TL en función de la dosis de irradiación, mientras que en el segundo pico (Figura (3.28b)) la respuesta es lineal, las ecuaciones (3.19), y (3.20) representan esta este comportamiento.

$$I_{TL} = 4410575D^2 + 34810419D - 63634552 \tag{3.19}$$

$$I_{TL} = 13241546D + 6710098 \tag{3.20}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_{TL}$ es la respuesta TL dada en nC. Estas ecuaciones representan la respuesta TL de la primera y segunda componente de la curva de brillo del BeO : Mg, Si en función de la dosis de irradiación, las figuras (3.29a) y (3.29b) representan la evolución de la primera y segunda componente respectivamente conforme la dosis de irradiación incrementa.

Los resultados del segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$ se presentan en la tabla (3.48), los resultados de la respuesta TL en función de la dosis se muestran en la figura (3.30).

El resultado de la respuesta TL en función de la dosis en la primera componente se muestra en la figura (3.30a), donde se observa un comportamiento parabólico dado por la ecuación (3.21)

$$I_{TL} = 5306221D^2 + 38415147D - 50920783 \tag{3.21}$$



Figura 3.28: Componentes TL a distintas dosis de irradiación para el primer lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Evolución de la primera componente TL de la curva de brillo al aumentar la dosis de irradiación, b) Evolución de la segunda componente TL de la curva de brillo al aumentar la dosis de irradiación.

	Pice	o 1	Pic	o 2
Dosis(Gy)	$I_{TL} (nC)$	Error (%)	$I_{TL} (nC)$	Error (%)
1.3	18845360	4	27105034	5
2.6	77669341	3	39243050	1
5.2	147888263	4	73755332	1
10.4	1243220407	5	115988590	4
15.6	1767328786	2	177456490	3
19.5	2442208512	1	217036306	3
23.4	3919500814	5	256186798	6

Tabla 3.48: Resultados obtenidos para el área bajo la curva por el método de la deconvolución en 'tgcd' en 'R' para el segundo lote para una $\beta = 5\frac{K}{S}$.

donde *D* representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_{TL}$ es la respuesta TL dada en nC. Comparando el coeficiente del término cuadrático de las ecuaciones (3.19) y (3.21) se observa que

$$\frac{a_1}{a_1'} = \frac{4410575}{5306221} = 0.83$$

Este resultado muestra un desvió considerable entre ambos lotes, lo cual es de esperarse ya que se emplearon condiciones experimentales diferentes. Para la segunda componente la correlación entre la respuesta TL y la dosis de irradiación se muestra en la figura (3.30b), donde se observa un comportamiento lineal dado por la ecuación (3.22)

$$I_{TL} = 10362549D - 14070392 \tag{3.22}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_{TL}$ es la respuesta TL dada en nC. Comparando el coeficiente del término lineal de las ecuaciones (3.22) y (3.20) se observa que

$$\frac{b_1}{b_1'} = \frac{10362549}{13241546} = 0.80$$

lo cual nos da un desvió considerable entre los coeficientes lineales de los dos lotes a la misma tasa de calentamiento. Para la primera y segunda componente la evolución de las curvas TL en función de la dosis de irradiación se muestran en las figuras (3.31a) y (3.31b). Los resultados del segundo lote



Figura 3.29: Respuesta TL en función de la dosis por área bajo la curva para el segundo lote a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Área bajo la curva contra dosis de irradiación para el primer pico, la correlación es $I_{TL} = 5306221D^2 +$ 38415147D - 50920783, con un $R^2 = 0.984$, b) Área bajo la curva contra dosis de irradiación para el segundo pico, la correlación es $I_{TL} = 10362549D -$ 14070392, con un $R^2 = 0.998$.

a una $\beta = 7\frac{K}{S}$, se muestran en la tabla (3.49), las correlaciones dadas en las figuras (3.32a) y (3.32b) para el primer y segundo pico respectivamente mostraron un comportamiento cudrático para el primer pico, y un comportamiento lineal para el segundo. Para el primer pico la respuesta TL fue parabólica, la correlación se muestra en la figura (3.32a) la correspondiente ecuación es

$$I_{TL} = 8137256D^2 + 9616264D - 43487214 \tag{3.23}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en $Gy \in I_{TL}$ es la respuesta TL dada en nC. Nuevamente podemos hacer una comparación para observar las variaciones ocurridas al cambiar la tasa de irradiación, comparando los coeficientes de los términos cuadráticos de la ecuación (3.23) con (3.21) vemos que

$$\frac{a_1}{a_1'} = \frac{5306221}{8137256} = 0.65$$



Figura 3.30: Componentes TL de la curva de brillo del BeO : Mg, Si a distintas dosis de irradiación para el segundo lote estudiado a una $\beta = 5\frac{K}{S}$. a) Evolución de la primera componente TL de la curva de brillo al aumentar la dosis de irradiación, b) Evolución de la segunda componente TL de la curva de brillo al aumentar la dosis de irradiación.

	Pice	o 1	Pic	eo 2
Dosis(Gy)	$I_{TL} (nC)$	Error (%)	$I_{TL} (nC)$	Error (%)
1.3	14801854	5	27976779	2
2.6	53482115	4	45890117	6
5.2	184931734	2	59812440	5
10.4	846565244	2	115382315	2
15.6	2173626520	3	131833042	2
19.5	3287087821	5	158857420	5
23.4	4584189860	5	193696956	5

Tabla 3.49: Resultados obtenidos para el área bajo la curva por el método de la deconvolución en 'tgcd' en 'R' para el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$.

se aprecia un gran desvió, que es muy consistente con el obtenido para la comparación a diferentes tasas, pero para el método del pico máximo. Para el segundo pico la correlación es lineal, la ecuación que representa esta correlación es la siguiente

$$I_{TL} = 7136984D + 25252046 \tag{3.24}$$

donde D representa la dosis de irradiación dada en Gy é I_M es la respuesta TL dada en nC. Haciendo nuevamente una comparación de los resultados obtenidos para el segundo pico por el método del área bajo la curva a distintas tasas de calentamiento podemos ver que

$$\frac{b_1}{b_1'} = \frac{7136984}{10362549} = 0.68$$



Figura 3.31: Respuesta TL en función de la dosis por área bajo la curva para el primer lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$. a) Área bajo la curva contra dosis de irradiación para el primer pico, la correlación es $I_{TL} = 8137256D^2 + 9616264D - 43487214$, con un $R^2 = 0.998$. b) Área bajo la curva contra dosis de irradiación para el segundo pico, la correlación es $I_{TL} = 7136984D + 25252046$, con un $R^2 = 0.99$.

con esto se puede ver que la caída en la señal de un lote a otro es de aproximadamente el 30%. La evolución de las curvas TL en función de la dosis de irradiación se presenta en las figuras (3.33a) y (3.33b) para el primer y segundo pico respectivamente.



Figura 3.32: Componentes TL a distintas dosis de irradiación para el segundo lote a una $\beta = 7\frac{K}{S}$. a) Evolución de la primera componente TL de la curva de brillo al aumentar la dosis de irradiación, b) Evolución de la segunda componente TL de la curva de brillo al aumentar la dosis de irradiación.

Resumen de resultados de la respuesta TL en función de la dosis

En esta sección se hace un resumen de los resultados obtenidos anteriormente, en la tabla (3.50) se resumen las respuestas TL en función de la dosis por intensidades máximas para el primer y segundo lote empleando deconvolución en Glow-Fit, en la tabla (3.51) se resumen las respuestas TL en función de la dosis por area bajo la curva para el primer y segundo lote empleando deconvolución Glow-Fit, en la tabla (3.52) se resumen los resultados para el primer y segundo lote de las respuestas TL en función de la dosis por intensidad maxima empleando deconvolución 'tgcd' en 'R', en la tabla (3.53) se resumen los resultados de las respuestas TL en función de la dosis para el primer y segundo lote por area bajo la curva empleando deconvolución 'tgcd' en 'R'.

Lote\tasa	Pico 1	Pico 2
$\left(\frac{K}{S}\right)$		
$1\backslash 5$	$I_M = 120764D^2 + 95086D +$	$I_M = 150776D + 277149$
	350440	
$2 \backslash 5$	$I_M = 139722D^2 +$	$I_M = 143259D + 301562$
·	364135D - 291927	
$2 \backslash 7$	$I_M = 156927D^2 +$	$I_M = 96917D - 370874$
	390932D - 1079115	

Tabla 3.50: Resumen de calibraciones por intensidades máximas mediante Glow-Fit.

Lote\tasa	Pico 1	Pico 2
$\left(\frac{K}{S}\right)$		
$1\backslash 5$	$I_{TL} = 3268553D^2 -$	$I_{TL} = 6728983D + 6066764$
	1214930D + 19667240	
$2\backslash 5$	$I_{TL} = 3460191D^2 +$	$I_{TL} = 6639792D - 7444755$
	11407325D - 11765426	
$2\backslash 7$	$I_{TL} = 3561465D^2 +$	$I_{TL} = 6072289D - 5079368$
	20512600D - 51691908	

Tabla 3.51: Resumen de calibraciones por área bajo la curva por Glow-Fit.

Lote\tasa	Pico 1	Pico 2
$\left(\frac{K}{S}\right)$		
$1\backslash 5$	$I_M = 25898D^2 +$	$I_M = 158130D + 249457$
	1722759D - 3393025	
$2\backslash 5$	$I_M = 143360D^2 +$	$I_M = 152068D + 294496$
	313146D - 250705	
$2\backslash 7$	$I_M = 220091D^2 -$	$I_M = 96999 + 423890$
	535815D - 812718	

Tabla 3.52: Resumen de calibraciones por intensidades máximas mediante 'tgcd' en 'R'.

Lote\tasa	Pico 1	Pico 2
$\left(\frac{K}{S}\right)$		
$1\backslash 5$	$I_{TL} = 4410575D^2 +$	$I_{TL} = 13241546D + 6710098$
	34810419D - 63634552	
$2\backslash 5$	$I_{TL} = 5306221D^2 +$	$I_{TL} = 10362549D -$
	38415147D - 50920783	14070392
$2\backslash 7$	$I_{TL} = 8137256D^2 +$	$I_{TL} = 7136984D + 25252046$
·	9616264D - 43487214	

Tabla 3.53: Resumen de calibraciones por área bajo la curva empleando 'tgcd' en 'R'.

Los resultados de las respuestas TL en función de la dosis hacen notar la importancia del diseño experimental, es decir si se buscara una aplicación específica para el dosímetro será necesario calibrar el dosímetro con las condiciones experimentales previstas en dicha aplicación de tal forma que se simule de la mejor manera las condiciones de operación del dosímetro, tales como humedad, exposición a la luz, condiciones de presión y temperatura, intensidad y energía de la fuente, etc.

Capítulo 4

Conclusiones y perspectivas

En este trabajo se llevó a cabo la caracterización estructural del óxido de berilio (BeO:Mg, Si) mediante difracción de rayos X (XRD), encontrándose que este material presenta una estructura hexagonal (wurtzita hexagonal) con parámetros de red de a=2.69790 y c=4.37720, además se realizaron estudios de microscopia electrónica de barrido con la que se determinó que se tenían trazas de magnesio y silicio con un porcentaje en masa de 0.11 y 0.21% respectivamente, tales impurezas podrían ser las causantes de la emisión termoluminiscente y fotoluminiscente. además se realizaron estudios de fotoluminiscencia (fluorescencia) en pastillas de óxido de berilio irradiadas y sin irradiar, encontrándose mediante deconvolución que para una $\lambda_{exc}=330$ nm se tienen 4 bandas de emisión centradas en 404 nm, 430 nm, 468 nm y 545 nm estas bandas de emisión se presentan tanto en las pastillas irradiadas y sin irradiar, aunque en las pastillas irradiadas se presenta una banda de emisión extra centrada en 416 nm, mientras que para el espectro de excitación a una λ_0 =400 nm se tienen 2 bandas de excitación centradas en 331 nm y 307 nm, estas bandas se presentan en muestras irradiadas y sin irradiar, sin embargo, en muestras irradiadas se presentan 3 bandas centradas en 297 nm, 316 nm y 334 nm. La presencia de una nueva banda en los espectros de emisión y excitación en muestras irradiadas es el principal efecto producido por la radiación, sin embargo, no es el único, ya que también se observa el decaimiento de la señal en ambos espectros por causa de la irradiación, la naturaleza de estos fenómenos es aún desconocida, pero podría estar asociada con la formación de nuevos niveles de trampa por causa de la radiación o al desdoblamiento de la banda de emisión centrada en 404 nm. El decaimiento de la señal por causa de la radiación podría estar asociado a la producción de pares electrón hueco que causan una disminución del número de electrones disponibles para realizar transiciones ópticas.

Una de las principales características que hace al *BeO* un material atractivo para posibles aplicaciones como dosímetro TL es su número atómico efectivo, casi idéntico al de del tejido blando humano, esta fue una de las principales motivaciones para el desarrollo de este trabajo. En este trabajo se estudió la curva de brillo de muestras de *BeO* obtenida después de la irradiación con ravos gamma, y separadas en dos lotes (condiciones experimentales distintas). encontrándose mediante los 3 métodos estudiados (Chen, Glow-Fit, 'tgcd' en 'R') que las curvas de brillo presentan dos picos centrados en aproximadamente 475 K y 585 K para una tasa de calentamiento de 5 $\frac{K}{s}$, mientras que para una tasa de calentamiento de 7 $\frac{K}{s}$ las temperaturas son 485 K y 595 K, este corrimiento en temperatura podria estar asociado al incremento en la tasa de calentamiento, o a variaciones en la dosis recibida, lo cual puede causar un incremento en la temperatura debido un incremento en la dosis de radiación. Además, se determinó por el método de Chen que para ambos lotes y ambas tasas de calentamiento los dos picos presentan una cinética de orden intermedio de aproximadamente 1.1 en todo el intervalo de dosis estudiado. Con 'tgcd' en 'R' se encontró que la cinética para el primer pico sufre cambios al incrementar la dosis, pasando de una cinética de 1.04 (a 2.6 Gy) a una de 1.2 (a 23.4 Gy), mientras que para el segundo pico la cinética es de aproximadamente 1.0 para el intervalo de irradiación de 1.3 Gy hasta 19.5 Gy. Para la energía de activación se encontró que, en el primer pico, este parámetro cambia al variar la dosis, encontrándose que esta varía desde $0.9 \ eV$ a $1.1 \ eV$, mientras que para el segundo pico la energía presenta una menor variación que va de 1.1 eV a 1.2 eV, estos resultados se obtuvieron para ambas tasas de calentamiento, estos valores de la energía muestran que el segundo pico es más estable térmicamente (se encuentra a mayor profundidad) que el primer pico. El factor de frecuencia varia de un método a otro, encontrándose en algunos casos un comportamiento cuadrático de este parámetro en función de la dosis, sin embargo se puede considerar que para Glow-Fit estas variaciones se centran en aproximadamente $1 \times 10^{11} S^{-1}$ y $1 \times 10^{08} S^{-1}$ para el primer y segundo pico respectivamente, mientras que con 'tgcd' en 'R' los valores se centran en $1 \times 10^{10} S^{-1}$ y $1 \times 10^{09} S^{-1}$ para el primer v segundo pico respectivamente, estos resultados muestran que para el segundo pico la tasa de decrecimiento de electrones es más lenta que para el primero, lo cual está en acuerdo con los resultados de la energía.

CAPÍTULO

La deconvolución por 'Glow-Fit' y 'tgcd' en 'R' permitió el estudio de la respuesta TL en función de la dosis para cada componente de la curva de brillo de forma independiente, encontrándose que, para todas las condiciones estudiadas, el primer pico presenta una relación cuadrática de la respuesta TL en función de la dosis, mientras que para el segundo se tiene una respuesta lineal en el intervalo de dosis de 1.3 Gy a 23.4 Gy. La determinación de la respuesta TL en función de la dosis se realizó también mediante el máximo en respuesta TL en contrándose las mismas relaciones. Los parámetros calculados y la respuesta TL en función de la dosis muestran las grandes ventajas presentes en el segundo pico para posibles aplicaciones en dosimetría.

La aparición de una nueva banda en el espectro fotoluminiscente y el decrecimiento de este, por efecto de la radiación no se ha logrado entender del todo, esta banda de emisión podría tener muchos orígenes, podría ser causado por el desdoblamiento de un nivel cuántico o por la creación o formación de defectos por causa de la radiación gamma, y por lo tanto se pretenden realizar estudios más profundos de resonancia paramagnética de espín y fotoluminiscencia para tener una idea más acertada de lo que ocurre en el material por efecto de la radiación. En un futuro se pretende aplicar los métodos presentados en este estudio para la dosimetría en maniquís, además se pretende que dichos estudios sean aplicados al monitoreo de radiación ionizante en pacientes y POE en las diferentes áreas de la física médica.

En el futuro también se pretende estudiar el tipo y distribución de trampas que dan origen a la luminiscencia y termoluminiscencia del BeO: Mg, Si, para poder realizar simulaciones Montecarlo o modelos de deconvolución basados en distintos tipos de distribuciones de trampas que nos ayuden a obtener una conclusión más precisa de los fenómenos y mecanismos involucrados en la emisión de luminiscencia en el BeO: Mg, Si.

Apéndice A

Curvas de brillo del primer lote

Las gráficas empleadas en el análisis de la respuesta TL en función de la dosis de irradiación, así como en la determinación de los parámetros TL para el diseño experimental del primer lote se muestran en las figuras A.1, A.2 y A.3, estas curvas de brillo fueron obtenidas por empleo de una tasa de calentamiento de 5 $\frac{K}{s}$ en un intervalo de temperatura de 303 a 633 K con un precalentamiento previo de 303 K durante 5 s.



(a) Curvas de brillo obtenidas a 1.3 Gy (b) Curvas de brillo obtenidas a 2.6 Gy

Figura A.1: Curvas de brillo experimentales para el primer lote obtenidas por empleo de una tasa de calentamiento lineal de 5 $\frac{K}{s}$ en un intervalo de temperatura de 303 a 633 K.



(a) Curvas de brillo obtenidas a 5.2 Gy (b) Curvas de brillo obtenidas a 10.4 Gy

Figura A.2: Curvas de brillo experimentales para el primer lote obtenidas por empleo de una tasa de calentamiento lineal de 5 $\frac{K}{s}$ en un intervalo de temperatura de 303 a 633 K.



(a) Curvas de brillo obtenidas a 15.6 Gy (b) Curvas de brillo obtenidas a 23.4 Gy

Figura A.3: Curvas de brillo experimentales para el primer lote obtenidas por empleo de una tasa de calentamiento lineal de 5 $\frac{K}{s}$ en un intervalo de temperatura de 303 a 633 K.

Apéndice B

Curvas de brillo del segundo lote

Las gráficas empleadas en el desarrollo de este trabajo, para el diseño experimental del segundo lote se muestran en las figuras B.1, B.2, B.3, B.4, B.5, B.6, B.7 y B.8 estas curvas de brillo fueron obtenidas por empleo de dos tasas de calentamiento de 5 y 7 $\frac{K}{s}$ en un intervalo de temperatura de 303 a 633 K con un precalentamiento previo de 303 K durante 5 s.





Figura B.1: Curvas de brillo experimentales para el segundo lote obtenidas por empleo de una tasa de calentamiento lineal de 5 $\frac{K}{s}$ en un intervalo de temperatura de 303 a 633 K.



(a) Curvas de brillo obtenidas a 5.2 Gy (b) Curvas de brillo obtenidas a 10.4 Gy

Figura B.2: Curvas de brillo experimentales para el segundo lote obtenidas por empleo de una tasa de calentamiento lineal de 5 $\frac{K}{s}$ en un intervalo de temperatura de 303 a 633 K.



(a) Curvas de brillo obtenidas a 15.6 Gy (b) Curvas de brillo obtenidas a 19.5 Gy

Figura B.3: Curvas de brillo experimentales para el segundo lote obtenidas por empleo de una tasa de calentamiento lineal de 5 $\frac{K}{s}$ en un intervalo de temperatura de 303 a 633 K.



Figura B.4: Curva de brillo experimental para el segundo lote obtenida por empleo de una tasa de calentamiento lineal de 5 $\frac{K}{s}$ en un intervalo de temperatura de 303 a 633 K a una dosis de irradiación de 23.4 Gy



(a) Curvas de brillo obtenidas a 1.3 Gy (b

(b) Curvas de brillo obtenidas a 2.6Gy

Figura B.5: Curvas de brillo experimentales para el segundo lote obtenidas por empleo de una tasa de calentamiento lineal de 7 $\frac{K}{s}$ en un intervalo de temperatura de 303 a 633 K.



(a) Curvas de brillo obtenidas a 5.2 Gy (b) Curvas de brillo obtenidas a 10.4 Gy

Figura B.6: Curvas de brillo experimentales para el segundo lote obtenidas por empleo de una tasa de calentamiento lineal de 7 $\frac{K}{s}$ en un intervalo de temperatura de 303 a 633 K.



(a) Curvas de brillo obtenidas a 15.6 Gy (b) Curvas de brillo obtenidas a 19.5 Gy

Figura B.7: Curvas de brillo experimentales para el segundo lote obtenidas por empleo de una tasa de calentamiento lineal de 7 $\frac{K}{s}$ en un intervalo de temperatura de 303 a 633 K.



Figura B.8: Curva de brillo experimental para el segundo lote obtenida por empleo de una tasa de calentamiento lineal de 7 $\frac{K}{s}$ en un intervalo de temperatura de 303 a 633 K a una dosis de irradiación de 23.4 Gy

Apéndice C

Factor de linealidad y procedimiento general de linealidad

Si se define la eficiencia de emisión termoluminiscente, η , como la razón entre la energía, ϵ , liberada como luz por el material, y la masa *m* multiplicada por la dosis absorbida [41]:

$$\eta = \frac{\epsilon}{mD} \tag{C.1}$$

En el intervalo donde η es una constante, se puede obtener una relación lineal entre la señal TL, M y la dosis absorbida, D:

$$M = kD \tag{C.2}$$

donde k es una constante relacionada con la sensibilidad del material a la radiación. Es importante que en cualquier aplicación de la dosimetría termoluminiscente se encuentre una relación lineal entre la emisión TL y la dosis absorbida. La zona lineal, si es que existe, es dependiente tanto del material como del equipo de se utilice como lector. Una relación típica a primer orden se puede escribir como

$$y = ax + b \tag{C.3}$$

donde x representa la dosis absorbida D recibida por el dosímetro TL, y es la intensidad de luz TL emitida por el dosímetro irradiado a la dosis D, b es la lectura TL debido al fondo intrínseco del mismo dosímetro solo recocido y no irradiado, y a se identifica como la sensibilidad absoluta del dosímetro (expresada en términos de las unidades del lector por dosis), o con el inverso del factor de calibración F_c (expresado en términos de dosis por unidad del lector). Con esto la ecuación C.3 puede ser reescrita como sigue:

$$M = \frac{1}{F_c} D + M_0 \tag{C.4}$$

donde M es la señal TL a una dosis dada y M_0 es el fondo intrínseco del dosímetro. La ecuación anterior es estrictamente valida solo para un material que tiene un factor de sensibilidad intrínseca relativa (factor de corrección individual) igual a 1, si esto no es verdad la lectura TL debe ser corregida.

Para obtener una relación de linealidad un procedimiento que puede ser empleado es el siguiente [25] [26]

- 1. Preparar un grupo de N dosimetros. Para cada detector se debe conocer el fondo individual y el factor de sensibilidad intrínseco.
- 2. Los N dosimetros son divididos en n subgrupos (n=1,2, ...,i), cada subgrupo corresponde a un nivel de dosis. Cada subgrupo debe tener 5 o mas detectores m.
- 3. Cada subgrupo se irradia usando una fuente de radiación calibrada de la misma calidad de la radiación usada para la aplicación especifica.
- 4. El intervalo de dosis empleado para irradiar los dosimetros ha de ser elegido de acuerdo con la necesidad. En cualquier caso es recomendable dar incrementos de dosis que correspondan a una escala logaritmica.
- 5. Leer todos los dosimetros en una sola sección
- 6. corregir las lecturas por fondo y por factores de sensibilidad.
- 7. Para cada subgrupo calcular el valor promedio

$$\bar{M}_i = \sum_{j=1}^m \frac{M_j}{m} \tag{C.5}$$

donde \overline{M}_i representa el valor promedio del i-ésimo subgrupo y M_j representa la lectura del j-ésimo dosimetro ya corregido por el factor de fondo y sensibilidad.

122

- 8. Graficar sobre un papel log-log el valor \overline{M}_i como funcion de la dosis.
- 9. Probar la linealidad usando metodos estadisticos.
Bibliografía

- ALBRECHT, H. O., AND MANDEVILLE, C. E. Storage of Energy in Beryllium Oxide. *Phys. Rev. 101*, 4 (1956), 1250–1252.
- [2] ALGARVE, F., AND CALDAS, L. V. E. Determination of the kinetic parameters of BeO thermoluminiscent sample using different methods. *Brazilian Journal of Radiation Sciences* 6, 2 (2018), 01–12.
- [3] ANDRES, P. Deconvolución computarizada de la curva glow de dosímetros termoluminiscentes. Aplicación en dosimetria personal y ambiental. PhD thesis, Universidad Nacional de Cuyo, 2009.
- [4] ASLAR, E., SAHINER, E., POLYMERIS, G. S., AND MERIC, N. Determination of trapping parameters in BeO ceramics in both quenched as well as reconstructed thermoluminescence glow curves using various analysis methods. *Applied Radiation and Isotopes 129* (2017), 142–151.
- [5] AZORIN, J. ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES TERMOLUMINIS-CENTES Y OPTICAS DE LOS PRINCIPALES MATERIALES DO-SIMETRICOS. PhD thesis, UAM-iztapalapa, 1993.
- [6] AZORIN, J. Preparation methods of thermoluminescence materials for dosimetric application: An overview. Applied Radiation and Isotopes 83 (2014), 187–191.
- [7] AZORÍN, J., AZORÍN, V. C., RIVERA, T., AND TORIJANO, T. Determination of the kinetic parameters of BeO using isothermal decay method. *Applied Radiation and Isotopes 108* (2016), 8–11.
- [8] AZORÍN, J., GALLEGOS, A., RIVERA, T., AZORÍN, C., AND KHAIDU-KOV. Determination of the kinetic parameters of K2YF5:Tb from isothermal decay of thermoluminescence. *Nuclear Instruments and Methods*

in Physics Research Section A: Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment 580 (2007), 177–179.

- [9] AZORÍN, J., GONZALEZ, P. R., LOZANO, I. B., RIVERA, T., AND AZORÍN, C. Development of a new thermoluminescent phosphor based on LiF:Mg,Ti. *Radiation Physics and Chemistry* 116 (2015), 74–77.
- [10] BACCI, C., BERNARDINI, P., DAMILANO, A., FURETTA, C., AND RISPOLI, B. Kinetics parameters in BeO thermoluminescent material. *J. Phys. D: Appl. Phys 22* (1989), 1751–1757.
- [11] BOS, A. J. J., PITERS, T. M., ROS, J. M. G., AND DELGADO, A. An intercomparison of glow curve analysis computer programs: II. measured Glow Curves. *Radiation Protection Dosimetry* 51, 4 (1994), 257–264.
- [12] BULUR, E., AND GOKSU, H. Y. OSL from BeO ceramics: New observations from an old materiales. *Radiation Measurements 29*, 6 (1998), 639–650.
- [13] BULUR, E., AND YELTIK, A. Optically stimulated luminiscence from BeO ceramics: An LM-OSL study. *Radiation Measurements* 45, 1 (2010), 29–34.
- [14] CHEN, R. Glow Curves with General Order Kinetics. J. Electrochem. Soc. 116, 9 (1969), 1254–1257.
- [15] CHEN, R. Effects of Various Heating Rates on Glow Curves. Journal of Applied Physics 41, 13 (1970), 5227–5232.
- [16] CHEN, R. Analysis of Thermally Stimulated Processes (Science of Solid State Monographs). Pergamon Pr, 1981.
- [17] CHEN, R., AND MCKEEVER, S. W. S. THEORY OF THERMO-LUMINESCENCE AND RELATED PHENOMENA. World Scientific Publishing Company, 1997.
- [18] CROOKES, W., AND S., F. R. On discontinuous phosphorescent spectra in high vacua. Proc. R. Soc. Lond. 32, 213 (1881), 206–213.

- [19] CRUZ, Z. E., MARCAZZÓ, J., DELLA, M. S., BONIGLIA, C., GARGIU-LO, R., AND BORTOLIN, E. Thermoluminescence analysis of irradiated oyster shells. *Applied Radiation and Isotopes* 71 (2012), 18–22.
- [20] CULLITY, B. D. Elements of X-Ray Diffraction (Addison-Wesley series in metallurgy and materials). Addison-Wesley, 1978.
- [21] EISBERG, R., AND RESNICK, R. Fisica Cuantica/ Quantum Physics (Spanish Edition). Editorial Limusa S.A. De C.V., 2002.
- [22] FAVALLI, A., FURETTA, C., AND CRUZ-ZARAGOZA, E. Variation of the peak temperature at the maximum as a function of dose in thermoluminescent phosphors. *Radiation Effects & Defects in Solids* 161, 5 (2006), 279–287.
- [23] FAVALLI, A., FURETTA, C., ZARAGOZA, E. C., AND REYES, A. Computerized glow curve deconvolution of thermoluminescent emission from polyminerals of jamaica mexican flower. *Radiation Effects & Defects in Solids 161*, 10 (2006), 591–602.
- [24] FLEMING, R. J. Activation Energies and Temperature Dependent Frequency Factor in Thermally Stimulated Luminescence. J. Phys. D. Appl. Phys 23 (1990), 950–954.
- [25] FURETTA, C. Handbook of Thermoluminescence. World Scientific Publishing Company, 2003.
- [26] FURETTA, C., AND WENG, P.-S. Operational Thermoluminescence Dosimetry. World Scientific Pub Co Inc, 1998.
- [27] GARLICK, G. F. J., AND GIBSON, A. The electron trap mechanism of luminescence in sulphide and silicate phosphors. *Proceedings of the Physical Society 60* (1948), 574–590.
- [28] HALPERIN, A., AND BRANER, A. A. Evaluation of Thermal Activation Energies from Glow Curves. *Phys. Rev.* 117, 2 (1960), 408–415.
- [29] HARVEY, E. N. A History of Luminescence from the Early Times until 1900., vol. 44. American Philosopical Society, 1957.

- [30] HOROWITZ, Y., AND YOSSIAN, D. Computerised Glow Curve Deconvolution: Application to Thermoluminescence Dosimetry. *Radiat. Prot. Dosim 60* (1995), 1–114.
- [31] KITIS, G., GOMEZ-ROS, J. M., AND TUYN, J. W. N. Thermoluminescence glow-curve deconvolution functions for first, second and general orders of kinetics. *Journal of Physics D: Applied Physics 31*, 19 (1998), 2636–2641.
- [32] KITIS, G., ROSD, J. M. G., AND TUYN, J. W. N. Thermoluminescence glow-curve deconvolution functions for first, second and general orders of kinetics. *Journal of Physics D: Applied Physics 31*, 19 (1998), 2636–2641.
- [33] KITIS, G., AND VLACHOS, N. D. General semi-analytical expressions for TL, OSL and other luminescence stimulation modes derived from the OTOR model using the Lambert W-function. *Radiation Measurements* 48 (2013), 47–54.
- [34] KITIS, G., ZARAGOZA, E. C., AND FURETTA, C. Critical analysis of the peak-shape methods based on only one temperature value. *Radiation Effects & Defects in Solids 161*, 3 (2006), 149–160.
- [35] KITTEL, C. Introduction to Solid State Physics. Wiley, 2004.
- [36] LAKSHMANAN, A. R., AND BHATT, R. C. Supralinearity and LET dependence of thermoluminescence dosemeters. *Physics in Medicine and Biology 26*, 6 (1981), 1157–1163.
- [37] LIANG, H., MEI, Z., YE, D., LI, J., HONG, W.-C., ZHANG, Q., LIU, Y., GU, L., YU, R., LU, Y., AND DU, X. Dual-functional crystalline BeO layer in enhancement-mode ZnO/Si thin film transistors. *Phys. Status Solidi RRL 11*, 5 (2017), 3–9.
- [38] LOZANO, I. B., LOPEZ, J. R., SOSA, R., GÓNGORA, J. A. I. D., AND AZORÍN, J. Preparation of cerium doped calcium pyrophosphate: Study of luminescent behavior. *Journal of Luminescence* 173, 5 (2016), 5–10.

- [39] MAHESH, WENG, K., S., P., AND FURETTA, C. Thermoluminescence in Solids and its Applications, first ed. Nuclear Technology Publishing, 1989.
- [40] MARCAZZÓ, J., ZARAGOZA, E. C., MENDOZA, J. E., REYES, E. R., AND BROWN, F. Thermoluminescence study of polyminerals extracted from clove and marjoram for detection purposes. *Applied Radiation and Isotopes 71* (2012), 25–29.
- [41] OBERHOFER, M., AND SCHARMANN, A. Applied Thermoluminescence Dosimetry. CRC Press, 1981.
- [42] PAGONIS, V., KITIS, G., AND FURETTA, C. Numerical and practical exercises in Thermoluminescence. Springer Science and Business Media, 2006.
- [43] PARTRIDGE, J. A., AND MAY, C. E. Anomalous Thermoluminescent Kinetics of Irradiated Alkali Halides. *The Journal of Chemical Physics* 42 (1965), 797–800.
- [44] PENG, J., DONG, Z., AND HAN, F. Q. tgcd: An R package for analyzing thermoluminescence Glow Curves. *SoftwareX* 5 (2016), 112–120.
- [45] PUCHALSKA, M., AND BILSKI, P. Glowfit a new tool for thermoluminescence glow-curve deconvolution. *Radiation Measurements* 41, 6 (2006), 659–664.
- [46] RANDALL, J. T., AND WILKINS, M. H. F. Phosphorescence and electron traps - I. the study of trap distributions. *Proceedings of the* royal society A 184 (1945), 366–389.
- [47] RIVERA, M. T. Radiation therapy dosimetry system. Applied Radiation and Isotopes 83 (2014), 204–209.
- [48] RIVERA, M. T., JIMENEZ, F. Y., HERNANDEZ, R. L., ARIAS, C. L., MÉNDEZ, A. R. E., AND URIBE, I. P. Thermoluminescent dosimetry in veterinary diagnostic radiology. *Applied Radiation and Isotopes* (2012).
- [49] RIVERA, T. Thermoluminescence in medical dosimetry. Applied Radiation and Isotopes 71 (2012), 30–34.

- [50] RODRIGUEZ, J., RIVERA, T., VILLASEÑOR, N. L. F., FLORES, O. L., ROMAN, J., AND HERNANDEZ, O. J. O. Thermoluminescent dosimetry in total body iradiation. *Applied Radiation and Isotopes* 71 (2012), 35– 39.
- [51] SADEK, A. M., EISSA, H. M., BASHA, A. M., CARINOU, E., AS-KOUNIS, P., AND KITIS, G. The deconvolution of thermoluminescence glow-curve using general expressions derived from the one trap-one recombination (OTOR) level model. *Applied Radiation and Isotopes 95* (2015), 214–221.
- [52] SCARPA, G. The dosimetric use of beryllium oxide as a thermoluminescent material: A preliminary study. *Physics in Medicine and Biology* 15, 4 (1970), 667–672.
- [53] SCARPA, G., BENICASA, G., AND CERAVOLO, L. Further studies on the dosimetric use of *BeO* as a thermoluminescent material. *Proc. of 3rd International Conf. on Lum Dos. Risu* (1971).
- [54] SEITZ, F. An interpretation of crystal luminescence. Transactions of the Faraday Society 35 (1939), 74–85.
- [55] SINGH, L. L., AND GARTIA, R. K. Derivation of a simplified OSL OTOR equation using Wright Omega Function and its application. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 346 (2015), 45–52.
- [56] SOMMER, M., FREUDENBERG, R., AND HENNIGER, J. Newaspects of a beo-based optically stimulated luminescence dosimeter. *Radiation Measurements* 42 (2007), 617 – 620.
- [57] SOMMER, M., AND HENNIGER, J. Investigation of a beo-based optically stimulated luminescence dosemeter. *Radiation Protection Dosimetry* 119, 1-4 (2006), 394–397.
- [58] STEFANIAK, A. B., HOOVER, M. D., DAY, G. A., DICKERSON, R. M., PETERSON, E. J., KENT, M. S., SCHULER, C. R., BREYSSEB, P. N., AND SCRIPSICK, R. C. Characterization of physicochemical properties of beryllium aerosols associated with prevalence of chronic beryllium disease. *Journal of Environmental Monitoring* 6, 6 (2004), 523–532.

- [59] TOCHILIN, E., GOLDSTEIN, N., AND MILLER, G. W. Beryllium oxide as a thermoluminescent dosimeter. *Health Physics 16* (1969), 1–7.
- [60] WATANABE, S., RAO, T. K. G., PAGE, P. S., AND BHATT, B. C. TL, OSL and ESR studies on beryllium oxide. *Journal of Luminiscence* 130 (2010), 2146–2152.



ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 00069 Matrícula: 2162800475

