Propiedades de los sensores de silicio más allá del ruido de lectura

Ignacio Martín Gómez Florenciano

Tesis de Licenciatura en Ciencias Físicas Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad de Buenos Aires

Mayo2022

TEMA: Propiedades de los sensores de silicio más allá del ruido de lectura.

ALUMNO: L.U. N° 116/13

LUGAR DE TRABAJO: Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires

DIRECTOR: Dr. Darío P. Rodrigues F. Maltéz

COLABORADOR: Lic. Mariano Cababié

FECHA DE INICIACIÓN: Marzo 2021

FECHA DE FINALIZACIÓN: Mayo 2022

FECHA DE EXAMEN:

INFORME FINAL APROBADO POR:

Autor: Ignacio M. Gómez Florenciano

Jurado

Director: Dr. Dario Rodrigues

Jurado

Profesora de Tesis de Licenciatura

Jurado

Resumen

El ruido de lectura en los sensores CCDs ha sido una limitación inherente a la electrónica de estos dispositivos, imponiendo límites en la resolución con que podía medirse la carga en ellos generada. Los sensores *Skipper*-CCDs, por su parte, han logrado superar esta barrera, reduciendo el ruido de lectura a niveles subelectrónicos. Sin embargo, el ruido de lectura no es el único factor que afecta las mediciones: los eventos provenientes de fuentes que no son de interés, los efectos inducidos por fenómenos intrínsecos a la naturaleza de las interacciones y los introducidos por el mismo detector deben ser también considerados.

En esta tesis se estudió y caracterizó el fondo presente en un conjunto de más de 900 imágenes tomadas con un sensor *Skipper*-CCD. A su vez se probaron tres umbrales de detección de eventos, de forma tal de elegir aquel que maximice la estadística disponible introduciendo el menor sesgo posible en los datos. Luego, se utilizó la información obtenida para corregir los sesgos presentes en la determinación del factor de Fano y la energía de creación electrón-hueco. El análisis se realizó mediante un modelo de ajuste de los datos, especialmente diseñado para reproducir los efectos introducidos por la región de colección parcial de carga presente en los sensores.

En paralelo, se estudió el fenómeno de ionización por medio de simulaciones Monte Carlo. Para ello se partió de un modelo muy sencillo para luego adoptar uno más sofisticado, con el fin de poner en evidencia las razones por las cuales el factor de Fano es un orden de magnitud menor a la unidad. De estas simulaciones se obtuvieron resultados en acuerdo con los observados experimentalmente.

Los resultados de este trabajo presentan la determinación de las magnitudes mencionadas para energías inaccesibles hasta el momento (677 eV y 1486 eV), lo cual es de vital importancia para conocer el desempeño de estos dispositivos en el rango de bajas energías, donde los CCDs convencionales presentan importantes barreras debido al ruido de lectura. Así es que este trabajo explora propiedades de los sensores de silicio mediante la tecnología *Skipper*, que habilita ruidos de lectura sub-electrónicos. Esto último, junto con técnicas de análisis que hicieron posible corregir sesgos preexistentes e inducidos y modelar efectos del sensor, permitió determinar cantidades de interés en una región de particular importancia como es el de bajas energías.

Índice

1.	Intr	oducción	1									
	1.1.	.1. Factor de Fano y energía de creación electrón-hueco										
	1.2.	CCD y Skipper CCD	2									
	1.3.	Modelo de difusión de la carga	5									
	1.4.	Eficiencia de colección de carga $\ldots \ldots \ldots$	6									
	1.5.	Antecedentes	7									
	1.6.	Motivación del análisis de imágenes	11									
	1.7.	Organización de la tesis	12									
2.	Esti	idio de la interacción utilizando simulaciones Monte Carlo	15									
	2.1.	Modelado del fenómeno físico	15									
	2.2.	Simulaciones básicas	18									
	2.3.	Simulación de ionización en cascada	20									
3.	El e	xperimento	25									
	3.1.	Configuración experimental	25									
		3.1.1. Detector utilizado \ldots	25									
		3.1.2. Cámara de vacío \ldots	26									
		3.1.3. Fuente de ²⁴¹ Am \ldots	26									
	3.2.	Mediciones con rayos X	28									
4.	Car	acterización y corrección de sesgos	31									
	4.1.	Procesado de las imágenes	31									
	4.2.	Impacto del corte propuesto \ldots	33									
	4.3.	4.3. Caracterización de las imágenes										
	4.4.	Estimación del fondo	42									
		4.4.1. Cálculo de las contribuciones de carga \hdots	44									
		4.4.2. Corrección al sesgo en el conteo de carga	48									

5.	. Modelado analítico de la PCC 5						
	5.1. Introducción del modelo		51				
	5.2. Máxima verosimilitud e incertezas en β		56				
	5.3. Características del modelo		57				
6.	. Resultados		59				
	6.1. Ajuste de espectros		59				
	6.1.1. Resultados a 1486 eV (Al) \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots		59				
	6.1.2. Resultados a 677 eV (F) \ldots		62				
7.	. Conclusiones		67				
А.	A. Implementación del código de la simulación						
Re	Referencias						
Ag	Agradecimientos						

Capítulo 1

Introducción

Dependiendo de la energía de la radiación incidente en los sensores, esta puede ser capaz de ionizar electrones del Si. La relación entre la carga producida y la energía incidente, es decir, la energía necesaria para producir un par electrón-hueco, resulta ser de fundamental importancia para traducir espectros de carga en espectros de energía.

Por otro lado, existen diferentes fenómenos que modifican la forma de los espectros de carga producidos por la radiación incidente en los sensores. Entre ellos, los dos más importantes son: el factor de Fano, que cuantifica la dispersión de carga; y las deficiencias en la colección de carga, que tienden a producir colas hacia bajas energías en los picos producidos por radiación monoenergética.

En este capítulo se detallan tres características que describen tanto propiedades del silicio como del sensor, y que en el marco de esta tesis han sido estudiadas más allá del ruido de lectura gracias a la tecnología Skipper-CCD: el factor de Fano, la energía de creación electrón-hueco y la colección parcial de carga.

1.1. Factor de Fano y energía de creación electrón-hueco

El factor de Fano mide la relación entre la dispersión de una distribución de carga producida en un detector y su media. Viene dado por

$$F=\frac{\sigma^2}{\mu}$$

donde σ^2 es la varianza de la distribución de carga y μ es la media. Para el caso particular de una distribución de Poisson, la varianza y la esperanza coinciden, de forma que el factor de Fano equivale a 1. Las distribuciones de carga que se estudian en esta tesis son el producto

de la interacción de fotones con el detector, que depositan energía en el material ionizando cargas que a su vez ionizan a otras a su paso. Dicha distribución tiene origen en que la energía transferida en cada interacción no es constante y, por lo tanto, para una dada energía inicial de la partícula incidente, tampoco será constante el número de cargas generadas.

Por otro lado, la energía de creación electrón-hueco ε_{e^-h} es medida en valor medio, ya que es calculada a través del cociente entre la energía entregada al detector y la carga en él producida. Si bien ε_{e^-h} está relacionada con la energía del *band gap* del silicio (entre la banda de valencia y la banda de conducción, $E_g \sim 1.1 \,\mathrm{eV}^{[1]}$), debido a que durante el proceso de interacción parte de la energía entregada al material puede disiparse como fonones, la energía de creación electrón-hueco resulta ser mayor, en promedio, que la energía del *gap*.

La estimación precisa de ambas magnitudes es de vital importancia en la caracterización de este tipo de detectores, debido a que, por ejemplo, parámetros como la eficiencia cuántica (medida de la sensibilidad del dispositivo) dependen fuertemente de ellos^[2]. Además es importante determinar la dependencia de estas magnitudes con la energía ya que, en particular, el factor de Fano a energías por debajo de 1 keV es clave para el cálculo de sensibilidad en experimentos de búsqueda de materia oscura liviana, como es caso del experimento SENSEI (*Sub-Electron Noise Skipper-CCD Experiment Instrument*)^[3] e interacciones de neutrinos dentro^[4] y fuera del modelo estándar^[5].

1.2. CCD y Skipper CCD

Los dispositivos CCD (*Charge Coupled Devices*) fueron inventados en 1969 en los Laboratorios Bell, por Willard Boyle y George Smith, en su búsqueda por fabricar dispositivos de memoria. Finalmente, los CCD's no fueron utilizados con este fin al ser superados por otras tecnologías, pero sí demostraron un gran potencial como sensores de luz y partículas. Tal es así que en el año 2010 sus inventores recibieron el premio Nobel de física^[6,7].

Estos dispositivos están hechos esencialmente de silicio y sus elementos constitutivos fundamentales son capacitores MOS (por *metal-oxide-semiconductor*). Estos conforman los píxeles del detector, siendo por lo general millones y ocupando casi la totalidad de la superficie del sensor. Los capacitores MOS se componen generalmente de un sustrato semiconductor dopado, sobre el cual se deposita una delgada capa de óxido y a su vez sobre esta se coloca un metal de contacto. Este contacto metálico se encuentra a un voltaje V_G y otro contacto debajo del semiconductor se encuentra a tierra. Dependiendo del valor de V_G se obtienen distintos regímenes del MOS^[8] donde, en particular, uno de ellos genera una región de depleción cerca del óxido, el cual permite acumular carga minoritaria. Un esquema de la vista lateral en corte de un capaci-



tor MOS puede verse en la Figura 1.1. Además de los píxeles, como se puede ver en la Figura

Figura 1.1: Esquema de un corte lateral de un capacitor MOS (píxel).

1.2, los CCDs están compuestos de *channel-stops* que se encargan de evitar que la carga de los píxeles migre entre columnas vecinas, mientras que los controladores verticales, con las señales V_1 , V_2 y V_3 , son las responsables de desplazarla secuencialmente de forma vertical. Otra parte fundamental de estos detectores es el registro horizontal, donde están los píxeles horizontales de la Figura 1.2, que es la región del CCD donde la carga es migrada de forma horizontal gracias a los estados H_1 , H_2 y H_3 hacia el nodo de sensado. El principio de operación de un CCD se



Figura 1.2: Ilustración esquemática de un sensor CCD de 4×4 píxeles. Las flechas muestran la dirección en la que la carga es desplazada píxel a píxel para luego ser colectada por el nodo de sensado.

puede dividir en cuatro etapas, que a grandes rasgos son:

• Exposición del detector: el tiempo de exposición es variable y depende del tipo de medición que se desee utilizar. Durante la exposición, la radiación incidente interactúa con el detector, generalmente generando pares electrón-hueco.

- Colección: los electrones son luego arrastrados por el campo eléctrico del detector presente en su volumen hacia los pozos de potencial de los píxeles donde son colectados.
- Transferencia: dado que la medición de la carga colectada en los píxeles se realiza de forma secuencial, la misma debe ser transferida de un píxel a otro.
- Medición de la carga: al llegar al nodo de sensado, un amplificador de salida cuantifica la carga.

Los CCD's convencionales son capaces de alcanzar ruidos de lectura del orden de los $2 e^{-}$ rms/pix, gracias a la técnica de muestreo doblemente correlacionado^[9]. Sin embargo, en aplicaciones de bajas energías, el ruido electrónico de lectura redunda en una barrera al límite de energías que pueden medirse con estos sensores manteniendo la precisión deseada.

Por debajo de los 2 keV la contribución del ruido de lectura a la determinación del factor de Fano y la energía de creación electrón-hueco puede superar el 30%, como se esquematiza en la Figura 1.3. Esto representa un impacto considerable en la determinación de estas cantidades que son de interés en el presente trabajo. La línea punteada en la Figura 1.3 representa el ruido constante de lectura de 30 eV, presente en estos sensores y la recta continua representa el factor de Fano si este fuera constante para todo el rango de energías, tomando F = 0,119, obtenido experimentalmente y por primera vez para los rayos X del ⁵⁵Fe utilizando la tecnología *skipper*-CCD^[10]. Sobre la curva se ven los puntos que representan los valores del factor de Fano que se medirían si se utilizaran sensores CCD convencionales, debido a la suma de contribuciones del ruido sobre un factor de Fano constante de 0,119. En la práctica, estas cantidades no están determinadas para el rango de energías inferior a 2 keV debido a la imposibilidad de medirlas utilizando CCDs convencionales.

Los sensores *Skipper*-CCD's, por otro lado, permiten disminuir el ruido de lectura a niveles subelectrónicos gracias a que son capaces de medir la carga en los píxeles de forma no destructiva. Esto permite tomar tantas mediciones de la carga como sean necesarias y estimar la carga real a partir de un promedio sobre el número N de mediciones tomadas, de forma que el ruido de lectura se reduce un factor \sqrt{N} ^[9], es decir, se tiene

$$\mu = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} q_i, \qquad \sigma = \frac{\sigma_1}{\sqrt{N}}$$

donde q_i es la carga leída en cada proceso de medición y σ_1 es el ruido de lectura para un CCD convencional.



Figura 1.3: Valores que se obtendrían de medir el factor de Fano con un sensor CCD convencional (puntos negros), debido a la contribución del ruido de lectura constante de $30 \,\mathrm{eV}$ (línea punteada horizontal). La línea recta de trazo continuo representa un valor de factor de Fano constante de F = 0,119.

Esta es la principal razón que motiva este trabajo, donde se realiza un estudio sistemático del factor de Fano a bajas energías, tanto a $1486 \,\mathrm{eV}$ (rayos X del Al) y $677 \,\mathrm{eV}$ (rayos X del flúor).

1.3. Modelo de difusión de la carga

Dado que el sensor utilizado en este trabajo fue del tipo *back-iluminated*, como se describe en la Sección 3.1.1, la mayor parte de las interacciones ocurren en las primeras centenas de nanómetros de la parte trasera del sensor. Con lo cual, para un sensor de 200 μ m de espesor, la carga producida durante la ionización debe recorrer prácticamente todo el material hasta alcanzar la superficie donde es colectada. Mientras la carga se transporta desde la parte trasera (cara expuesta) hasta la superficie del detector (cara opuesta a la exposición), ocurre que la carga se difunde desde el píxel donde originalmente fue generada hacia los píxeles vecinos, como se muestra en los esquemas de la Figura 1.4. La forma en la que esta difusión ocurre puede modelarse a partir de una distribución gaussiana en dos dimensiones, donde el valor de la varianza σ_{xy}^2 es función de la profundidad z donde ocurrieron las interacciones y se puede escribir como^[11]

$$\sigma_{xy}^2 = -A\ln|1 - bz|$$

donde A y b son parámetros del detector.

Dado que la carga producida por un único evento, inicialmente en un único píxel, puede



Figura 1.4: Izquieda: esquematización de la sección transversal de un CCD y de cómo se difunde la carga en los píxeles. Derecha: esquematización frontal de un CCD con la distribución final de la carga sobre un conjunto de píxeles debido a la difusión, denominado cluster. Se colorean más tenues los píxeles representando menor cantidad de carga acumulada.

migrar hacia píxeles vecinos por difusión durante su desplazamiento hacia la superficie, el total de carga producida queda distribuida en varios píxeles contiguos. A este conjunto de píxeles que contiene toda la carga de un único evento se lo denomina cluster.

1.4. Eficiencia de colección de carga

La Eficiencia de Colección de Carga o CCE (Charge Collection Efficiency, por sus siglas en inglés) se define como la fracción del total de carga producida durante un evento de ionización que es efectivamente medida. Para sensores del tipo fully depleted- $CCD^{[12]}$, a los que se les aplican campos eléctricos relativamente altos, la CCE es aproximadamente del 100 %, es decir, toda la carga producida por ionización en el volumen del sensor logra ser colectada y medida. Sin embargo, existen casos donde la eficiencia no alcanza el 100 % y esto es debido al fenómeno de Colección Parcial de Carga o PCC (*Partial Charge Collection*, por sus siglas en inglés)^[13]. Este efecto se debe a que en las primeras centenas de nanómetros cercanos a la superficie por donde se irradia el detector (lado opuesto al que posee la superficie pixelada) existe una probabilidad no nula de que la carga generada por ionización sufra recombinación, es decir, que vuelva a enlazarse a un átomo. Este efecto produce una disminución en el número de cargas que finalmente son llevadas a la superficie del sensor. En el esquema de la Figura 1.5 se presenta una vista esquemática en corte lateral de las primeras centenas de nanómetros de un CCD, donde debido al ángulo θ de incidencia de los rayos X de la fuente, estos fotones generan cargas por ionización en la región donde hay recombinación. Una fracción de las cargas generadas q_i logran ser colectadas, dependiendo de la profundidad del sensor donde se produjo



Figura 1.5: Esquema lateral de las primeras centenas de nanómetros de un CCD, con una fuente de rayos $X^{[13]}$. Los fotones penetran en el sensor produciendo una nube de cargas q_i , de las cuales solo una fracción logra ser colectada. Estas aumentan monótonamente dependiendo de la profundidad de penetración.

la interacción. También se muestra que si la interacción se da fuera de esta región, toda la carga generada por ionización es colectada, teniéndose $q_i = q_f$ y la eficiencia es máxima. La colección parcial de carga es un problema propio de los sensores y de su fabricación. Sin embargo, existen tratamientos de la superficie posterior de estos sensores para reducir su impacto y que en general son aplicados en CCDs destinados a toma de imágenes astronómicas.

El efecto que provoca la colección parcial de carga en las mediciones es el de agregar eventos con menor cantidad de carga de la que deberían, generando así colas a la izquierda de los picos de interés en los espectros y, por ende, agregando otro sesgo a la determinación de magnitudes dependientes del valor medio de los picos, como el factor de Fano.

1.5. Antecedentes

En trabajos previos se han estudiado las ventajas de la utilización de la tecnología *Skipper* en los CCDs, para lograr medir con precisión subelectrónica en regímenes de energía donde los sensores CCD convencionales más precisos solo podrían alcanzar resoluciones del orden de los 2 electrones. Por primera vez fue usada para medir el factor de Fano y la energía de creación electrón-hueco en el silicio a una energía de 5,9 keV a $123 \text{ K}^{[10]}$.

Para lograr esto, se implementó un método de calibración absoluta de la relación entre el número de electrones en cada píxel y el valor de lectura en ADUs (Analog Digital Unit o Unidades analógico-digitales). El procedimiento para la calibración consistió en la utilización de un LED que emitía fotones en 405 nm de longitud de onda para poblar de carga los píxeles del sensor. Realizando un barrido en el tiempo de exposición del sensor a la luz del LED, se logró poblar a los píxeles del sensor con un amplio rango de cargas. La medición de carga se realizó tomando 300 lecturas por cada píxel, que luego fueron promediadas logrando reducir el ruido de lectura en un factor $\sqrt{300}$. Como resultado, se obtuvieron distribuciones de carga gaussianas en los posibles niveles de ocupación de carga con una resolución tal que hizo posible distinguir perfectamente entre picos consecutivos, como se puede ver en la Figura 1.6. De esta forma, mediante un ajuste gaussiano se pudo establecer el valor medio en ADUs para cada uno de estos picos, estableciendo como valor correspondiente de carga el número de orden del pico en cuestión. Así es que se obtuvo una relación uno a uno entre cantidad de carga por píxel y ADUs. Cabe destacar que para comenzar a numerar los picos, primero es necesario establecer el valor de 0 carga o píxel vacío, lo cual no corresponde, a priori, a un valor nulo en ADUs. Para ello, las imágenes tomadas con Skipper cuentan con una región denominada over-scan que se utiliza para calcular la línea de base y poder sustraerla luego al valor en ADU medido para cada píxel, logrando así que la media de los píxeles vacíos quede en cero ADUs.



Figura 1.6: Histograma de los datos obtenidos al iluminar el CCD con LED, correspondiente a una región con poca ocupación, donde los picos de los niveles de carga están ajustados por gaussianas y se distinguen a la perfección.

Las mediciones del factor de Fano y la energía de creación electrón-hueco se realizaron utilizando rayos X de 5,9 keV emitidos por una fuente de ⁵⁵Fe. Más precisamente, rayos X_K , cuyas energías son las de la Tabla 1.1. Sobre los picos de los espectros obtenidos al irradiar

X_K	Energía $[eV]$	Intensidad relativa
α_2	$5887,\! 6$	8,5(4)
α_1	$5898,\!8$	16,9(8)
β_3	6490, 4	4,1(11)

Tabla 1.1: Energías e intensidades relativas de los fotones X emitidos tras el decaimiento de ⁵⁵Fe

el CCD con estos rayos X, se realizó un ajuste para obtener los parámetros μ y σ de cada uno. Para esto, se utilizó la verosimilitud de la ecuación (1.1), que surge de convolucionar dos distribuciones exponenciales y una distribución gaussiana

$$\mathscr{L}(e|\mu_1,\mu_2,\sigma_1,\lambda_1,\lambda_2,\eta_1=\eta_2,\eta_3) = \sum_{j=1}^3 I_j \left\{ \eta_j \frac{\lambda_1}{2} \exp\left[(e-\mu_j)\lambda_1 + \frac{\sigma_j^2 \lambda_1^2}{2} \right] \operatorname{Erfc}\left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{e-\mu_j}{\sigma_j} + \sigma_j \lambda_1 \right) \right] + (1-\eta_j) \frac{\lambda_2}{2} \exp\left[(e-\mu_j)\lambda_2 + \frac{\sigma_j^2 \lambda_2^2}{2} \right] \operatorname{Erfc}\left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{e-\mu_j}{\sigma_j} + \sigma_j \lambda_2 \right) \right] \right\}$$
(1.1)

donde μ_j , σ_j y I_j representan el valor medio de carga, la desviación estándar del valor medio de carga y la intensidad relativa del pico *j*-ésimo con energía E_j , respectivamente y $j = \{\alpha_1, \alpha_2, \beta_3\}$. Además, λ_1 y λ_2 son parámetros de la distribuciones exponenciales y η_j es el peso relativo entre ellas. Se utilizaron dos exponenciales y una gaussiana para modelar los picos con la intención de describir las colas que había a bajas energías, tomando la descripción que suele hacerse para picos en espectrometría $\alpha^{[14]}$. Sin embargo, se sabe que en este último caso las colas son debidas al fenómeno de auto-absorción, el cual no está presente en los experimentos anteriormente mencionados. Puede decirse entonces que se trató de un modelo fenomenológico, es decir, no basado en primeros principios.

X_K	$\mu~[e^-]$	$\Delta \mu \ [e^-]$	$\sigma~[e^-]$	$\Delta\sigma~[e^-]$	F	ΔF	$\varepsilon_{e-h} \; [eV]$	$\Delta \varepsilon_{e-h} \; [eV]$
α_2	$1570,\!50$	0,18	$13,\!68$	0,12			3 740	0.001
α_1	$1573,\!48$	$0,\!18$	$13,\!69$	0,12	0,119	0,002	5,149	0,001
β_3	$1730,\!50$	$0,\!55$	$14,\!36$	$0,\!13$			3,751	0,002

Tabla 1.2: Parámetros obtenidos de los ajustes para las mediciones del 55 Fe. El factor de Fano se tomó el mismo para los tres picos y la energía de creación electrón-hueco se fijó para que sea la misma en los picos α .

Así es que los valores condensados en la Tabla 1.2 constituyen los primeros resultados obtenidos de la utilización de la tecnología *Skipper*-CCD para el cálculo del factor de Fano y de la energía de creación electrón-hueco para una temperatura de 123 K. Los mismos se encuentran en excelente acuerdo con la bibliografía preexistente^[15–17] y presentan la mejor incerteza alcanzada a la fecha.

En esa oportunidad se llevaron a cabo además las primeras mediciones tendientes a determinar el factor de Fano y la energía de creación electrón-hueco para energías por debajo de los de 2 keV^[18], más específicamente, para energías de 677 eV y 1486 eV, que corresponden a los rayos X de fluorescencia del flúor y del aluminio respectivamente. En la Tabla 1.3 pueden verse las energías e intensidades relativas para los rayos X de estos elementos. Esto se logró a partir de mediciones realizadas con una fuente de ²⁴¹Am que emite partículas α con una energía de $\sim 5,6$ MeV. A estas partículas se las hizo impactar contra una cinta de teflón (que contiene flúor) y una barra de aluminio que por fluorescencia emitían rayos X con las energías antes mencionadas.

Elemento	X_K	Energía [eV]	Intensidad relativa
F	$\alpha_{1,2}$	676,8	148
Al	α_2	1486,3	50
Al	α_1	1486,7	100
Al	β_1	1557,4	1

Tabla 1.3: Energías e intensidades de las líneas de emisión de rayos X para el flúor y el aluminio en el rango de energías por debajo de los 2 keV.

Uno de los desafíos que surgieron en este otro trabajo fue obtener una buena estadística, debido a que solo una fracción muy pequeña de los átomos que son impactados por las partículas α se desexcitan emitiendo fotones X en las energías de deseadas. La emisión de rayos X tras la captura electrónica del núcleo del ⁵⁵Fe, en cambio, ocurre siempre y por lo tanto es proporcional a la actividad de la fuente. Por esta razón, dada una misma actividad de la fuente de ⁵⁵Fe y la tasa de emisión de partículas α , la obtención de rayos X es mucho más probable en el primer caso, haciendo la colección de eventos más rápida.

Con los datos de estas mediciones se reconstruyeron los espectros para ambos picos y se les realizó un ajuste muy similar al de los experimentos con 55 Fe, utilizando la verosimilitud descripta por la expresión (1.2)

$$\mathscr{L}(e|\mu,\sigma,\lambda_1,\lambda_2,\eta) = \eta \left\{ \frac{\lambda_1}{2} \exp\left[(e-\mu)\lambda_1 + \frac{\sigma^2 \lambda_1^2}{2} \right] \operatorname{Erfc}\left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{e-\mu}{\sigma} + \sigma \lambda_1 \right) \right] \right\} + (1-\eta) \left\{ \frac{\lambda_2}{2} \exp\left[(e-\mu)\lambda_2 + \frac{\sigma^2 \lambda_2^2}{2} \right] \operatorname{Erfc}\left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{e-\mu}{\sigma} + \sigma \lambda_2 \right) \right] \right\}$$
(1.2)

Los resultados obtenidos en este trabajo se encuentran en la Tabla 1.4.

Sin embargo, estos últimos fueron resultados preliminares que podían mejorarse tanto aumentando la estadística, como realizando un análisis de los datos más sofisticado. Sobre este último punto, vale decir que el modelo de ajuste utilizado antes de esta tesis no incluye los

Elemento	$\mu \ [e^-]$	$\Delta \mu \ [e^-]$	$\sigma ~[e^-]$	$\Delta\sigma \ [e^-]$	F	ΔF	ε_{e-h} [eV]	$\Delta \varepsilon_{e-h} [eV]$
F	182,0	0,8	7,0	0,7	0,27	0,05	3,72	0,02
Al	$404,\!4$	$0,\!4$	8,3	$0,\!3$	$0,\!17$	$0,\!01$	$3,\!679$	0,004

Tabla 1.4: Resultados preliminares obtenidos en un trabajo previo para el factor de Fano y la energía de creación electrón-hueco para las energías de los rayos X de fluorescencia del fluor y el aluminio.

efectos de la colección parcial de carga. Además, en el análisis de las imágenes, no se realizó ninguna corrección por el sesgo que podría significar la adición de carga originada por fuentes de fondo descriptas en la próxima sección.

Es a partir de aquí donde este trabajo continúa con el estudio del factor de Fano, la energía de creación electrón-hueco y la colección parcial de carga, a partir de mediciones de rayos X con energías por debajo de los 2 keV.

1.6. Motivación del análisis de imágenes

El fondo presente en las imágenes tiene diferentes orígenes, uno de ellos es la carga producida por fluctuaciones térmicas en la red cristalina del silicio del sensor (corrientes oscuras). Otra contribución es la de eventos de dispersión Compton, producidos por la interacción de los fotones con los materiales que rodean al sensor y también en la red cristalina del mismo. Podemos incluir además, aquellos fotones infrarrojos emitidos desde los materiales que rodean al detector cuando estos son excitados por radiación circundante o bien por radiación de cuerpo negro. También se encuentran los eventos de carga producida por radiación muy penetrante provenientes del exterior, como por ejemplo, muones.

Parte del análisis consistió en estudiar el efecto que produce el fondo de las imágenes sobre los eventos de interés: la aglomeración de píxeles con un único electrón alrededor de los clusters, y la carga extra añadida sobre ellos. En muchos casos resulta que los píxeles con fondo se aglutinan a los clusters, aumentando su tamaño y su carga, o incluso también haciendo de puente entre dos clusters vecinos. Estos son dos efectos indeseados, primero, porque sesgan la cantidad de carga real en un evento y segundo, porque los programas de reconocimiento de eventos podrían ignorarlos al no cumplir con los cortes de calidad impuestos¹, tanto por forma como por cantidad de carga, produciendo así una disminución en la estadística.

En este contexto, se propone utilizar un umbral de detección que ignore píxeles con un solo electrón, de forma de evitar el agregado de píxeles con una carga inducida por eventos de fondo a los clusters y con este corte lograr aumentar la estadística en el conteo de eventos. Para ello,

 $^{^{1}}$ Ver sección 4.1

también es necesario lograr caracterizar el fondo responsable de este efecto para corregir el sesgo introducido por el nuevo umbral de detección, el cual también eliminará píxeles con una carga genuina. Es por eso que en este trabajo se desea realizar un análisis de las imágenes del cual obtener un método que pueda corregir el sesgo introducido luego de recuperar la mayor estadística posible separando eventos unidos por un electrón de fondo. Esto es, el desarrollo de un método para estimar en valores medios cuántos electrones genuinos son removidos y cuántos electrones de fondo hay en los clusters, para eliminar así sesgos y eventualmente reducir además las incertezas en la determinación del factor de Fano y la energía de creación electrón-hueco a bajas energías.

Motiva también este trabajo el desarrollo y aplicación de un modelo que permita dar cuenta del efecto de colección parcial de carga y así obtener una forma analítica para la distribución de carga producida por los fotones de interés.

1.7. Organización de la tesis

En el presente capítulo se ha dado una breve introducción a los tres aspectos principales de estudio de este trabajo: el factor de Fano, la energía de creación electrón-hueco y la colección parcial de carga. Además se han presentado resultados que conforman los antecedentes para la motivación de esta tesis.

En el capítulo 2 se presenta un modelo físico simple de la interacción entre fotones incidentes y la red cristalina del sensor, que luego es utilizado en simulaciones Monte Carlo tendientes a reproducir los valores experimentalmente observados para el Factor de Fano.

En el capítulo 3 se desarrolla una descripción esquemática del dispositivo de medición utilizado y los regímenes de trabajo necesarios para su correcta operación. También se da una breve descripción del sensor y de los materiales que lo componen, como así también de la fuente radioactiva utilizada. Por último, se describe el proceso de medición.

En el capítulo 4 se describe cómo son procesados los datos y qué programas son utilizados además de las pruebas realizadas con distintos umbrales para la detección de carga. También se muestran los resultados del análisis realizado para caracterizar el sensor. Es en este capítulo que se describen los diferentes enfoques utilizados en la estimación del fondo y de la cantidad de eventos eliminados por el umbral de detección de carga (corte) utilizado y el método aplicado para realizar las correcciones sobre el sesgo sobre carga de cada evento introducido por el corte aplicado.

En el capítulo 5 se introduce un modelo que describe la distribución de carga considerando no solo el factor de Fano sino además el efecto que la colección parcial de carga tiene sobre las distribuciones de carga estudiadas.

Por último, en el capítulo 6 se presentan los resultados obtenidos para el Factor de Fano, la energía de creación electrón-hueco y el ancho efectivo de la zona de colección parcial de carga, a partir de ajustes no bineados sobre los espectros de carga medidos y utilizando el modelo descripto en el Capítulo 5.

Capítulo 2

Estudio de la interacción utilizando simulaciones Monte Carlo

En este capítulo se presentan los resultados de modelar mediante simulaciones Monte Carlo la carga producida en los sensores debido a interacción de rayos X. Para ello se adoptará un modelo simplificado en primer lugar, y que luego se complejiza con intenciones de dar una descripción más precisa del fenómeno.

2.1. Modelado del fenómeno físico

Uno de los aspectos que se propuso estudiar en este trabajo es el de las razones físicas que hacen que el factor de Fano sea un número mucho menor que la unidad, al contrario de lo que podría esperarse desde una descripción puramente poissoniana de la interacción, donde el factor de Fano debería ser 1.

Dado que el proceso de ionización de carga es un proceso estocástico en el cual un electrón ionizado (por ejemplo por efecto fotoeléctrico al interactuar con un fotón) puede o no interactuar con otros electrones de la red, puede pensarse como una serie de experimentos de Bernoulli, donde el *éxito* es ionizar y generar otro par electrón-hueco y el *fracaso* es no hacerlo. Como la probabilidad de ionización es baja, pero la cantidad de veces que puede darse la interacción es muy alta, en el límite el proceso es poissoniano. Sin embargo, experimentalmente se observa que cuando toda la energía de la partícula incidente es depositada en el material, el factor de Fano resulta casi un orden de magnitud menor. Una de las posibles razones por las que esto sucede es que la energía de la partícula no solo es disipada en forma de ionización de carga, sino también en excitación de fonones de la red cristalina del material.

Cuando un fotón de alta energía cinética impacta contra el sensor, este produce una dis-

persión por ionización y emisión de fonones de la red cristalina del silicio, produciendo así una cascada de pares electrón-hueco. El número de pares producidos puede ser luego medido y el valor de la energía de creación electrón-hueco promediado a partir de este.

Este fenómeno es estudiando en los trabajos de R.C. Alig et al.^[16], mediante simulaciones de Monte Carlo y luego por K. Ramanathan^[19], compilando resultados y propuestas de diferentes trabajos. En el primero se propone un modelo en el que la partícula incidente interactúa con el material, generando pares electrón-hueco por ionización en forma de cascada y, eventualmente, perdiendo energía por emisión de fonones. La forma en que la partícula incidente pierde energía depende fuertemente de la energía que tiene al momento de ionizar. Esta dependencia está modelada en el trabajo de Ramanathan^[19] y lo llaman *modelo simplificado*, donde proponen que la energía E que se transfiere para generar pares electrón-hueco se reparte según una distribución Beta, de la forma

$$p(x|\alpha) = \frac{2}{B(\alpha)}x^{\alpha-1}(1-x)^{\alpha-1}$$

donde $x = \frac{E}{E_R - E_g}$ es la variable aleatoria, con E_r la energía inicial de la partícula en cada ionización, E_g es la energía del gap del silicio y E la fracción de energía que va a parar a un nuevo par electrón-hueco. Utilizando esta distribución para generar realizaciones de la variable aleatoria x, se puede despejar el valor de E, que es la energía transferida para generar pares electrón-hueco según este modelo. Por otro lado, $B(\alpha)$ es la función Beta con un único parámetro α , y viene dada por

$$B(\alpha,\beta) = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha) + \Gamma(\beta)} \longrightarrow B(\alpha) = \frac{\Gamma^2(\alpha)}{2\Gamma(\alpha)}$$

donde α depende de la energía E_r y es el parámetro que determina el régimen de distribución de la energía, o en otras palabras, la forma de la distribución.

La motivación de la utilización de la distribución Beta para modelar cómo se reparte la energía en la generación de pares electrón-hueco por ionización se debe a que esta se adapta muy bien a los tres tipos de regímenes de energía en los que se puede encontrar la partícula incidente, según los trabajos mencionados anteriormente:

- A bajas energías de la partícula incidente, se tienen distribuciones muy picudas en los extremos posibles: E = 0 y E = E_R + E_g,
- A energías mucho mayores que la energía del gap, $E_R >> E_g$: Se tiene una distribución aproximadamente uniforme,
- A energías entre 2,2 eV 4,2 eV se tiene una distribución de energía muy picuda en el

medio de $x = E/(E_R - E_g)$.

Para energías bajas, el parámetro α tiende a cero y se tiene una distribución con máximos en los extremos del intervalo. Para energías entre 2,2 eV y 4,2 eV se tiene una distribución con un máximo en el medio del intervalo y el parámetro α puede tender a infinito. Por último, para energías mucho mayores a la energía del gap, el parámetro $\alpha = 1$ y la distribución es uniforme. Estos casos se resumen en el gráfico de la Figura 2.1.



Figura 2.1: Distribución Beta para diferentes valores del parámetro α . Las curvas de trazo punteado son para $\alpha < 1$, la recta punteada es para $\alpha = 1$ y las curvas de trazo continuo son para $\alpha > 1$.

El mecanismo de cascada por el cual se producen las ionizaciones consiste en que para una dada energía inicial E_R , una fracción de esa energía se utiliza para generar un par electrón-hueco y la energía restante vuelve a fraccionarse para generar otros pares electrón-hueco. Estos pares generados, a su vez, utilizan fracciones de esa energía que les fue entregada para generar otros pares, en un proceso que se repite hasta que la energía disponible para repartir en cada rama de la cascada es menor a la energía del gap del Silicio y ya no es suficiente para generar más pares. Durante todo este proceso existe una probabilidad no nula de que parte de la energía se pierda por emisión fonones en la red.

Se define una probabilidad P_{eh} para la cual se produce ionización y una probabilidad $1 - P_{eh}$ para la cual se produce emisión de fonones. Esta probabilidad depende de la energía inicial, al igual que el parámetro α de la distribución Beta, y viene dada por

$$P_{eh}(E_R) = \left[1 + \frac{\Gamma_{ph}(E_R)}{\Gamma_{eh}(E_R)}\right]^{-1}$$
(2.1)

donde

$$\frac{\Gamma_{ph}(E_R)}{\Gamma_{eh}(E_R)} = A \frac{105}{2\pi} \frac{(E_R - \hbar\omega_0)^{1/2}}{(E_R - E_g)^{7/2}}$$

con $A = 5,2 \,\mathrm{eV^3}$, que es una constante fenomenológica que contiene información microscópica del sistema y que además puede ajustarse para reproducir valores medidos experimentalmente. Por otro lado, Γ_{ph} y Γ_{eh} son las tasas de producción de fonones y pares electrón-hueco, respectivamente. A partir de estos modelos, se buscó simular este mecanismo de ionización mediante simulaciones Monte Carlo.

2.2. Simulaciones básicas

El modelo más simplificado del mecanismo de ionización puede pensarse como una serie de experimentos de Bernoulli, es decir, donde solo hay dos resultados posibles: éxito-fracaso. La probabilidad de éxito p, representa la de ionizar una carga y perder una cantidad de energía equivalente a la energía de creación electrón-hueco, sin tener en cuenta explícitamente la disipación de energía por excitación de fonones.

Dada una energía inicial y un número fijo N de experimentos de Bernoulli, puede suceder que la energía inicial se agote completamente o no. El valor final de la energía depende muy fuertemente del valor de N: para una cantidad de experimentos N muy grande, la probabilidad de que la energía se agote completamente tiende a 1, mientras que para N muy pequeño la probabilidad es mucho menor, pudiendo suceder que la energía no sea cero al final del experimento. No es sorprendente que al simular con este modelo se recupere un factor de Fano que tiende a 1, en el caso en el que el valor de N es grande pero no suficiente para agotar la energía de la partícula incidente. Esto es debido a que la realización de experimentos consecutivos de Bernoulli conforman una variable aleatoria de distribución binomial, la cual tiende a una distribución de Poisson si además p es pequeño. Esto puede verse en la Figura 2.2, donde puede observarse como una distribución poissoniana describe correctamente el histograma. El histograma corresponde a la distribución de carga obtenida luego de repetir 20000 veces la simulación, que parte de una energía inicial de 677 eV con un N = 5000, que es la cantidad de veces que se repite el experimento de Bernoulli de ionizar o no con probabilidad p = 0.01 y el factor de Fano resultó $F = 0.9790 \pm 0.0104$ mientras que el valor medio de eventos ionizados fue $\mu = 49,71 \pm 0,06$.

En oposición a lo previamente descripto, para el caso en que N es tal que la gran mayoría de las veces la energía se agota completamente, el factor de Fano se vuelve menor a 1, como puede verse en la Figura 2.3. En este caso, nuevamente se parte de una energía inicial de 677 eV pero esta vez con un N = 30000, cantidad suficiente para agotar completamente la energía y p = 0,01 nuevamente. Esto se repitió 20000 veces para obtener una buena cantidad de estadística y formar el histograma. En este caso el factor de Fano fue de $F = 0,2952 \pm 0,0025$



Figura 2.2: Histograma, con los correspondientes ajustes, gaussiano y poissoniano, de los resultados de 20000 repeticiones, cada uno de los cuales consiste de N = 5000 experimentos de Bernoulli. En este caso la energía inicial no es completamente depositada en el material. Puede verse como el ajuste poissoniano representa muy bien al histograma de carga.

y el valor medio de carga ionizada $\mu = 200.97 \pm 0.06$.



Figura 2.3: Histograma, con los correspondientes ajustes, gaussiano y poissoniano, de los resultados de 20000 repeticiones, cada uno de los cuales consiste de N = 30000 experimentos de Bernoulli. En este caso la energía inicial se agota casi siempre en el interior del material. Es en este caso en el que el factor de Fano es menor a la unidad.

Si bien este modelo de juguete es una simplificación del proceso de dispersión real, los resultados soportan la hipótesis de que el factor de Fano es menor a 1 debido, en parte, a que la partícula incidente deposita toda su energía en el material.

2.3. Simulación de ionización en cascada

Utilizando ideas tomadas de los trabajos anteriormente citados, se modificaron las simulaciones Monte Carlo con la intención de reproducir el mecanismo de creación de pares electrón-hueco por ionización en cascada. Para este caso se tuvo en cuenta la posibilidad de disipación de energía por emisión de fonones a una energía fija de $\hbar\omega_0 = 0.063 \,\text{eV}$.

El resultado de la simulación es simplemente el número de pares ionizados a partir de la energía inicial E_R . De esta puede verse la distribución de la cantidad de pares generados y además calcular tanto su varianza como su esperanza, para así obtener el factor de Fano y la energía de creación electrón-hueco. Cabe destacar que en este tipo de simulación, dada su implementación particular, solo se puede considerar el caso en que la partícula disipa toda su energía en el interior del material, de modo que se esperan valores para el factor de Fano menores a la unidad.

Se realizaron las simulaciones partiendo de una energía inicial $E_r = 677 \text{ eV} \text{ y } E_R = 1500 \text{ eV}$, correspondiente a los rayos X de flúor y del aluminio respectivamente, que son el principal objeto de estudio de este trabajo. Los valores de los parámetros fueron extraídos de la bibliografía ^[16,19] y son $A = 5,2 \text{ eV}^3$, la energía del gap $E_g = 1,1 \text{ eV}$, la energía de creación electrón-hueco promedio $\varepsilon_{eh} = 3,75 \text{ eV}$ y la energía disipada cada vez que se emiten fonones $\hbar\omega = 0,063 \text{ eV}$.

Por otro lado, con el fin de observar como afecta el número de repeticiones del experimento a la dispersión de los valores del factor de Fano, se realizó en primera instancia un barrido en la cantidad de repeticiones, partiendo desde 100 hasta 100900 repeticiones. En la Figura 2.4 se observa la convergencia de los valores del factor de Fano a medida que aumenta el número de experimentos, para el caso de la energía de los rayos X del flúor, $E_R = 677 \,\text{eV}$. Entre 10^2



Figura 2.4: Valores del factor de Fano para distintas cantidades de repeticiones del experimento, partiendo desde 100 repeticiones hasta 100900 repeticiones, utilizando $E_R = 677 \text{ eV}$.

y 10⁴ repeticiones del experimento se tiene que el factor de Fano se encuentra entre 0,096 y 0,110 aproximadamente, mientras que entre 10^4 y 10^5 cantidad de repeticiones los valores para el factor de Fano están acotados entre ~ 0,100 y ~ 0,104 aproximadamente. Se nota claramente la convergencia de los valores con el aumento de repeticiones y que para 10^4 la variabilidad del factor de Fano es como mucho del 6 %.

En cuanto a los resultados de estas simulaciones, para el caso del flúor, se pueden ver los histogramas de carga en los gráficos de las figuras 2.5 y 2.6. Ambos gráficos fueron realizados con 100000 repeticiones del experimento, pero con distintos valores del parámetro A. En estos se muestra la distribución de carga con un ajuste gaussiano, del cual se deriva el valor de μ posteriormente utilizado para graficar una curva poissoniana. En ambos casos se observa como la distribución de carga está lejos de parecerse a una distribución de Poisson y por ello el factor de Fano se aleja de la unidad. En la Figura 2.5 se puede ver que una distribución gaussiana es una buena descripción del histograma. En este caso se utilizó $A = 5,2 \,\mathrm{eV}^3$, el factor de Fano corresponde a $F = 0,1018 \pm 0,0004$ y el valor medio de carga $\mu = 191,50 \pm 0,01$, un valor significativamente mayor que el valor esperado, cercano a $\mu = 181$. Para el segundo caso,



Figura 2.5: Distribución de carga simulada con el método de Monte Carlo, con parámetro $A = 5,2 \,\mathrm{eV}^3$ y 10^5 repeticiones del experimento. Se observa un valor medio $\mu = 191,50 \pm 0,01$, lo cual representa un corrimiento hacia la derecha del valor esperado para el pico de los rayos X del flúor, que es alrededor de 181 electrones un valor del factor de Fano de $F = 0,1018 \pm 0,0004$.

en la Figura 2.6, se modificó el valor del parámetro A de forma que el pico coincida con el valor medio de carga esperado, y su valor fue $\mu = 181,12 \pm 0,02$ electrones. El valor de A que cumple esa condición es $A = 20 \text{ eV}^3$, valor 5 veces mayor al propuesto en la bibliografía para describir macroscópicamente las propiedades del silicio. El factor de Fano en este caso es de $F = 0,1059 \pm 0,0004$, que está contenido entre las bandas esperadas para la cantidad de estadística utilizada en esta simulación, al igual que para el caso anterior.



Figura 2.6: Distribución de carga simulada con el método de Monte Carlo, forzando el parámetro A para que el pico se encuentre en los $181,12 \pm 0,02$ electrones esperados para los $677 \,\text{eV}$ de energía de los rayos X del flúor. El valor necesario para esto suceda fue $A = 20 \,\text{eV}^3$ y el factor de Fano obtenido fue $F = 0,1059 \pm 0,0004$.

De la misma manera que para la energía del flúor, se presentan los resultados para las simulaciones para los rayos X del aluminio en las Figuras 2.7 y 2.8. Los resultados son muy similares a los del flúor. En ambos gráficos puede verse como las curvas de Poisson correspondientes al μ obtenido de las simulaciones difiere fuertemente de los histogramas, mientras que los ajustes gaussianos se encuentran en muy buen acuerdo con ellos.



Figura 2.7: Distribución de carga simulada con el método de Monte Carlo, con parámetro $A = 5,2 \,\mathrm{eV}^3$ y 10^5 repeticiones del experimento. Se observa un valor medio $\mu = 425,53 \pm 0,02$, lo cual representa un corrimiento hacia la derecha del valor esperado para el pico de los rayos X del aluminio, que es alrededor de 400 electrones. Se obtuvo un factor de Fano $F = 0,1017 \pm 0,0003$.

En la Figura 2.7 se simuló el proceso partiendo de $E_R = 1500 \text{ eV}$, con 100000 repeticiones del experimento y $A = 5,2 \text{ eV}^3$ como indica la bibliografía. Sin embargo, el valor medio de carga esperado presenta nuevamente un corrimiento hacia la derecha, teniéndose $\mu = 425,53 \pm 0,02$ y un factor de Fano $F=0,1017\pm0,0003.$

Por último, en la Figura 2.8 se repitió la simulación variando A para obtener un valor medio de carga semejante al esperado. Con $A = 22 \text{ eV}^3$ se obtuvo $\mu = 400,28 \pm 0,02$. El factor de Fano en este caso resultó $F = 0,1054 \pm 0,0004$, también contenido entre los valores esperados, como se vio en la Figura 2.4.

Tanto para el caso del flúor como para el caso del aluminio se observaron valores del factor de Fano muy semejantes entre sí, con lo cual parecería que para esta implementación de la simulación Monte Carlo, la energía inicial E_R no resulta ser un parámetro relevante para esta magnitud. Además se obtuvieron valores cercanos a los reportados en diferentes traba-



Figura 2.8: Distribución de carga simulada con el método de Monte Carlo, forzando el parámetro A para que el pico se encuentre en los $400,28 \pm 0,02$ electrones esperados para los $1500 \,\text{eV}$ de energía de los rayos X del aluminio. El valor necesario para esto suceda fue $A = 22 \,\text{eV}^3$ y el factor de Fano obtenido $F = 0,1054 \pm 0,0004$.

jos^[15, 16, 20–22] tanto por medio de simulaciones como por mediciones.

De estas simulaciones se esperaba poder comprender mejor una de las posibles razones de por qué el factor de Fano es menor a la unidad en las mediciones experimentales. La hipótesis que sustentan las simulaciones es que el proceso pierde su carácter poissoniano por depositarse toda la energía en el interior del material y que una fracción de ella no se utiliza para ionizar sino para producir fonones.

Capítulo 3

El experimento

En este capítulo se describe el experimento realizado en Fermilab¹ para la obtención de los datos utilizados en esta tesis. Si bien la toma de datos no formó parte de este trabajo, como se verá más adelante, su descripción se vuelve necesaria para explicar algunos de los fenómenos observados.

3.1. Configuración experimental

Se describe a continuación el sistema de medición empleado durante el experimento y la estrategia utilizada para obtener los fotones de fluorescencia del flúor y aluminio.

3.1.1. Detector utilizado

El detector utilizado fue un *fully-depleted* CCD de 200 μ m de espesor, del tipo *back-iluminated*, es decir, que se expone a la radiación incidente la parte trasera del dispositivo y luego las cargas generadas migran hacia el lado contrario, donde son colectadas por los potenciales generados por las pistas en la cara posterior. La zona muerta en la parte trasera del CCD estaba compuesta por tres capas: una capa de ~ 20 nm de óxido de indio y estaño (ITO, por sus siglas en inglés: *Indium Tin Oxide*), una capa de ~ 38 nm de dióxido de circonio (ZrO₂) y una última capa de ~ 100 nm de dióxido de silicio (SiO₂). El CCD estaba dividido en cuatro cuadrantes, denominados OHDU, con un amplificador de salida en la esquina de cada cuadrante, permitiendo la lectura en simultáneo de todos ellos. Cada cuadrante consiste en 2063 filas y 443 columnas, y cada píxel tiene una dimensión de 15 μ m × 15 μ m.

¹Laboratorio Nacional de Aceleradores Fermi en Estados Unidos.

3.1.2. Cámara de vacío

El Skipper-CCD se encontraba alojado dentro de una cámara de vacío fabricada a partir de un cubo macizo de aluminio de 20 cm de lado, denominado *dewar* (Figura 3.1). El sensor fue operado a 123 K para disminuir la producción de cargas en el silicio por fluctuaciones térmicas (corrientes oscuras). Para evitar que los fotones infrarrojos emitidos por las paredes de la cámara, que se encontraban a temperatura ambiente, lleguen al detector, este se cubrió con una caja de cobre en contacto térmico con la misma estructura donde se encontraba el detector. Para evitar la condensación de humedad sobre la superficie del detector debido a las bajas



Figura 3.1: Esquema frontal del *dewar* y el posicionamiento del sensor. El sensor se encuentra montado detrás de una placa de cobre con un abertura rectangular por donde la radiación incidente alcanza al sensor. A su vez, se cubren las esquinas laterales del sensor con otras dos láminas de cobre para evitar la exposición de esas regiones del CCD, donde es desplazada la carga para posteriormente ser medida.

temperaturas, se hizo vacío en el *dewar* mediante la utilización de una bomba turbo-molecular capaz de alcanzar una presión del orden de los 10^{-5} mbar.

También fue necesaria la utilización de un calentador eléctrico para controlar la temperatura del sensor por dos razones principales: evitar que la temperatura de operación del sensor sea menor a 110 K, debido a que la eficiencia de la transferencia de carga entre píxeles del sensor se ve disminuida para temperaturas menores a esta; y para regular la velocidad de enfriamiento del sensor, dado que podría comprometerse su integridad estructural si esta superaba 1 K/s.

3.1.3. Fuente de 241 Am

En las mediciones estudiadas en este trabajo, se utilizó una fuente radioactiva de ²⁴¹Am electrodepositada, que emitía partículas α con energía de ~ 5,6 MeV, una actividad de 1 μ C y un

diámetro de 5 mm. Para obtener los rayos X de fluorescencia del flúor y del aluminio, se colocaron dentro de la caja de cobre, frente al sensor, una cinta de Teflón (material que contiene flúor), y una placa de aluminio. La fuente radioactiva se encontraba debajo de esta caja de cobre, a la cual se le hizo un orificio por donde ingresaban las partículas α que impactaban en los materiales mencionados, como muestra el esquema de la Figura 3.2. Esto producía excitaciones en sus nubes electrónicas que luego, al desexcitarse, emitían los fotones de fluorescencia que alcanzaban al sensor.



Figura 3.2: Esquema frontal de la caja de cobre donde se posicionaron la cinta de teflón y la placa de aluminio. Se esquematiza el orificio por donde ingresan las partículas alfa. El sensor se encuentra montado frente de esta, detrás de la placa de cobre del esquema de la Figura 3.1, de forma que los rayos X de fluorescencia producidos por el aluminio y el teflón impacten sobre él.

En el esquema de la Figura 3.3 puede verse un corte lateral de la cámara. Del lado derecho se encuentra la caja de cobre que contiene el material que se utiliza para producir los rayos X (flúor o aluminio) y la fuente radioactiva emisora de partículas α . Del lado izquierdo puede verse la estructura que sostiene el detector y la pieza de cobre destinada a regular la temperatura del mismo.

Por otro lado, como los fotones de la fuente radioactiva eran capaces de impactar en cualquier parte de la superficie de la caja de cobre, este podría producir también fotones de fluorescencia. Para evitar esto se recubrió el interior de la caja de cobre con cinta *Kapton*, la cual está compuesta por átomos de bajo número atómico Z (Carbono principalmente), que en caso de emitir fotones de fluorescencia, lo harían a energías menores a las estudiadas en este trabajo.


Figura 3.3: Esquema lateral del *dewar*. Del lado izquierdo se encuentra la placa de cobre con la abertura para el sensor (vista lateral del esquema 3.1) el cual está en contacto con una pieza de cobre fría para mantenerlo a 123 K. Del lado derecho se encuentra la caja de cobre con la pieza de aluminio o de flúor, posicionada en ángulo y por encima del orificio por donde pasan las partículas alfa de la fuente radioactiva (vista lateral del esquema 3.2).

3.2. Mediciones con rayos X

Las mediciones se realizaron exponiendo la mitad central del sensor a la radiación incidente y dejando las mitades laterales donde se encuentran los amplificadores cubiertos por láminas de cobre, como se ve en el esquema de la Figura 3.1, de forma de evitar su exposición. Los cuatro cuadrantes del sensor son expuestos por un breve período de tiempo a la radiación (decenas de milisegundos), para rápidamente desplazar la carga colectada a la zona del sensor cubierta por las láminas de cobre y evitar que siga recibiendo interacciones durante el proceso de lectura. Este procedimiento es importante porque si no se mueve la carga rápidamente a la región cubierta, la actividad de la fuente saturaría de eventos el detector haciendo imposible la diferenciación de eventos en las imágenes.

Luego, para las mediciones de la carga se utilizaron 300 muestreos por píxel, que corresponde a un tiempo de lectura de aproximadamente 11 minutos por imagen. En cada una de ellas fueron utilizadas 50 filas del sensor, donde para cada una se midieron 500 píxeles, de los cuales 7 fueron de *pre-scan*, 50 de *over-scan* y 443 de región activa. El *pre-scan* son píxeles adicionales del registro horizontal, cuyo fin es el de proveer un retardo para que la señal de video se estabilice y así poder realizar adecuadamente las mediciones subsiguientes. El *over-scan*, por su parte, también corresponde a píxeles adicionales del registro horizontal: si el registro horizontal cuenta con 443 píxeles, cuando el primer píxel con carga es desplazado hacia nodo de sensado, quedarán 442 píxeles con carga por leer y un píxel vacío al final. Este es el primer píxel del *over-scan*. Cuando el segundo píxel con carga es desplazado hacia el nodo de sensado, quedarán 441 píxeles por leer y 2 píxeles vacíos al final, con lo cual ahora hay 2 píxeles de *over-scan*. De esta forma, a medida que se van leyendo los píxeles de la fila, se van vaciando píxeles al final, que a su vez son desplazados junto con los píxeles con carga hacia el nodo de sensado. Esto hace que el tiempo de exposición a las interacciones de estos píxeles sea mucho menor y, por ende, la probabilidad de capturar carga de estos es muy baja.

Luego de la lectura, las 300 mediciones tomadas para cada píxel fueron promediadas y los píxeles del *over-scan*, debido a su baja probabilidad de colectar carga durante el proceso de lectura, fueron usados para calcular y extraer la línea de base de cada fila. Este proceso es necesario en la calibración para poder establecer el valor en ADU's correspondiente al 0 de carga para cada una de las filas del sensor.

Las imágenes resultantes luego de la medición y el promediado contienen 50×500 píxeles por cada cuadrante y la carga es medida en unidades electrónico digitales (ADU's), que posteriormente son convertidas en electrones usando la calibración absoluta del sensor, como fue explicado en la Sección 1.5.

Capítulo 4

Caracterización y corrección de sesgos

4.1. Procesado de las imágenes

Los datos obtenidos durante el proceso de medición se almacenan en un tipo de imagen de formato .fits. Cada píxel de esa imagen corresponde a la carga medida en el nodo de sensado en ADU's. Si se decidió realizar un número N de muestreos por cada píxel del sensor usando el modo *Skipper*, entonces la imagen .fits producida tendrá N píxeles por cada píxel real del sensor. Por ejemplo, si el sensor estuviera conformado por 16 píxeles, 4 filas y 4 columnas y el número de muestreos elegido fuera de 3, la imagen resultante tendría una dimensión de 4 filas por 12 columnas, como se ve en la Figura 4.1. Por esta razón, resulta necesario procesar la imagen generada, promediando los N muestreos por píxel y así obtener una lectura de carga con muy bajo ruido a la vez de disminuir drásticamente el tamaño y peso de la imagen.

El procesamiento de las imágenes es llevado a cabo por el programa skipper2root.exe, el cual genera una nueva imagen de formato .fits, ya promediada y con el tamaño correspondiente a la cantidad total de píxeles del sensor que se utilizaron en la medición. A su vez, es este programa el que se encarga de restar la línea de base, utilizando las columnas del *over-scan*, de forma de establecer el valor nulo de carga para cada píxel vacío en las filas del sensor.

Además, es necesario poder reconocer los conjuntos de píxeles contiguos con carga que pertenecen a un único evento. A este proceso se lo conoce como clusterización y, con este fin, se utiliza otro programa, el cual hace uso de una calibración lineal para transformar de ADUs a electrones además de reconocer los conjuntos de píxeles con carga por medio de un algoritmo de clusterización. Este programa se llama skExtract.exe y procesa todas las imágenes que skipper2root.exe generó para así formar un nuevo tipo de archivo, de formato .root, con toda la información de los eventos encontrados en las imágenes.

Estos nuevos archivos .root tienen la información de la carga de los eventos medidos en



Figura 4.1: Ejemplo de la imagen obtenida de medir con un sensor de 4×4 píxeles utilizando un muestreo de 3 lecturas por píxel, antes de realizar el promediado de la carga. La imagen resultante es de 4×12 píxeles.

cada imagen, con ruido subelectrónico, gracias al muestreo realizado utilizando el modo *Skipper*, además de muchos otros parámetros propios de los eventos, como ser la varianza en x, varianza en y, cantidad de píxeles por cluster, entre otros.

Algo a tener en cuenta es que la calibración utilizada por skExtract.exe es nominal y se realiza solamente para que el archivo .root tenga la carga en unidades de electrones, al menos de forma aproximada, y pueda realizar el proceso de clusterización que une píxeles no vacíos y contiguos. Posteriormente y para mejorar la precisión de los análisis que se harán sobre los datos, es necesario volver a calibrar la relación ADU-electrones y para esto es necesario realizar la calibración absoluta tal como fue descripta en la Sección 1.5. Esta calibración se obtiene ajustando un polinomio de orden 4 de la forma

$$e^{-} = \alpha ADU + \beta ADU^{2} + \gamma ADU^{3} + \delta ADU^{4}$$

sobre los datos y es distinta para cada uno de los cuadrantes del sensor, ya que cada uno de ellos cuenta con un amplificador diferente. Los coeficientes que se obtienen de esta calibración, para cada cuadrante, se guardan en un archivo de formato .txt. Cabe destacar que esta corrección en la calibración se hace posteriormente al proceso de clusterización (es decir, luego de correr skExtract.exe) y sobre cada uno de los píxeles de los eventos de interés encontrados.

Finalmente, se utilizan programas que son los encargados de tomar los archivos .root y a partir de estos realizar los análisis estadísticos utilizando C++ y las librerías para análisis de

datos científicos desarrolladas por el CERN llamadas *ROOT*. Esto es, determinar el factor de Fano y la energía de creación electrón-hueco tanto para el flúor como para el aluminio, por medio de un ajuste *no bineado*. Para eso se hicieron dos programas diferentes, uno para cada elemento y se llamaron Al_Fano_Unbinned_fit.C y F_Fano_Unbinned_fit.C. Estos programas utilizan los coeficientes obtenidos de la calibración absoluta para contar con precisión la cantidad de carga de cada evento. También en ellos se implementan los cortes de calidad que filtran los eventos no deseados y dejan los que se deseen estudiar. Estos cortes de calidad son tanto de forma como de carga:

- Se filtran eventos cuyo tamaño supere cierto radio establecido;
- Se filtran eventos cuyas longitudes tanto en x como en y no se encuentren entre un valor mínimo y un valor máximo establecido;
- Se filtran eventos cuya carga total no se encuentre comprendida entre un valor mínimo y un valor máximo, de forma de mirar eventos con carga cercana a la de los picos de los rayos X de F o Al.

Una vez que se tienen los eventos deseados, el programa realiza los histogramas de carga correspondientes que luego pueden ser usados para realizar un ajuste bineado de los datos. El ajuste bineado consiste en tomar el histograma de carga y ajustar los datos con el modelo utilizado minimizando χ^2 para obtener μ , σ y β , donde μ es el valor medio del pico, σ es su dispersión y β es un parámetro que da cuenta de la colección parcial de carga, como se verá en el Capítulo 5. Por otro lado, el ajuste no bineado consiste en tomar los parámetros resultantes del ajuste bineado, inyectarlos en el modelo con el que se desea ajustar y calcular la verosimilitud para todo el conjunto de datos. En este caso, se fija el valor de β y se dejan libres μ y σ que son variados hasta que se maximiza la verosimilitud. Los parámetros que maximicen la verosimilitud serán los parámetros óptimos para el ajuste. La necesidad de utilizar un ajuste bineado previamente para calcular los parámetros surge de que favorece la velocidad de convergencia del ajuste no bineado.

A partir del análisis de las imágenes previamente descripto se obtienen: el factor de Fano, la energía de creación electrón-hueco y el espesor de la zona de colección parcial de carga.

4.2. Impacto del corte propuesto

En este trabajo se propone analizar un conjunto de imágenes, eliminando los eventos de un electrón presentes en ellas. Se trabaja sobre la hipótesis de que esto deberá incrementar el conteo

de eventos con la cantidad de carga deseada y se espera que esta mejora en la estadística redunde en mayor precisión en la determinación de las cantidades de interés. Sin embargo, aplicar este corte trae aparejado un sesgo en el conteo de carga de cada evento que debe corregirse.

Es pertinente entonces cuantificar el aumento en la estadística al realizar el corte mencionado y así motivar el análisis en busca de una mejora en el cálculo de las incertezas de las cantidades de relevancia para este trabajo.

El parámetro clave para llevar esto a cabo se llama EPIX y es un valor umbral que define a partir de qué cantidad de carga en un píxel se cuenta o no como un píxel vacío. El mismo forma parte del programa de reconocimiento de clusters (skExtract.exe). Por ejemplo, para EPIX=0.5, todos los píxeles con carga menor o igual a 0,5 se cuentan como píxeles vacíos, y los que tengan carga mayor a 0,5 serán contabilizados normalmente; para EPIX=1.5, todos los píxeles con carga menor o igual a 1,5 se cuentan como píxeles vacíos y los píxeles con carga mayor a 1,5 se cuentan normalmente. En la Figura 4.2 puede verse un esquema de un histograma de los niveles de carga y dónde se sitúa el umbral EPIX para realizar el corte.



Figura 4.2: Histograma de los datos obtenidos al iluminar el CCD con LED, correspondiente a una región con poca ocupación, donde se han marcado con dos rectas verticales los umbrales para EPIX=0.5 y 1.5. Depende de cuál umbral sea usado, toda la carga que se encuentra a la izquierda del umbral se considera nula.

En el trabajo predecesor de esta tesis^[18], los valores obtenidos para el factor de Fano y energía de creación electrón-hueco, fueron calculados utilizando un valor de EPIX=0.5. Se espera que al modificar este parámetro, el número de eventos varíe y que, en particular, aumente cuando el EPIX aumenta. Esto se debe a que es muy común que se tenga un evento de interés, por ejemplo un cluster de 4 píxeles de área con una carga total de 180 electrones (para el caso del flúor) y alrededor de este se acumulen píxeles con eventos de fondo de, por ejemplo, 1 o muy raramente 2 electrones. En estos casos podría suceder que la conexión entre estos clusters de interés y los eventos de 1 electrón de fondo se extienda lo suficiente como para que

el algoritmo reconozca un gran cluster con exceso de carga y sea desechado por el programa de análisis dado que no cumple con los cortes de calidad impuestos. También podría suceder que estos píxeles con eventos de un electrón de fondo conecten dos clusters de interés, lo cual es un caso más extremo, dado que el algoritmo reconocería un único cluster de ~ 360 electrones, de forma que se perderían, no uno, sino dos eventos que podrían aportar positivamente a la estadística. Al aplicar un umbral que elimine los píxeles con eventos de un electrón de fondo que se amontonan y/o conectan con clusters, el programa es capaz de diferenciar y contar los eventos correctamente.

En la Figura 4.3 se muestra un ejemplo de un evento de 179 electrones para una medición con flúor, que es un evento de interés que el programa debería reconocer, y que hasta que no se eliminan los eventos de un electrón de la imagen, el programa lo identifica como un gran cluster con aproximadamente 40 electrones más de carga y sin una forma definida (imagen central, píxeles pintados de blanco). A la derecha la imagen con el cluster individualizado y reconocido correctamente por el algoritmo al eliminar la carga excedente.



Figura 4.3: Ejemplo del caso de un evento cercano a los 180 electrones de carga, que son los eventos de interés. En la imagen de la izquierda se ve la medición sin alterar (ya convertida a unidades de carga). En la imagen del centro se ve en blanco y en un degrade muy tenue de rojos los diferentes clusters que el algoritmo logra reconocer. Lo importante de esta imagen es notar que el algoritmo reconoce como un único cluster (blanco) a un número de píxeles muy grande debido justamente a que píxeles con una única carga generan la unión entre todos ellos. Por último, la imagen de la derecha contiene el cluster de interés una vez que los eventos de un electrón son desechados del análisis, haciendo que pueda contabilizarse correctamente.

En este punto es importante entender cuáles son los sesgos que afectan el conteo de carga de los eventos. En principio, el fondo puede añadir carga extra a la carga real de un cluster proveniente de un evento de interés, generando un corrimiento hacia la derecha en los picos de los espectros. Este caso puede dividirse en dos

• La carga extra que puede añadirse a los píxeles interiores (o de superficie) de un cluster.

• La carga extra que puede añadirse a los píxeles, inicialmente vacíos, inmediatamente contiguos a los píxeles de superficie de un cluster (caso apreciable en la Figura 4.3).

Sin embargo, la aplicación del umbral (o del corte) modifica estos sesgos. Debido a que este corte elimina todos los píxeles con un electrón, aquellos que inicialmente estaban vacíos pero se agregaron al cluster por efecto de fondo, ahora son eliminados (y con ellos, el segundo caso mencionado anteriormente). Pero también es posible que se eliminen píxeles con un electrón de carga que sí pertenecen a un cluster, por lo tanto, una vez aplicado el corte, los sesgos se resumen en:

- La carga extra que puede añadirse a los píxeles interiores (o de superficie) de un cluster debido al fondo.
- La eliminación de píxeles con un único electrón debido al corte, que genuinamente pertenecían a un cluster.

Se llevó a cabo entonces el análisis de las imágenes obtenidas al exponer el CCD a los rayos X del flúor, con diferentes valores de umbral de corte: EPIX=0.5, EPIX=1.5 y EPIX=2.5 y se comparó con los resultados obtenidos para el conteo total de eventos. Debe tenerse presente que estos son resultados preliminares, ya que el sesgo añadido por la aplicación del umbral al conteo de carga será posteriormente corregido.

Esto se hizo para tres de los cuatro cuadrantes del sensor y para la suma de estos, dado que el segundo cuadrante no funciona correctamente. En el gráfico de la Figura 4.4 se observa un drástico aumento en la cantidad de entradas (eventos contabilizados) cuando se varía el EPIX. Se puede ver como los cuadrantes 1, 3 y 4 tienen un cambio pronunciado en la cantidad de entradas al pasar de EPIX=0.5 a EPIX=1.5 como se esperaba, mientras que al pasar de EPIX=1.5 a EPIX=2.5 el aumento es mucho menos pronunciado. Particularmente, es el primer cuadrante el que registra el mayor incremento en la cantidad de entradas en relación a los otros.

En la Tabla 4.1 se presentan los valores precisos del cambio en el número de entradas para cada cuadrante y para cada valor de EPIX. El primer cuadrante pasa de tener 760 entradas para EPIX=0.5 a tener 2272 para un EPIX=1.5, casi el triple, es un aumento de ~ 198%. En cambio, los cuadrantes 3 y 4 pasan de tener 1571 y 1503 entradas a 2229 y 2320, aumentos muy similares y en torno al ~ 40% y ~ 50% respectivamente.

Habiendo tomado este rumbo, es necesario poder remover el sesgo producido por la eliminación de carga en los eventos medidos al aplicar este umbral. Si bien este proceso genera un aumento en la estadística, también genera un corrimiento hacia la izquierda en los picos de los espectros que debe ser corregido. Además, también es necesario remover el exceso de carga que



Figura 4.4: Gráfico de barras para la diferente cantidad de entradas contabilizadas por el programa, tanto para valores diferentes de EPIX como para los diferentes cuadrantes del sensor. OHDUT hace referencia a la suma de las entradas del resto de los cuadrantes funcionales (1, 3 y 4). Se observa un aumento de más del doble en la cantidad de entradas para el primer cuadrante, y un aumento importante pero menos pronunciado para el resto de los cuadrantes.

	OHDU 1	OHDU 3	OHDU 4	OHDU $1 + 3 + 4$
EPIX=0.5	760	1571	1503	3834
EPIX=1.5	2272	2229	2320	6821
EPIX=2.5	2399	2261	2356	7016

Tabla 4.1: Diferentes valores para las entradas, para cada uno de los cuadrantes, para los diferentes valores de EPIX utilizados.

tengan los clusters de debido al fondo presente en las imágenes y que en este caso genera un corrimiento a la derecha de estos picos. Más adelante, la idea es intentar comprender este fondo en las imágenes y con ello poder aplicar correcciones a los valores de carga de los clusters, una vez aplicado el umbral y así mejorar la incerteza de los resultados.

4.3. Caracterización de las imágenes

Todo el análisis cuantitativo anteriormente descripto se realizó sin la necesidad de inspeccionar visualmente las imágenes de las cuales se extraen los datos. Simplemente se aplicaron diferentes umbrales de prueba y se contabilizó el aumento en la estadística. Sin embargo, ver las imágenes y rápidamente poder reconocer patrones, como exceso de eventos en una misma región para diferentes imágenes o cualquier característica que visualmente sea reconocible pero que al analizar los datos de forma automatizada pueda quedar ofuscada, es un factor importante a la hora del estudio de los datos. Dado que la cantidad de imágenes utilizadas en este trabajo es superior a las 900, observar una por una es una tarea monumental e impracticable. Por esta razón fue necesario buscar maneras de poder extraer información contenida en todas las imágenes, de forma práctica y realizable, como por ejemplo, generar una imagen *promedio*. Con este fin, se hizo un análisis visual, cualitativo y cuantitativo de las imágenes para comprender mejor los datos, explorar las características del sensor y de cada uno de sus cuadrantes y poder reconocer posibles deficiencias o particularidades relevantes.

Uno de los primeros factores a caracterizar tiene que ver con la carga de los píxeles que no es debida a eventos de interés. Estos pueden ser producto de corrientes oscuras (electrones que sufren excitaciones espontáneas debido a fluctuaciones térmicas del sensor), rebotes de un fotón de baja energía en las paredes de la cámara de vacío donde se encuentra el sensor, etc. No es sencillo y no existe una única manera de estimar el fondo en un sensor, por lo que se ensayaron diferentes maneras de encarar este análisis.

Lo primero que se hizo fue buscar la manera de explorar solamente los píxeles que tuvieran una única carga. Asumiendo que en la gran mayoría de los casos, los píxeles con una única carga que se encuentran aislados de otros píxeles o de clusters de interés, son eventos que forman parte del fondo del sensor, es natural empezar el análisis con estos. Una forma de caracterizar esto es tomar las imágenes y extraer todos los píxeles donde la carga sea mayor que un electrón. De este modo, se obtienen imágenes donde solo hay eventos de un electrón y todo lo demás son píxeles vacíos. En la Figura 4.5 se puede ver una típica imagen tomada con el sensor, para el primer cuadrante, en la que claramente pueden observarse algunos eventos muy brillantes y un intenso fondo. En la imagen 4.6 en cambio puede verse la imagen resultante de extraer todos los píxeles cuya carga es mayor a un electrón.



Figura 4.5: Ejemplo de imagen tomada con el primero cuadrante del sensor para una medición con rayos X de flúor.



Figura 4.6: Imagen resultante luego de ser extraídos los píxeles con carga mayor a 1 electrón.

Una vez que se extraen los píxeles de carga mayor a uno, se promedian todas las imágenes resultantes y se obtiene una única imagen que condensa la información de todas las anteriores. En este contexto, promediar las imágenes implica tomar el arreglo matricial con los valores de carga de los píxeles que conforman las imágenes, y realizar la suma convencional de matrices para las más de 900 imágenes. Finalmente, se divide cada elemento de la matriz suma por la cantidad total de imágenes y se obtiene una imagen donde cada píxel es el promedio de carga de ese píxel para todas las imágenes. De esta forma se puede ver si existen píxeles con mayor o menor tendencia a contener este tipo de eventos.

En la Figura 4.7 se tiene una imagen por cada cuadrante del sensor, promediados en las ~ 900 imágenes tomadas, donde los píxeles más brillantes son los que tienen mayor promedio de eventos, es decir, en el total de las imágenes esos píxeles son los que más veces tuvieron un electrón de carga. Esto también puede interpretarse como una imagen de la probabilidad por píxel de que haya un único electrón: píxeles más brillantes son píxeles más propensos a tener carga.

De la Figura 4.7 pueden destacarse algunas características:

- La carga prácticamente nula (en promedio) en las regiones del pre-scan (región izquierda de 7 columnas de píxeles de extensión) y del over-scan (región derecha de 50 columnas de píxeles de extensión), lo cual es totalmente esperable dado que estos son píxeles con muy baja probabilidad de colectar cargas durante la medición, como fue descripto en la Sección 3.2. Esto se ve para todos los cuadrantes menos el segundo;
- El primer cuadrante es en promedio más brillante que el resto, y se observa un ligero gradiente de intensidad entre las filas inferiores y superiores. Esto se repite, pero en menor medida en los demás cuadrantes pero no necesariamente se observa a simple vista. Este efecto se aprecia con mayor claridad en los gráficos de la Figura 4.8;
- El segundo cuadrante capta en promedio muy poca carga. Este cuadrante del sensor no funciona correctamente;
- En los cuadrantes 3 y 4 se pueden ver columnas enteras de píxeles oscurecidas, que captaron muchísima menos carga, fenómeno que podría deberse a defectos del sensor;
- En todos los cuadrantes (menos el segundo), se observa un único píxel (posición x = 2, y = 0) donde el promedio de carga es mucho mayor al resto. Además, la primera columna de píxeles luego del pre-scan también tiene tendencia a captar más carga que el resto;
- Todos los cuadrantes tienen tendencia a tener hot píxels en el interior de la región activa, estos son píxeles aislados que tienden a tener más carga que otros. Además pueden verse líneas verticales de hot píxeles, llamadas hot columns que se producen debido a que un hot

pixel está generando carga constantemente mientras estas son desplazadas verticalmente durante la lectura.



Figura 4.7: Imágenes promedio para los 4 cuadrantes del sensor luego de remover los píxeles con carga mayor a un electrón. Puede verse en la escala de la derecha que los valores más altos que se obtienen rondan el 0,3, lo cual se puede interpretar como un 30% de probabilidad de que en ese píxel se encuentre un evento de un electrón. En general se ve que los promedios pueden estar entre 0,1 y 0,2 aproximadamente. Es decir, para los cuadrantes funcionales del sensor, cada píxel tiene una probabilidad de tener un único evento que ronda entre el 10% y el 20%.

Respecto al gradiente de intensidades que se observa entre filas superiores e inferiores de la imagen, implicaría una mayor incidencia de eventos de un electrón, en promedio, en los píxeles de las filas inferiores respecto de las filas superiores. Esto puede observarse en los gráficos de Figura 4.8, donde se ve el aumento en *la probabilidad* media por fila de que haya un evento de un electrón a medida que el número de la fila aumenta. El gráfico de arriba a la izquierda corresponde al primer cuadrante del sensor, este es el cuadrante donde más evidente se hace este gradiente lineal. La probabilidad promedio para la fila 0 del sensor es ~ 14,5 % y crece linealmente hasta ~ 18 % para la fila 50. En el gráfico de arriba a la derecha, que corresponde al segundo cuadrante, también se observa un cambio, pero solo entre las primeras 10 filas del

sensor, luego la variación de la probabilidad por fila es muy pequeña y parece aproximadamente constante. Además puede verse que los valores son un orden de magnitud menor a los del primer cuadrante. Para los gráficos de abajo a la izquierda y abajo a la derecha, que corresponden a los cuadrantes 3 y 4, se observan también variaciones entre las primeras y las últimas filas del sensor y que parecerían tener una tendencia lineal, sin embargo, en comparación a la variación del primer cuadrante, esta es mucho menor. Por esto es difícil verlo a simple vista: la variación para el primer cuadrante es de aproximadamente del 24 % mientras que la variación de los cuadrantes 3 y 4 es aproximadamente del 10 %.

Este gradiente se debe a que, dado que la medición de carga del sensor es secuencial por filas, las filas superiores en la imagen son la filas del sensor que más cerca se encuentran del registro horizontal y del nodo de sensado, con lo cual son las primeras a las que se les mide la carga. Por otro lado, las filas inferiores en la imagen, son las filas del sensor que más lejos se encuentran del registro horizontal y del nodo de sensado, con lo cual permanecen más tiempo expuestas a fuentes de fondo. En la imagen el nodo de sensado se encontraría en la esquina superior izquierda.



Figura 4.8: Variación de la *probabilidad* promedio por filas del sensor de tener un evento de 1 electrón, para los diferentes cuadrantes. Se ven aumentos lineales de la probabilidad para los casos de los cuadrantes 1, 3 y 4 y un aumento más pronunciado en relación a los demás para el primer cuadrante.

Para los análisis que se realizaron en este trabajo fueron utilizados el primer y tercer cuadrante del sensor, dado que son los cuadrantes que mejor funcionan. El segundo cuadrante es defectuoso y el cuarto cuadrante, si bien funciona, presenta muchas *hot columns* y muchas columnas oscuras, por lo que se decidió omitirlo de los análisis de los histogramas de carga.

Teniendo entonces una imagen del promedio de la cantidad de eventos de un electrón por píxel, en la búsqueda por caracterizar el fondo del sensor, lo que se hizo posteriormente fue promediar todos los elementos de esta, de forma de obtener un promedio total y poder interpretarlo como una *probabilidad* general de que en un píxel haya un evento de un electrón. Entonces, para el primer cuadrante y considerando solo la región activa del sensor, se obtuvo una probabilidad $\hat{p} = 0,1802 \pm 0,0213$, es decir, que con esta primera manera de caracterizar el fondo, hay aproximadamente un 18 % de probabilidad de que un dado píxel de la región activa del sensor tenga un electrón.

Sin embargo, esta es una forma muy rudimentaria para intentar caracterizar el fondo, además de que no es del todo correcta. Con este camino se asume que todos los eventos de un electrón son fondo, lo cual no es correcto, de forma que la probabilidad de tener un evento de un electrón en un dado píxel, calculada de esta manera, está sobrestimada.

Un camino más sofisticado para estimar el fondo en el sensor es explotando el hecho de que los eventos medidos en él siguen una distribución poissoniana: si se supone que todo píxel tiene igual probabilidad de tener una carga debido a fondo, que dicha probabilidad es pequeña para mediciones de corto tiempo y que el número de píxeles es muy grande (22150 píxeles por cuadrante), entonces es esperable que la distribución que modela estos eventos sea una poissoniana. De esta forma, si se pudiera calcular la esperanza μ de la distribución, podría saberse la probabilidad de que en un determinado píxel se encuentre un evento de un electrón o, en general, la cantidad de electrones que se desee.

4.4. Estimación del fondo

Si se considera una distribución poissoniana para la variable aleatoria *número de electrones de fondo por píxel*, dada por:

$$P(k|\mu) = \frac{\mu^k e^{-\mu}}{k!},$$

se puede tomar el caso $p = P(k = 1 | \mu) = 0,1802 \pm 0,0213$, que es la probabilidad que se obtuvo previamente para el primer cuadrante. A partir de esta se puede despejar numéricamente el valor μ que satisface la expresión anterior y resulta ser

$$\hat{\mu} = 0,2258 \pm 0,0271$$

Si bien esta forma de cuantificar el fondo es un poco más general, dado que ahora pueden contemplarse casos más raros, como que un píxel tenga más de una carga, este método sigue teniendo el problema de la sobrestimación de la probabilidad por píxel, al seguir asumiendo que todo píxel con un electrón proviene del fondo.

Siguiendo sobre el mismo camino, todavía bajo la hipótesis de que todo evento de un electrón es debido al fondo, pero evitando el cálculo de los promedios, hay una forma de calcular la esperanza de la distribución y es notando lo siguiente: si se toman las probabilidades de que haya una sola carga y ninguna carga por píxel, es decir, se toman

$$p_0 \equiv P(k=0|\mu), \qquad p_1 \equiv P(k=1|\mu)$$

y se mira la relación entre ambas, se tiene

$$\frac{p_1}{p_0} = \frac{\mu \, e^{-\mu}}{e^{-\mu}} = \mu$$

y se observa que puede hallarse directamente el valor de la esperanza de la distribución. Entonces, tomando la región activa de una imagen completa, con todos sus eventos, como la de la Figura 4.5, contando la cantidad de píxeles vacíos, la cantidad de píxeles con un electrón y calculando la relación entre ambas, para todas las imágenes, se puede obtener directamente una estimación para el parámetro μ de la distribución. De esto se obtuvo que el valor es:

$$\hat{\mu} = 0,2311 \pm 0,0001$$

Los resultados de ambos métodos difieren en menos del 5% y se solapan sus errores. Sin embargo, el valor seguirá estando sobrestimando respecto del valor real, en tanto se siga considerando a todo píxel con un único electrón como fondo.

No hay que perder de vista que el objetivo de calcular la esperanza de la distribución es poder utilizarla para estimar cuánta carga extra hay sobre los clusters debida al fondo y cuánta carga de interés fue removida debido al umbral aplicado. Conociendo la esperanza de la distribución de eventos de fondo y la cantidad de píxeles que ocupa un cluster, puede calcularse la cantidad esperada de carga extra que se halla en cada cluster debido a eventos de fondo. Teniendo estos valores, puede corregirse el sesgo introducido en el valor de la carga de cada cluster debido al corte aplicado y con eso hacer una mejor determinación del factor de Fano y la energía de creación electrón-hueco. No solo es necesario corregir la carga por exceso, sino también por defecto. Por ello, la esperanza que se obtuvo de calcular la relación entre eventos de un electrón y píxeles vacíos contiene tanto información de eventos de fondo como información de eventos genuinos. Pero lo que se persigue es poder identificar los eventos de un electrón de fondo y los genuinos por separado. En ese sentido puede decirse que

$$\mu_T = \mu_{bkg} + \mu_g$$

donde μ_{bkg} es la esperanza de la distribución de la variable aleatoria *cantidad de eventos de fondo por píxel*, mientras que μ_g es la esperanza de la variable aleatoria *cantidad de eventos genuinos por píxel*. Hay que lograr separar ambos efectos para poder aplicar las correcciones correctamente. Queda claro que hasta el momento solo se calculó μ_T , sin poder discriminar ambas contribuciones. La forma en la que se llevó a cabo la separación entre ellas se detalla a continuación.

4.4.1. Cálculo de las contribuciones de carga

Hasta el momento, ambos métodos utilizados para calcular μ_T consistían en analizar los eventos de un electrón en toda el área activa del sensor. Sin embargo, esto traía aparejada una sobre estimación en los cálculos dado que se asumió que todo evento de un electrón era fondo, lo cual no es cierto. Por otro lado, considerando que la distribución de eventos por píxel tiene tanto contribuciones de fondo como genuinas, es necesario poder separar ambas contribuciones y no existe forma de hacerlo al estudiar el área activa del sensor sin tener en cuenta la posición de los clusters.

Para poder separar ambas contribuciones al calcular el μ_T , se puede restringir el análisis al entorno cercano de los clusters, donde ahora por clusters se entiende todo conjunto de píxeles donde cada uno tenga como mínimo dos electrones de carga (eventualmente podría ser un único píxel con dos electrones). Es decir, se toma una imagen que tiene eventos de dos o más electrones, y se remueven los píxeles con un solo electrón. En la imagen de la Figura 4.9 se muestra como luce una imagen luego de aplicar este corte. En el entorno cercano de los



Figura 4.9: Ejemplo de imagen tomada con el primer cuadrante del sensor para una medición con rayos X del flúor, de la que se han removido todos los píxeles con un único electrón.

clusters, más precisamente, en los píxeles inmediatamente contiguos a los píxeles con carga, a partir de ahora *primer borde*, es la región donde se puede decir con seguridad que coexisten ambas contribuciones: fondo y eventos genuinos. En cambio, la región formada por los píxeles

que se encuentran separados por un píxel entre ellos y los eventos, a partir de ahora *segundo borde*, es la región donde la probabilidad de que haya eventos de un electrón que sean genuinos y que por difusión terminaron alejados de su cluster es tan baja que puede considerarse nula.







Figura 4.10: Diferentes partes del proceso de análisis de los bordes de los clusters para una imagen de ejemplo. En cada figura se ve una porción de 25×100 píxeles de área. En la primera imagen (de arriba a abajo) se tienen los clusters de dos o más electrones. En la segunda imagen se representa la dilatación de los clusters aumentando en un píxel en todas las direcciones. En la tercera imagen se ve la diferencia entre las dos primeras imágenes y se la define como la máscara a utilizar. En la cuarta se ve la máscara y superpuestos todos los eventos de un electrón de esa porción del sensor. Finalmente, en la quinta se ven solo los eventos de un electrón que cayeron encima de los píxeles de máscara. Son estos eventos los que se cuentan en todas las imágenes, junto con los píxeles vacíos de la máscara para estimar μ_T .

Con lo cual, en esta región y toda región más lejana a los clusters puede considerarse que los eventos de un electrón que se encuentren solo pueden deberse a fondo.

Sabiendo que existe una región donde se encuentran ambas contribuciones juntas y otra región donde solo se puede encontrar la contribución de fondo se pueden calcular y obtener ambas contribuciones por separado.

El método utilizado consistió en tomar el primer borde de los clusters para calcular allí el valor de μ_T . El procedimiento se basó en formar una máscara del primer borde de los clusters. Para eso se tomaron todos los eventos de dos o más electrones y se los expandió un píxel en todas las direcciones para formar la primera etapa de la máscara. Luego, se vació el interior de esta dejando solo sus contornos, que coinciden con los píxeles contiguos a los bordes de los clusters. Luego, superponiendo la máscara sobre la imagen original (ahora con todos los eventos), se cuentan los píxeles con eventos de un electrón y los píxeles vacíos que cayeron sobre la máscara.

Nuevamente, calculando la relación entre eventos de un electrón y píxeles vacíos, se obtiene para el primer cuadrante $\hat{\mu}_T = 0,2049 \pm 0,0002$, dado que en el primer borde se encuentran las dos contribuciones. En la Figura 4.10 puede verse gráficamente cada uno de los pasos que se llevó a cabo para generar la máscara y contabilizar los eventos de un electrón que se solapan con ella.

Conociendo el valor de μ_T , resta obtener la contribución del fondo que da origen a μ_{bkg} . En primer lugar se ensayó utilizar la región conformada por el segundo borde y los píxeles aún más lejanos para calcular el μ_{bkg} , es decir, toda la región restante del sensor donde hay eventos de fondo. Para esto, utilizando la máscara previamente obtenida, en vez de observar los eventos de un electrón de la imagen original que solapan con ella, se cuentan los eventos de un electrón y los vacíos que están fuera de ella. De calcular la relación entre ambos, como se hizo previamente, se obtiene que el valor para el valor medio de la contribución del fondo es $\hat{\mu}_{bkg} = 0.1621 \pm 0.0001$.

Sin embargo, esta forma de calcular el fondo puede mejorarse un poco más. El objetivo del cálculo de estos valores medios es poder utilizarlos para corregir la carga medida en los clusters, debido al fondo y al umbral utilizado. Es por eso que los valores de las contribuciones que se están buscando deben ser los más representativos para los sesgos de estos eventos. Utilizar eventos de un electrón que se encuentran lejos de los eventos de interés para calcular estas correcciones no sería del todo correcto. Con lo cual, para calcular el valor de μ_{bkg} más representativo a los clusters, se optó por mirar únicamente el segundo borde y no todo el resto del sensor.

El procedimiento es el mismo que para el primer borde, pero ahora expandiendo los clusters

en dos píxeles en todas las direcciones, y quedándose únicamente con el segundo borde, donde no hay píxeles con carga genuina y donde se tienen los eventos de fondo más representativos para los clusters. Este proceso puede verse en la imagen 4.11. Nuevamente, de la relación entre los eventos de un electrón y los píxeles vacíos que se solapan con la máscara, se obtiene para el primer cuadrante $\hat{\mu}_{bkg} = 0,1902 \pm 0,002$. Finalmente, teniendo el valor de $\hat{\mu}_T$ y el valor de $\hat{\mu}_{bkg}$ queda determinado el valor de $\hat{\mu}_g$.



Figura 4.11: Análoga a la Figura 4.10, pero para el caso de 2 dilataciones, de forma de generar una máscara en el segundo borde. Los pasos son los mismos antes descriptos. De este proceso se halla la esperanza μ_{bkg} .

De realizar estos análisis se obtuvieron los valores para las esperanzas de ambas contribu-

ciones, calculadas sobre el conjunto de más de 900 imágenes provenientes de mediciones de los rayos X del flúor y para el primer cuadrante del sensor, que resultaron ser:

$$\hat{\mu}_T = 0,2040 \pm 0,0002$$

y el valor de la esperanza para los eventos de fondo resultó ser

$$\hat{\mu}_{bkg} = 0.1961 \pm 0.0002$$

con lo cual, la esperanza para los eventos genuinos es

$$\hat{\mu}_g = 0{,}0079 \pm 0{,}0003$$

El mismo análisis puede repetirse para los demás cuadrantes. En este caso se decidió repetirlo para el tercer cuadrante que fue el otro cuadrante que se utilizó en los resultados de este trabajo, obteniéndose:

$$\hat{\mu}_T = 0.1357 \pm 0.0003$$

 $\hat{\mu}_{bkg} = 0.1186 \pm 0.0002$
 $\hat{\mu}_q = 0.0172 \pm 0.0004$

4.4.2. Corrección al sesgo en el conteo de carga

El punto del análisis anterior era generar las herramientas para corregir el conteo de carga que hace el programa de reconstrucción de eventos luego de aplicar el umbral que elimina todos los eventos menores a dos electrones y dado que estos pueden también tener eventos extra debido a fondo.

Esta corrección se llevó a cabo modificando el código del programa que es usado por *ROOT* para calcular el factor de Fano, la energía de creación electrón-hueco, y otras variables por medio del ajuste no bineado de los espectros de carga (Al_Fano_Unbinned_fit.C y F_Fano_Unbinned_fit.C, para cada elemento). Los espectros son reconstruidos utilizando la información de los clusters que está contenida en el archivo .root generado por skExtract.exe al procesar las imágenes, como se describió en la Sección 4.1. Al contar la carga de estos clusters y conociendo el área de los mismos (cantidad de píxeles que los conforman), se agrega y se quita carga en función de los valores hallados en la sección anterior.

Para calcular la cantidad de carga que se espera que tenga un cluster de N píxeles, se

puede hacer uso de las propiedades de la esperanza. Sea $Y = \sum_{i=1}^{N} X_i$, donde X_i son distintas realizaciones de la variable aleatoria con distribución poissoniana y N es el número de píxeles del cluster, entonces la esperanza de la nueva variable aleatoria Y se calcula como

$$E(Y) = E\left(\sum_{i=1}^{N} X_i\right) = \sum_{i=1}^{N} E(X_i) = \sum_{i=1}^{N} \mu_i$$

pero como X_i son distintas realizaciones de la misma variable aleatoria, entonces tienen todas la misma esperanza, es decir $\mu_i = \mu \forall i$, con lo cual

$$E(Y) = N\mu$$

es por esto que la cantidad de carga esperada para un cluster viene dada por el producto entre la esperanza de la distribución y la cantidad de píxeles del cluster. De esta forma, sabiendo que la esperanza se puede escribir como $\mu_T = \mu_{bgk} + \mu_g$, las correcciones se pueden realizar aplicando esta misma receta a los valores de carga por cluster: se espera que la carga genuina removida por el umbral sea $N\mu_g$ y que la carga de fondo en su interior sea $N\mu_{bkg}$. Este proceso puede realizarse dado que, para los tamaños de los eventos con los que se trabaja existe una relación casi 1-1 entre su área y la cantidad de píxeles en sus bordes, como se observa en la Figura 4.12. Cabe destacar que la aplicación de las correcciones se realiza sobre los datos a los



Figura 4.12: Perímetro promedio de los clusters, en función de área o cantidad de píxeles. Se ajustan los datos con una recta cuya pendiente resultó $m = 0.938 \pm 0.026$, lo cual permite usar áreas como estimador de las superficies.

cuales ya se les ha aplicado el umbral de corte para eliminar eventos de un electrón, de forma que el fondo presente en los bordes de los clusters ya ha sido removido, al igual que los eventos genuinos de un electrón que pudiera haber en ellos. Si n_e es la cantidad de carga medida en un dado cluster, la corrección de este valor de carga será n_c y viene dada por

$$n_c = n_e + N(\mu_g - \mu_{bkg})$$

es decir, se agrega la cantidad de carga que se estima se pierde en los bordes por aplicar el umbral EPIX=1.5 y se quita la carga estimada de fondo en el interior de los clusters. En la práctica este procedimiento es simplemente agregar una línea en el código, justo después de la medición de carga de un cluster, donde se actualiza el valor de carga con la expresión anterior.

El método descripto se utilizará para corregir el sesgo introducido al cambiar EPIX de 0.5 a 1.5, eliminando con ello píxeles con un solo electrón y el sesgo preexistente por los eventos de un electrón de fondo que se superpusieron con los clusters. Los resultados finales se presentan en el Capítulo 6.

Capítulo 5

Modelado analítico de la PCC

Además de los sesgos que añaden el fondo y el umbral utilizado sobre la determinación de las magnitudes del factor de Fano y la energía de creación electrón-hueco, la colección parcial de carga juega un rol fundamental en la determinación precisa de estas magnitudes. Como se verá en este capítulo, el efecto de este fenómeno resulta particularmente apreciable para las mediciones realizadas con los rayos X emitidos por el flúor y aluminio, por ser su energía significativamente menor que la emitida por los X del ⁵⁵Fe estudiado en trabajos previos^[10, 18, 23].

5.1. Introducción del modelo

La física detrás de los fenómenos de colección parcial de carga y eficiencia de colección de carga puede comenzar a modelarse estudiando la distancia que recorren los fotones dentro del material del sensor hasta que interactúan con él. Esta es una variable aleatoria con distribución exponencial, por lo tanto, su función densidad de probabilidad es:

$$f_Z(z) = \frac{1}{\tau_X} \exp\left(-\frac{z}{\tau_X}\right) \tag{5.1}$$

donde τ_X es la longitud de atenuación, es decir, la distancia promedio para la cual la cantidad de fotones incidentes se reduce a una fracción de 1/e de la población original. Este es un valor tabulado que depende tanto de la energía de los fotones como del material. Para el caso del silicio, puede verse en el gráfico de la Figura 5.1 la relación entre la longitud de atenuación τ_X y la energía de un fotón incidente. Por ejemplo, para el caso de la energía correspondiente a los rayos X del flúor, 677 eV, se tiene que la longitud de atenuación es aproximadamente 1 μ m, mientras que para los rayos X del aluminio, 1486 eV, la longitud de atenuación ronda los 8 μ m. Realizaciones de la variable aleatoria que sigue esta distribución son las diferentes distancias



Figura 5.1: Longitud de atenuación para el silicio en función de la energía de un fotón que incide con un ángulo de 90 $^{\circ}$ sobre el material. Datos obtenidos de *The Center for X-Ray Optics* ^[24].

que puede alcanzar un fotón que penetra en el sensor hasta generar cargas por ionización.

Por otro lado, se puede caracterizar la eficiencia de colección de carga con una función para la cual a una dada distancia de penetración z se tiene qué fracción de la carga inicial logra ser colectada. Dicha función viene dada por

$$E_{ff}(z) = 1 - \exp\left(-\frac{z}{\tau_{CCE}}\right)$$
(5.2)

donde τ_{CCE} es la distancia media para la cual la cantidad de carga ionizada que sufre recombinación cae a 1/e del total de carga inicial. En el gráfico de la Figura 5.2 se presentan los datos obtenidos de practicar el análisis propuesto por Moroni et al.^[25] sobre las mediciones obtenidas con los rayos X del F y su ajuste a partir del uso de esta función. De este ajuste se obtiene un valor $\tau_{CCE} = (0,0914 \pm 0,0027) \,\mu$ m, cantidad que representa el ancho efectivo de la región de colección parcial de carga del detector.

Se busca combinar las expressiones (5.1) y (5.2), donde la primera de ellas es una distribución y describe un proceso estocástico mientras que la segunda es una función convencional. Para esto es necesario lograr incorporar la variable aleatoria z, que viene de la función densidad de probabilidad (5.1), dentro de la función de eficiencia (5.2), de modo de obtener una nueva función densidad de probabilidad $f_{E_{ff}}$ para la variable aleatoria *eficiencia* o probabilidad de colectar carga, que será representada con la letra griega ε . La nueva variable aleatoria ε tiene una dependencia funcional conocida con la variable aleatoria z y viene definida por $\varepsilon = E_{ff}(z)$. En este sentido, dada una correspondencia uno a uno entre la vieja y la nueva variable, la probabilidad en un intervalo diferencial tiene que conservarse, con lo cual, dada la función densidad de probabilidad $f_Z(z)$ inicial y la función densidad de probabilidad final $f_{E_{ff}}(\varepsilon)$, tiene



Figura 5.2: Mediciones de la eficiencia de colección de carga como función de la profundidad y ajuste de los mismos utilizando la función de eficiencia de la colección de carga. Datos obtenidos de mediciones con rayos X del flúor de 677 eV. Del ajuste con la función de la Eq. 5.2 se obtiene $\tau_{CCE} = (0,0914 \pm 0,0027) \,\mu\text{m}.$

que valer que

$$f_Z(z) \, dz = f_{E_{ff}}(\varepsilon) \, d\varepsilon$$

de esta forma se puede escribir $f_{E_{ff}}$ en términos de la función densidad de probabilidad inicial como sigue

$$f_{E_{ff}} = f_Z \left| \frac{dz}{d\varepsilon} \right|$$

donde aparece un Jacobiano y se agrega el módulo para asegurar una dependencia no negativa. Como la nueva variable aleatoria ε es función de z, $E_{ff}(z) = \varepsilon$, entonces $E_{ff}^{-1}(\varepsilon) = z$ y se puede escribir la última en términos de ε

$$f_{E_{ff}}(\varepsilon) = f_Z \left(E_{ff}^{-1}(\varepsilon) \right) \left| \frac{dE_{ff}^{-1}(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right|$$

finalmente, resolviendo esta última se obtiene la expresión para la nueva función densidad de probabilidad, que resulta ser una Beta de parámetro $\alpha = 1$ y β libre.

$$f_{E_{ff}}(\varepsilon) = \beta (1-\varepsilon)^{\beta-1}$$

donde además se definió el parámetro β como $\beta = \frac{\tau_{cCE}}{\tau_x}$. Esta es la función densidad de probabilidad de colectar la carga producida por un fotón de una dada energía y puede verse un ejemplo de ajuste a un conjunto de datos simulados con esta distribución en la Figura 5.3.

Sin embargo, para terminar de modelar todos los efectos que contribuyen a la dispersión de la carga generada por ionización en el material, hay que considerar que, además de los efectos



Figura 5.3: Distribución de la eficiencia de colección de carga obtenida de una simulación *toy* Monte Carlo (histograma) y su ajuste con el modelo descripto (trazo continuo).

anteriores, para una dada energía no siempre se producirá la misma cantidad de carga, efecto descripto por el factor de Fano. Dado que cada proceso de ionización puede considerarse como un experimento de Bernoulli, una sucesión de interacciones puede pensarse como un fenómeno binomial (una descripción más detallada del proceso fue desarrollada en el Capítulo 2). Cuando la esperanza de dicha distribución es alta (mayor a 100 para los casos de uso en este trabajo), el límite gaussiano dado por el teorema central del límite se cumple en excelente aproximación. Con lo cual, la distribución de carga para los eventos de interés puede modelarse sin perder precisión con una distribución gaussiana de la siguiente forma

$$f_{Q_i}(q_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{q_i - \mu}{\sigma}\right)^2\right]$$

donde q_i es la cantidad de carga inicial ionizada. Para agregar esta última contribución al modelado del fenómeno, combinando todas las contribuciones, es necesario realizar la convolución de ambas densidades: la densidad de probabilidad de colectar carga dada una distancia de penetración z y la densidad de probabilidad de generar carga dada una energía inicial. Entonces, se escribe la probabilidad conjunta de ambas como

$$f_{Q_i \times E_{ff}}(q_i, \varepsilon) \equiv f_{Q_i}(q_i) f_{E_{ff}}(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{q_i - \mu}{\sigma}\right)^2\right] \beta (1 - \varepsilon)^{\beta - 1}$$

Se busca obtener una nueva función densidad $f_{Q_f \times E_{ff}}$ para la carga q_f que logra escapar de la región de PCC, sin embargo la expresión anterior está escrita en función de la carga ionizada inicial, q_i . Notando que existe una relación funcional entre ambas que se obtiene a partir de la

eficiencia ε como

$$\varepsilon = \frac{q_f}{q_i} \Longrightarrow q_f = q_f(q_i),$$

se puede realizar un cambio de variables para obtener la nueva función densidad, siempre y cuando la nueva y la vieja cumplan que

$$f_{Q_f \times E_{ff}}(q_f, \varepsilon) \, dq_f = f_{Q_i \times E_{ff}}(q_i, \varepsilon) \, dq_i$$

de donde puede obtenerse una expresión para $f_{Q_f \times E_{ff}}$ y que escribiendo explícitamente $f_{Q_i \times E_{ff}}$ resulta de la forma

$$f_{Q_f \times E_{ff}}(q_f, \varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{q_i - \mu}{\sigma}\right)^2\right] \beta (1 - \varepsilon)^{\beta - 1} \left|\frac{dq_i}{dq_f}\right|$$

donde se ha agregado un módulo al Jacobiano para asegurar la positividad, sin embargo en este caso en particular no resultará necesario.

Como $q_i = q_f / \varepsilon$, y la eficiencia $\varepsilon > 0$, en particular $\varepsilon \in (0, 1]$ entonces se tiene que

$$\left|\frac{dq_i}{dq_f}\right| = \left|\frac{d}{dq_f}\left(\frac{q_f}{\varepsilon}\right)\right| = \frac{1}{\varepsilon}$$

reemplazando esto último y acomodando términos se obtiene la función densidad de probabilidad conjunta como

$$f_{Q_f \times E_{ff}}(q_f, \varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2 \varepsilon^2}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{q_f - \varepsilon\mu}{\varepsilon\sigma}\right)^2\right] \beta (1 - \varepsilon)^{\beta - 1}$$

finalmente, integrando respecto de ε para obtener la función densidad de probabilidad de q_f se llega a la expresión final del modelo,

$$f_{Q_f}(q_f) = \int_{0}^{1} \frac{\beta(1-\varepsilon)^{\beta-1}}{\sqrt{2\pi\sigma^2\varepsilon^2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{q_f-\varepsilon\mu}{\sigma\varepsilon}\right)^2\right] d\varepsilon$$
(5.3)

el cual fue específicamente construido para describir los efectos del factor de Fano y la colección parcial de carga actuando conjuntamente. Por otro lado, al no existir una expresión analítica para la solución de esta integral, fue necesario resolverla numéricamente.

5.2. Máxima verosimilitud e incertezas en β

La determinación de los parámetros μ , σ y β del modelo descripto en la sección anterior, se llevó a cabo maximizando la verosimilitud de los datos construida utilizando la distribución (5.3), presentada en la sección anterior.

En general, dada una función densidad de probabilidad, la verosimilitud se escribe como la productoria de las densidades evaluadas en los datos medidos, en este caso, la carga colectada q_f . Es decir

$$\mathscr{L}(q_j^f|\beta,\mu,\sigma) = \prod_{j=1}^N f_{Q_f}(q_j^f)$$

Dado que se busca maximizar esta expresión, una técnica utilizada para simplificar el cálculo es maximizar su logaritmo natural, de forma que los productos se transforman en sumas y las cuentas pueden resultar más fáciles. Dado que el logaritmo es una función monótonamente creciente, maximizar el logaritmo de la verosimilitud resulta igual que maximizar la verosimilitud. En este sentido, la expresión para el logaritmo natural de la verosimilitud resulta

$$\ln\left(\mathscr{L}(q_j^f|\beta,\mu,\sigma)\right) = \sum_{j=1}^N \ln\left\{\int_0^1 \frac{\beta(1-\varepsilon)^{\beta-1}}{\sqrt{2\pi\sigma^2\varepsilon^2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{q_j^f-\varepsilon\mu}{\sigma\varepsilon}\right)^2\right] d\varepsilon\right\}.$$
 (5.4)

Resolviendo numéricamente la integral, la técnica consiste en mover los parámetro β , μ y σ hasta obtener el valor máximo del logaritmo de la verosimilitud.

Por otro lado, debido a que el efecto que introduce en las mediciones la colección parcial de carga es pequeño, se espera que la estadística sea baja en las colas de los picos. Es por esa razón que la sensibilidad del ajuste al parámetro β es menor que la que se encuentra con μ y σ , que se nutren de toda la estadística del pico. Para llevar adelante un análisis más robusto de la incerteza del parámetro β se hizo uso de otras herramientas de cálculo. Para ello se calculó el logaritmo de la verosimilitud frente a un barrido en este parámetro optimizando en cada paso los valores de μ y σ . Se busca luego el intervalo de confianza de la verosimilitud de 68,3 % de probabilidad que contenga al parámetro β . El $\hat{\beta}$ será aquel que maximiza el valor del logaritmo de verosimilitud siendo su intervalo de confianza el conformado por β_{min} y β_{max} tales que el logaritmo de la verosimilitud tome el valor de su máximo menos 1/2, es decir, el intervalo está conformado por aquellos valores de β que cumplan la siguiente condición:

$$\left\{ \beta \in \mathbb{R} / \ln\left(\mathscr{L}(\hat{\beta})\right) - \ln\left(\mathscr{L}(\beta)\right) < 1/2 \right\}$$

Los β donde la recta y la parábola se tocan corresponden a los límites izquierdo β_{min} y derecho β_{max} del intervalo de 68,3 % deseado^[26].

5.3. Características del modelo

Utilizar este modelo para ajustar los picos de los histogramas de carga tiene la ventaja de que los parámetros que se obtienen del ajuste, como el valor medio μ y la dispersión σ , son aquellos valores que se obtendrían si la colección parcial de carga fuera totalmente nula. Es decir, este modelo logra obtener estas magnitudes disociando totalmente el efecto de la PCC. A su vez, también se obtiene el parámetro β , el cual se definió como la relación entre τ_{CCE} y τ_X , donde el primero es un parámetro intrínseco del detector y, por ende, está fijo, mientras que el segundo es una magnitud que varía dependiendo de la energía incidente y del material. Cabe aclarar que para modelar un posible fondo proveniente de la PCC de picos de mayor energía (picos a derecha), se agrega un término constante al ajuste. Este término no se ajusta junto con el resto de los datos, sino que se ajusta previamente usando solo el fondo a derecha de los picos.

Vale mencionar que este modelo se enfoca en capturar el efecto que provoca la colección parcial de carga en los picos de los histogramas, e ignora la dispersión por efecto Compton o la generación de pares. Esto se debe a que en las escalas de energía en las que se trabajó, los efectos de estos fenómenos son despreciables o, más aún, imposibles para el caso de generación de pares. En el gráfico de la Figura 5.4 se encuentran las curvas de los coeficientes de atenuación



Figura 5.4: Diferentes contribuciones al coeficiente de atenuación del Silicio. Se observa que el efecto fotoeléctrico es la contribución preponderante en los órdenes de energía estudiados en este trabajo.

para el silicio dependiendo del tipo de proceso de dispersión, obtenidas del National Institute of Standards and Technology^[27], como ser, el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton, la generación

de pares y la suma de los tres efectos. Se observa de la Figura 5.4 que para energías menores a los 1000 eV la contribución del efecto Compton es totalmente despreciable frente a la del efecto fotoeléctrico, la cual domina en todo el rango de energías estudiado en este trabajo.

Resulta importante notar que, debido a que la longitud de atenuación τ_X depende de la energía del fotón incidente (entre otros), para el caso de los rayos X del flúor cuya energía es menor a la de los rayos X del aluminio, la longitud de atenuación es menor. Por otro lado, como τ_{CCE} es una característica del detector y no depende de ningún parámetro, y como $\beta = \tau_{CCE}/\tau_X$, entonces se espera que el valor de β sea mucho mayor en el caso del flúor respecto del aluminio. Con lo cual, el efecto de la colección parcial de carga debería ser más pronunciado en esos picos. Esto implica que deberían poder apreciarse colas más pronunciadas hacia bajas energías en los espectros obtenidos con X del flúor que aquellos correspondientes al aluminio.

Capítulo 6

Resultados

6.1. Ajuste de espectros

Habiendo calculado los valores de expectación de eventos de un electrón genuinos, es decir, difundidos desde un cluster de interés, μ_g ; y eventos de un electrón de fondo sobre un cluster o en su frontera, μ_{bkg} , para corregir la carga sobre los clusters, y habiendo introducido el modelo de la colección parcial de carga, están dadas las condiciones para determinar la magnitud del factor de Fano, la energía de creación electrón-hueco y el ancho efectivo de la zona de colección parcial de carga.

Los resultados que se presentan a continuación son tanto para el pico generado por los rayos X emitidos por el flúor como para el pico de los rayos X emitidos por el aluminio. Para ambos casos se muestran los histogramas de carga con sus respectivos ajustes, utilizando el modelo descripto en la Capítulo 5, para el caso en el que se aplicó el umbral EPIX=1.5 con las correcciones a los sesgos derivadas en el Capítulo 4. Se presentan los resultados tanto para el primer cuadrante del sensor como para el tercero, debido a que el segundo cuadrante no funciona correctamente y el cuarto cuadrante presenta muchas *hot columns*.

6.1.1. Resultados a 1486 eV (Al)

Utilizando el modelo descripto en el Capítulo 5, se aplicó el método de la máxima verosimilitud para determinar los estimadores de μ , σ y β . Esto se logró realizando un barrido en el parámetro β , optimizando μ y σ en cada paso. Así se obtuvieron las curvas de la Figura 6.1. En ellas se presenta el logaritmo de la verosimilitud para los cuadrantes uno y tres del sensor en función del parámetro β . De estas curvas se obtiene $\hat{\beta}$, que es el valor de β que maximiza la verosimilitud, y con él, queda determinado el conjunto de parámetros óptimos ($\hat{\mu}$, $\hat{\sigma}$, $\hat{\beta}$). A partir de $\hat{\mu}$, $\hat{\sigma}$ y sus errores, se determinan los valores del factor de Fano, la energía de creación electrón-hueco y sus errores por propagación. En los gráficos de la Figura 6.1 se muestra además la recta que se encuentra a una distancia a = 1/2 por debajo del máximo y su intersección con la curva, de donde se obtuvieron los intervalos [0,0039; 0,0114] y [0,0141; 0,0230] para un 68,3 % de probabilidad de contener a β . Los valores de $\hat{\beta}$ para el primer y tercer cuadrante resultaron $\hat{\beta} = 0,0077$ y $\hat{\beta} = 0,0186$ respectivamente. Con estos valores y sus intervalos se puede calcular el promedio pesado y se obtiene $\hat{\beta} = 0,0122 \pm 0,0029$.

El tamaño de la región de PCC, junto con su error se desprenden del valor hallado para el promedio pesado de $\hat{\beta}$ y de la distancia de atenuación para los rayos X del aluminio (1486 eV), que en este caso vale $\tau_x = 7,884 \,\mu m^{[24]}$. Utilizando que $\tau_{CCE} = \beta \tau_X$ se obtiene que $\tau_{CCE} = (0,0960 \pm 0,0231) \,\mu$ m, que se encuentra en muy buen acuerdo con el valor obtenido del ajuste en la Figura 5.2^[25].



Figura 6.1: Curvas del logaritmo de la verosimilitud en función de β , para los cuadrantes uno y tres con rayos X del aluminio. Del ajuste cuadrático se obtiene el $\hat{\beta}$ máximo y de su intersección con la recta a altura $\ln (\mathscr{L}(\hat{\beta})) - 1/2$, los extremos de los intervalos.

En los gráficos de la Figura 6.2 se pueden ver los histogramas de carga con su ajuste, provenientes de la interacción con el detector de los rayos X emitidos por el aluminio, obtenidos a partir de los datos a los que se les aplicó el corte y las correcciones. El ajuste no bineado se calculó utilizando el valor de $\hat{\beta}$, que sale del barrido anterior, para derivar el factor de Fano y la energía de creación electrón-hueco óptimos. Además, en cada gráfico se encuentran superpuestos dos histogramas de carga: el histograma de carga sin aplicar el corte (EPIX=0.5) y, encima de este, el histograma de carga con el umbral EPIX=1.5 más las correcciones, con el fin de ver las diferencias entre ambos conjuntos de datos.

Los valores óptimos obtenidos de los ajustes se encuentran condensados en la Tabla 6.1. De esta se puede ver que el valor del factor de Fano aumenta $\sim 6\%$ al pasar de EPIX=0.5



Figura 6.2: Histogramas y ajustes del pico de los rayos X del aluminio utilizando el modelo. El efecto de la colección parcial de carga es leve pero apreciable en el primer cuadrante, mientras que para el tercero resulta más notorio. Se superpusieron ambos histogramas de carga, sin el corte aplicado y con el corte más las correcciones, en un mismo gráfico.

	OHDU1		OHDU3	
	F	$\varepsilon_{e-h} [\mathrm{eV}]$	F	$\varepsilon_{e-h} [\mathrm{eV}]$
EPIX 0.5	$0,\!1417\pm0,\!0057$	$3{,}7146 \pm 0{,}0040$	$0,\!1421\pm0,\!0070$	$3{,}7191 \pm 0{,}0041$
EPIX 1.5	$0,\!1508\pm0,\!0099$	$3,\!7395 \pm 0,\!0029$	$0,\!1629\pm0,\!0104$	$3{,}7412 \pm 0{,}0029$
EPIX 1.5 Corr	$0,\!1503 \pm 0,\!0138$	$3,\!7513 \pm 0,\!0030$	$0{,}1629 \pm 0{,}0104$	$3,\!7477 \pm 0,\!0029$

Tabla 6.1: Magnitudes de interés obtenidas del ajuste de los histogramas de carga de los rayos X del aluminio para cada uno de los pasos del análisis. El primer paso es con el umbral EPIX=0.5, el segundo paso es con el umbral EPIX=1.5 y el tercer paso agrega las correcciones a la carga de los clusters.

a EPIX=1.5, mientras que para el tercero el factor de Fano aumenta ~ 15%. Al aplicar las correcciones respecto al paso anterior lo que se obtiene es una ligera disminución del valor del Fano para el primer cuadrante, menor al 1%, mientras que para el tercero el valor se mantuvo constante. En cuanto a la energía de creación electrón-hueco, pasar de EPIX=0.5 a EPIX=1.5 y luego aplicar las correcciones, corresponde a una variación total en su valor muy cerca del 1%, tanto para el primer cuadrante como para el tercero. Todo esto puede verse con mayor claridad en los gráficos inferiores de la Figura 6.3.

Por otro lado, de observar el gráfico del factor de Fano y la dispersión de los picos en la Figura 6.3, se puede notar que el aumento en el valor del factor de Fano al aplicar el corte sobre los eventos de un electrón se debe a un aumento de σ , lo que significa que la tendencia del factor de Fano es mayormente regida por este parámetro. Por su lado, la energía de creación electrón-hueco acompaña claramente la tendencia contraria que sigue el valor medio de carga y esto se debe a que la forma en la que se la calcula es a partir de esta, como el cociente entre la energía inicial y el valor medio de carga.



Figura 6.3: Izquierda-arriba: Valor medio del pico de rayos X del aluminio; izquierda-abajo: Energía de creación electrón-hueco; derecha-arriba: Dispersión de los picos; derecha-abajo: factor de Fano; todas estas con sus respectivas barras de error. Se observa que la tendencia del factor de Fano es la misma que la dispersión de los picos y que la energía de creación electrón-hueco sigue la tendencia contraria al valor medio, lo cual es esperado porque se calcula a partir de esta.

Por último, los valores finales para el factor de Fano y la energía de creación electrón-hueco se obtienen de hacer el promedio pesado de los resultados de ambos cuadrantes con sus incertezas. Para el factor de Fano se obtiene $F = 0.1583 \pm 0.0083$, mientras que para la energía de creación electrón-hueco se obtiene $\varepsilon_{e^-h} = (3.7494 \pm 0.0021)$ eV.

$6.1.2. \quad \text{Resultados a 677 eV (F)}$

Para el caso del flúor, repitiendo el análisis llevado a cabo para el aluminio, se realizaron barridos en β para obtener las curvas del logaritmo de la verosimilitud con su ajuste cuadrático, de las cuales se obtienen el $\hat{\beta}$ máximo y los extremos de su intervalo de confianza en cada cuadrante, como se ve en la Figura 6.4. Para el primer cuadrante, del ajuste se desprende $\hat{\beta} = 0,0927$, con su intervalo [0,0842; 0,1013] y para el tercer cuadrante se obtiene $\hat{\beta} = 0,1123$ con su intervalo [0,1048; 0,1194]. Nuevamente, calculando el promedio pesado se obtiene $\hat{\beta} = 0,1041 \pm 0,0055$. La primera diferencia que se tiene entre el flúor y el aluminio es que el valor de $\hat{\beta}$ del flúor resulta un orden de magnitud mayor que el del aluminio.

En este caso, sabiendo que la longitud de atenuación en el silicio para los rayos X del flúor

de 677 eV es de $\tau_x = 0.941 \,\mu m^{[24]}$, se obtiene que el ancho de la región de PCC del detector es de $\tau_{cCE} = (0.0979 \pm 0.0052) \,\mu m$, resultado que se encuentra en excelente acuerdo con el obtenido para el aluminio y con el obtenido del ajuste de la Figura 5.2^[25].



Figura 6.4: Curvas del logaritmo de la verosimilitud en función de β , para los cuadrantes uno y tres con rayos X del flúor. Del ajuste cuadrático se obtiene el $\hat{\beta}$ máximo y de su intersección con la recta a a altura ln $(\mathscr{L}(\hat{\beta}))-1/2$, los extremos de los intervalos.

Por otro lado, con el valor $\hat{\beta}$ hallado a partir de los barridos anteriores, se realizaron los ajustes no bineados a los histogramas de carga de ambos cuadrantes y se obtuvieron los valores para el factor de Fano y energía de creación electrón-hueco. De la misma forma que para el aluminio, en la Figura 6.5 se tienen los histogramas de carga para el primer y el tercer cuadrante, con los datos sin el corte y con los datos luego de aplicar EPIX=1.5 y la corrección, y con su respectivo ajuste. Se observa cómo la colección parcial de carga afecta a estos picos de forma mucho más importante que para el aluminio, formando colas muy pronunciadas hacia bajas energías. Esto es un resultado que se anticipaba en el Capítulo 5 y se debe al aumento del valor del parámetro β : como la longitud de atenuación para los rayos X del flúor es mucho menor que la del aluminio, hay muchísimos más eventos que sufren recombinación en la región de PCC del sensor. En cuanto al ajuste, para este valor de β se ve como la curva sigue muy bien las colas de los histogramas.

En la Tabla 6.2 se presentan los resultados obtenidos de los ajustes, para los tres pasos del análisis para los cuadrantes uno y tres. En ambos cuadrantes se tiene que el factor de Fano disminuye al pasar de EPIX=0.5 a EPIX=1.5, un ~ 10 % para el primero y menos del 5 % para el tercero. Al aplicar las correcciones, el valor disminuye levemente, menos del 2 % para el primer cuadrante y menos del 1 % para el tercero. Además los valores entre el cuadrante uno y tres se solapan con su error, compatibilizándose luego de aplicar el corte sobre eventos de un electrón y las correcciones. Para la energía de creación electrón-hueco sucede lo mismo en


Figura 6.5: Histogramas y ajustes del pico de los rayos X del flúor utilizando el modelo. El efecto de la colección parcial de carga es mucho más relevante en este caso, con gran cantidad de eventos a la izquierda del máximo del pico. Nuevamente se superponen ambos histogramas: sin el corte y con el corte (umbral EPIX=1.5) más las correcciones. Se puede ver el corrimiento hacia la derecha de los datos sin la aplicación del umbral.

	OHDU1		OHDU3	
	F	$\varepsilon_{e-h} \left[\text{eV} \right]$	F	$\varepsilon_{e-h} [\mathrm{eV}]$
EPIX 0.5	$0,\!1938\pm0,\!0175$	$3{,}7152 \pm 0{,}0060$	$0,\!1763 \pm 0,\!0137$	$3,\!7587 \pm 0,\!0051$
EPIX 1.5	$0,\!1742\pm0,\!0183$	$3{,}7922 \pm 0{,}0068$	$0,\!1690\pm0,\!0163$	$3,\!8154\pm0,\!0067$
EPIX 1.5 Corr	$0,\!1711\pm0,\!0180$	$3{,}8160 \pm 0{,}0068$	$0,\!1676\pm0,\!0162$	$3,\!8285\pm0,\!0066$

Tabla 6.2: Magnitudes obtenidas del ajuste de los histogramas de carga de los rayos X del flúor para cada uno de los pasos del análisis. El primer paso es con EPIX=0.5, el segundo paso es con EPIX=1.5 y el tercer paso introduce las correcciones a la carga de los clusters.

ambos cuadrantes, pasar de EPIX=0.5 a EPIX=1.5 aumenta el valor de la magnitud alrededor del 2 % y luego, al aplicar las correcciones, nuevamente hay un aumento los valores para ambos cuadrantes, en este caso menor al 1%.

En los gráficos de la Figura 6.6 se presentan los resultados anteriormente descriptos y se ven las tendencias de los valores con sus respectivos errores para cada uno de los análisis realizados. Para el caso del factor de Fano, se puede ver que sigue la misma tendencia que la dispersión, como sucedía para el aluminio, y que los errores de ambos se solapan para todos los pasos. Sin embargo, al aplicar el corte y las correcciones, los valores absolutos se acercan compatibilizándose aún más. La energía de creación electrón-hueco también se compatibiliza al aplicar el corte y las correcciones.

Por último, los resultados finales para los rayos X del flúor se obtienen de la misma manera que para el aluminio: se realiza el promedio pesado de las magnitudes con sus incertezas. De este cálculo se obtienen $F = 0,1694 \pm 0,0120$ y $\varepsilon_{e-h} = (3,8222 \pm 0,0048)$ eV.

Finalmente, no se obtuvieron mejoras apreciables en las incertezas de las magnitudes a



Figura 6.6: Izquierda-arriba: Valor medio del pico de rayos X del flúor; izquierda-abajo: Energía de creación electrón-hueco; derecha-arriba: Dispersión de los picos; derecha-abajo: factor de Fano; todos con sus respectivas barras de error obtenidas de los ajustes.

pesar del aumento de la estadística como consecuencia del corte aplicado. Sin embargo, el procedimiento utilizado para la corrección de los sesgos logra compatibilizar los cuadrantes entre sí, tanto para el factor de Fano como para el energía de creación electrón-hueco. Este comportamiento parece indicar que la corrección efectivamente elimina un sesgo preexistente y distinto en cada cuadrante. Por otro lado, estos resultados también ponen de manifiesto la ventaja de la utilización de este nuevo modelo de ajuste, debido a que a partir de este tipo de mediciones se puede obtener el ancho efectivo de la región de colección parcial de carga del detector.

Con estos resultados se puede actualizar el gráfico de la Figura 1.3 resultando en la nueva Figura 6.7, donde se ven los nuevos valores para el factor de Fano obtenidos de este trabajo, que no se posicionan sobre la recta de valor constante F = 0,119, correspondiente al valor reportado para 5900 eV en trabajos anteriores^[10].



Figura 6.7: Gráfico del factor de Fano obtenido de las mediciones y análisis realizados en este trabajo (cuadrados negros) comparado con la recta esperada si el factor de Fano fuera constante. Se observa que los valores medidos se acercan a la recta del factor de Fano constante. También se grafica la curva y los valores con los que mediría un CCD convencional para estas energías (puntos negros).

La diferencia encontrada vuelve el resultado aún más interesante, dado que abre las puertas para explorar las razones fundamentales por las cuales el factor de Fano aumenta a energías más bajas.

Capítulo 7

Conclusiones

Como primer acercamiento a la fenomenología de los procesos estudiados en esta tesis, se realizaron una serie de simulaciones Monte Carlo que lograron reproducir los valores experimentales del factor de Fano. En particular, poner en evidencia las razones por las cuales este se aleja de la unidad, centradas principalmente en: que parte de la energía se disipa en fonones y que toda la energía de la radiación incidente se deposita en el material.

Por otro lado, se realizó un análisis cualitativo de las imágenes, pudiendo determinar características importantes en ellas que provocan efectos indeseados en las mediciones, como ser *hot pixels* y *hot columns* entre otras, lo cual permitió elegir los cuadrantes del sensor más aptos para el análisis.

Gracias a la aplicación de un corte que elimina píxeles con un solo electrón, se pudo aumentar casi tres veces la estadística de eventos disponible para el análisis. Además se desarrolló un método para la corrección del sesgo agregado por este corte y el sesgo existente en las imágenes debido a fondo.

Se obtuvo que el factor de Fano para los rayos X del aluminio es $F = 0,1583 \pm 0,0083$ con un error relativo del 5,2% y para los rayos X del flúor se obtuvo $F = 0,1694 \pm 0,0120$ con un error relativo del 7,1%, valores que no solapan entre sí con su error. Esto parecería ser un indicio de que el factor de Fano no es, en efecto, independiente de la energía de las fuentes, siendo mayor cuando menor es la energía.

Por otra parte, se obtuvo que la energía de creación electrón-hueco es $\varepsilon_{e^-h} = (3,7501 \pm 0,0006)$ eV para el aluminio, mientras que para el flúor fue de $\varepsilon_{e^-h} = (3,8222 \pm 0,0048)$ eV.

Se logró determinar el ancho de la región de colección parcial de carga del sensor mediante la utilización del nuevo modelo de ajuste de los picos, que fue de $\tau_{CCE} = (0,0978 \pm 0,0051) \,\mu\text{m}$ cuyo error solapa con el de $\tau_{CCE} = (0,0914 \pm 0,0027) \,\mu\text{m}$ obtenido mediante otro método^[13].

Finalmente, cabe destacar que los resultados obtenidos para el factor de Fano podrían

indicar que existen razones fundamentales, aún inexploradas, que hacen que esta magnitud aumente para energías cada vez menores. A su vez, el modelo presentado para describir la PCC ofrece una forma cerrada para la densidad de probabilidad que describe la distribución de carga alrededor de los picos y habilita la caracterización de la zona de colección parcial de carga de los sensores utilizando espectros medidos.

Apéndice A

Implementación del código de la simulación

La implementación de los códigos que ejecutan la simulación Monte Carlo se realizó con los lenguajes C y Python. Con C se realiza todo el trabajo de alto costo computacional, mientras que Python cumple un rol de interfaz de entrada para los parámetros de la simulación, de procesamiento de los datos obtenidos de ella y de visualización de resultados por medio de gráficos.

A grandes rasgos, en el código en C están implementadas las funciones que hacen los cálculos antes mencionados: el cálculo de la probabilidad de ionización P_{eh} a partir de la expresión (2.1), el cálculo del parámetro $\alpha = \alpha(E_R)$ para la distribución Beta, a partir de la cual se genera una realización de la variable aleatoria de la que se puede despejar la energía transferida a un par electrón-hueco por ionización. Finalmente, por recursión, se simulan los procesos de ionización en cascada y se cuenta la cantidad final de electrones ionizados.

La parte escrita en Python se encarga de ejecutar el programa en C las veces que sean necesarias y con los parámetros iniciales de interés para obtener el resultado buscado.

Más en detalle, el programa en C consta de un total de 6 funciones, las cuales se listan a continuación con una breve descripción de su funcionamiento

- Random(): Esta función genera realizaciones p_rand de una variable aleatoria de distribución uniforme, entre 0 y 1. Se usa para generar una probabilidad de comparación en el Monte Carlo.
- 2. Peh(E_r, A): Esta se encarga de realizar el cómputo de la probabilidad de ionización, según la ecuación (2.1), a partir de la energía E_R , que es un argumento inicial en el programa y es ingresado desde Python. Esta probabilidad, p_eh, se compara con p_rand

en el algoritmo de aceptación del Monte Carlo.

3. alpha(E_r): Calcula el valor del parámetro α en base al valor del parámetro E_r. Si bien el parámetro E_r es un parámetro inicial que, por ejemplo, para el flúor es 677 eV, a medida que evoluciona el sistema, la energía se va consumiendo en ionizacionar y este parámetro cambia. Con cada actualización se calcula nuevamente el valor de α para la distribución Beta. El valor del parámetro se calcula entonces como

$$\alpha = \begin{cases} 0,1 & \text{si} & E_r < E_g \\ 1 & \text{si} & E_g < E_r < 4,2 \text{ eV} \\ 0,02E_r + 0,95 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

4. evolucionar(E_r, A, rand_beta): Genera la evolución del sistema mediante el algoritmo de aceptación del Monte Carlo, haciendo uso de las funciones anteriores. Implementa un bucle while, cuya condición es que se repita el proceso mientras que la energía E_r sea mayor que la energía del gap del silicio E_g. Dentro del bucle se calcula la probabilidad p_eh de ionización, el parámetro α, que luego es usado para generar un número pseudo aleatorio con distribución Beta del cual despejar la fracción de energía transferida (E_traf) a un par electrón hueco al ionizar y, por último, genera el número pseudo aleatorio de distribución uniforme con cual comparar la probabilidad de ionización en el Monte Carlo para ver si el se acepta el nuevo estado.

Una vez que se tienen estos valores, siempre y cuando se cumpla que la probabilidad de ionizacion p_eh sea mayor que p_rand y que al mismo tiempo la fracción de energía E_tranf sea mayor que 3,75 eV (valor medio para la energía de creación electrón hueco ε_{e-h}), entonces se actualiza el valor de la energía inicial E_r restándole la fracción de energía transferida. Además, también, se guardan en una lista las energías transferidas E_r . Notar que la cantidad de elementos de la lista será la cantidad de pares electrónhueco generados por una rama de la cascada con energía inicial E_r . Luego, cada elemento de la lista se transforma, para otra rama, en E_r , generando una nueva lista. Repitiendo con todas las energías de toda la lista y todas las sublistas, se pueden contar los electrones ionizados.

De no cumplirse la condición del Monte Carlo, el sistema pierde energía por emisión de fonones, es decir, la energía $\mathbf{E_r}$ se actualiza restándole un valor fijo de energía $\hbar\omega = 0,063 \,\mathrm{eV}$. El resultado de esta función es una lista con las energías de una sola rama de la cascada. 5. recursion(E_r, A, rand_beta): Esta función cuenta de manera recursiva la cantidad de electrones ionizados durante la cascada. La recursion, en este caso, tiene la ventaja de que es muy sencilla de implementar, pero tiene como desventaja que no es tan sencillo entender por qué funciona correctamente. Es por esto que fue necesario crear un conjunto de datos de prueba para contrastar que los resultados que arroja la función son los esperados.

Lo primero que hace esta función es generar una lista energías, Energia, llamando a la función evolucionar() y luego se itera sobre todas estas, contando la cantidad total de elementos que posee. Esas energías son las que fueron usadas para ionizar un par electrón hueco, así que la cantidad de energías que alberga la lista es equivalente a la cantidad de pares generados. Notar que a recursion() se le pasa como argumento E_r. Esto significa que cuando dentro de recursion() se vuelva a llamar a ella misma, pero ahora en vez de usar como argumento E_r, se usa el primer elemento de la lista Energia, es decir Energia[0], se produce una nueva lista a partir de una energía inicial menor. A esta nueva lista se le cuenta la cantidad de elementos y ese será el número de nuevas ionizaciones. Luego se repite para el elemento Energia[1], se genera otra lista de energías, lo mismo para Energia[2], etc. El proceso se repite hasta que todas las energías de la lista original se agotaron. Luego, las sublistas generadas repiten el proceso para todos sus elementos hasta que eventualmente la energía de las listas no es suficiente para seguir ionizando y el proceso termina.

El valor de salida de la función **recursion()** es un entero y contabiliza la cantidad de elementos encontrados en la lista, es decir, la cantidad de ionizaciones. Durante el proceso de recursión se van sumando todas las cantidades de carga ionizada en cada paso y finalmente se obtiene la carga total generada durante la cascada.

6. main(): Esta se encarga de llevar adelante las repeticiones del experimento con el fin de obtener estadística. Además, en esta se definen los parámetros necesarios para la simulación, como ser la energía inicial E_r, el parámetro A, la cantidad de experimentos que se quieren realizar (trials) y la generación de un archivo .txt con los datos obtenidos para ser importados posteriormente con Python.

Cabe destacar que de esta simulación el único resultado que se obtiene es la distribución de carga para una dada energía inicial E_r . Es decir, no puede conocerse ningún proceso intermedio o la *historia* del proceso, solo la cantidad total de electrones generados.

Referencias

- ^[1] J. R. Janesick. *Scientific charge-coupled devices*. SPIE The International Society for Optical Engineering, 2001.
- ^[2] Ivan V. Kotov, Justine Haupt, Paul O'Connor, Thomas Smith, Peter Takacs, Homer Neal, and Jim Chiang. Characterization and acceptance testing of fully depleted thick CCDs for the Large Synoptic Survey Telescope. In Andrew D. Holland and James Beletic, editors, *High Energy, Optical, and Infrared Detectors for Astronomy VII*, volume 9915, pages 304 316. International Society for Optics and Photonics, SPIE, 2016.
- ^[3] L. Barak, I. M. Bloch, M. Cababie, G. Cancelo, L. Chaplinsky, F. Chierchie, M. Crisler, A. Drlica-Wagner, R. Essig, J. Estrada, E. Etzion, G. Fernandez Moroni, D. Gift, S. Munagavalasa, A. Orly, D. Rodrigues, A. Singal, M. Sofo Haro, L. Stefanazzi, J. Tiffenberg, S. Uemura, T. Volansky, and Tien-Tien Yu. Direct-detection results on sub-gev dark matter from a new skipper-ccd. arXiv, 2004.11378:1–11, 2020.
- ^[4] G. Fernandez-Moroni, P. A. N. Machado, I. Martinez-Soler, Y. F. Perez-Gonzalez, D. Rodrigues, and S. Rosauro-Alcaraz. The physics potential of a reactor neutrino experiment with Skipper CCDs: Measuring the weak mixing angle. *JHEP*, 03:186, 2021.
- ^[5]G. Fernandez-Moroni, R. Harnik, P. A. N. Machado, I. Martinez-Soler, Y. F. Perez-Gonzalez, D. Rodrigues, and S. Rosauro-Alcaraz. The physics potential of a reactor neutrino experiment with Skipper-CCDs: Searching for new physics with light mediators. *Journal of High Energy Physics*, 2022. J. High Energ. Phys. 2022, 127 (2022). https://doi.org/10.1007/JHEP02(2022)127.
- ^[6] W.S. Boyle. Nobel lecture: Ccd an extension of man's view. *Rev. Mod. Phys.*, 82:2305–2306, August 2010.
- [7] G.E. Smith. Nobel lecture: The invention and early history of the ccd. Rev. Mod. Phys., 82:2307–2312, August 2010.

- ^[8] Chenning Calvin Hu. Modern Semiconductor Devices for Integrated Circuits. Pearson, 1 edition, 2009.
- ^[9] J. Tiffenberg, M. Sofo Haro, A. Drlica-Wagner, R. Essig, Y. Guardincerri, S. Holland, T. Volansky, and Tien-Tien Yu. Single-electron and single-photon sensitivity with a silicon skipper ccd. *Physical Review Letters*, 00:1–7, 2017.
- ^[10] D. Rodrigues, K. Andersson, M. Cababie, A. Donadón, A. Botti, G. Cancelo, J. Estada, G. Fernandez-Moroni, R. Piegaia, M. Senger, M. Sofo Haro, L. Stefanazzi, J. Tiffenberg, and S. Uemura. Absolute measurment of the fano factor using a skipper-ccd. arXiv, 2004.11499v3:1–7, 2020.
- ^[11] A. Aguilar-Arevalo, D. Amidei, X. Bertou, M. Butner, G. Cancelo, A. Castañeda Vázquez, B. A. Cervantes Vergara, A. E. Chavarria, C. R. Chavez, J. R. T. de Mello Neto, J. C. D'Olivo, J. Estrada, G. Fernandez Moroni, R. Gaïor, Y. Guardincerri, K. P. Hernández Torres, F. Izraelevitch, A. Kavner, B. Kilminster, I. Lawson, A. Letessier-Selvon, J. Liao, V. B. B. Mello, J. Molina, J. R. Peña, P. Privitera, K. Ramanathan, Y. Sarkis, T. Schwarz, C. Sengul, M. Settimo, M. Sofo Haro, R. Thomas, J. Tiffenberg, E. Tiouchichine, D. Torres Machado, F. Trillaud, X. You, and J. Zhou. Search for low-mass wimps in a 0.6 kg day exposure of the damic experiment at snolab. *Phys. Rev. D*, 94:082006, Oct 2016.
- ^[12] Stephen E Holland, Donald E Groom, Nick P Palaio, Richard J Stover, and Mingzhi Wei. Fully-depleted, back-illuminated charge-coupled devices fabricated on high-resistivity silicon. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 50(1), 3 2002.
- ^[13] Guillermo Fernandez Moroni, Kevin Andersson, Ana Botti, Juan Estrada, Dario Rodrigues, and Javier Tiffenberg. Charge-collection efficiency in back-illuminated charge-coupled devices. *Physical Review Applied*, 15(6), jun 2021.
- ^[14] G. Bortels and P. Collaers. Analytical function for fitting peaks in alpha-particle spectra from si detectors. International Journal of Radiation Applications and Instrumentation. Part A. Applied Radiation and Isotopes, 38(10):831–837, 1987.
- ^[15] R. D. Ryan. Precision measurements of the ionization energy and its temperature variation in high purity silicon radiation detectors. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 20:473– 480, 1973.
- ^[16] R.C. Alig S. Bloom and C. W. Struck. Scattering by ionization and phonon emission in semiconductors. *Physical review*, 22:5565–5582, 1980.

- ^[17] I. V. Kotov, H. Neal, and P. O'Connor. Pair creation energy and fano factor of silicon measured at 185 K using ⁵⁵fe x-rays. *High Energy, Optical and Infrared Diectors for Astronomy VIII*, 10709:362–372, 2018.
- ^[18] Kevin Anderson. Calibración absoluta de sensores CCD utilizando la tecnología skipper. Master's thesis, Universidad de Buenos Aires, March 2021.
- ^[19] K. Ramanathan N. kurinsky. Ionization Yield in Silicon for eV-Scale Electron-Recoil Processes. arXiv, 2007.04201v1:1–10, 2020.
- ^[20] James Janesick, Tom Elliott, Richard Bredthauer, Charles Chandler, and Barry Burke. Fano-noise-limited CCDs. In Leon Golub, editor, X-ray instrumentation in astronomy II, volume 982 of Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series, pages 70–95, January 1988.
- ^[21]G.W. Fraser, A.F. Abbey, A: Holland, K. McCarthy, A. Owens, and A. Wells. The x-ray energy response of silicon part a. theory. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 15(6), 1994.
- [22] Alan Owens, G.W. Fraser, and K. Mccarthy. On the experimental determination of the fano factor in si at soft x-ray wavelengths. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment, 491:437, 03 2002.
- ^[23] André Donadon Servelle. Determinación del factor de fano en si utilizando un detector Skipper ccd. Master's thesis, Universidad de Buenos Aires, April 2019.
- [24] The Center for X-Ray Optics. X-ray attenuation length. https://henke.lbl.gov/ optical_constants/atten2.html.
- ^[25] Guillermo Fernandez Moroni, Kevin Andersson, Ana Botti, Juan Estrada, Dario Rodrigues, and Javier Tiffenberg. Charge-collection efficiency in back-illuminated charge-coupled devices-Comunicación interna. Physical Review Applied, 15(6), jun 2021.
- ^[26] A. G. Frodesen and O. skjeggestad. Probability and statistics in particle physics. Universitetsforlaget, 1979.
- [27] NIST. Photon corss sections database. https://www.nist.gov/pml/ xcom-photon-cross-sections-database.

Agradecimientos

La carrera la arranqué allá por el 2013, así que ya pasaron casi 10 años. Hoy, eso equivale más o menos a un tercio de mi vida. Es imposible que en todo este tiempo no haya conocido gente maravillosa a la que quisiera agradecer.

En primer lugar, a Paui por ser mi compañera eterna de labo y de vida, que si no fuera por ella es muy probable que no hubiera llegado hasta acá, siempre apoyándome y ayudándome en todo lo que necesito.

A los amigos que hice en el camino, Andi, Tomi, Fede, con los que tuve la suerte de compartir tanto estudio como salidas, al igual que con Anita, Lufa, Lukp. También Agus, Sol y Mai, Tomi Noten, Pili y Manu.

A todo el grupo hermoso de gente que conocí gracias a labo 6 y 7 en el LEC, grupo realmente inigualable, Tinchooooooo, Manu, Agus, Fabri, Juan, Les, Hilario, Nacho, Nati, Nico y Lau. Realmente dejaron la vara altísima.

Injusto sería no agradecer a la gente que me dio todo para que yo pueda estar donde estoy hoy, que son mis viejos y que siempre me bancaron con todo. A mi hermano que, a pesar de ser ingeniero, la tiene muy clara en muchas cosas y siempre lo usé y lo uso de material de consulta.

A mis amigos de toda la vida, que se bancaron infinidad de veces mis *no puedo, tengo que estudiar*, en especial a Marian que es el que siempre está ahí presente.

Al lector, gracias por haber llegado hasta acá.

Para ir terminando, no puedo dejar de agradecer a Darío, quien tuvo una paciencia infinita en todos todos los aspectos posibles a lo largo del desarrollo de esta tesis.

Finalmente, quiero agradecer por formar parte de este hermoso mundillo que es Exactas. Mentiría si dijera que no lo sufrí ni un poco, pero no miento al decir que no me arrepiento.