

UNIVERSIDAD DE SALAMANCA

FACULTAD DE CIENCIAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA ATÓMICA, MOLECULAR Y NUCLEAR



TRABAJO DE FIN DE MÁSTER

Desarrollo y optimización de un sistema experimental para la Medición de la Vida Media del Positronio mediante PALS con Detectores LYSO-SiPM

Development and Optimization of an Experimental System for the Measurement of the Positronium Lifetime using PALS with LYSO-SiPM Detectors

Tutor: Dr. Samuel España Palomares

**Instituto de Tecnologías Físicas y de la Información “Torres Quevedo”, CSIC,
Madrid**

Wilson Daniel Ramírez Tejerina

Máster Interuniversitario en Física Nuclear

Curso académico 2023-2024

Convocatoria de Octubre

Autorización

Dr. Samuel España Palomares, investigador en el Instituto de Tecnologías Físicas y de la Información “Torres Quevedo”, CSIC en Madrid, España, autoriza la presentación del Trabajo Final del Máster con título “Desarrollo y optimización de un sistema experimental para la Medición de la Vida Media del Positronio mediante PALS con Detectores LYSO-SiPM”, llevado a cabo bajo su dirección por Wilson Daniel Ramirez Tejerina.

Salamanca, 22 de octubre 2024

Resumen

La espectroscopía de aniquilación de positrones (PALS) es una técnica versátil empleada en diversos campos de la física. Esta metodología permite estudiar las interacciones entre positrones y materia, incluyendo la formación de positronio. Desde su concepción, la técnica PALS ha experimentado una notable evolución. Los primeros sistemas utilizaban detectores de NaI(Tl) y tubos fotomultiplicadores con circuitos analógicos, que ofrecían una resolución temporal limitada. Con el tiempo, la introducción de nuevos detectores y sistemas de adquisición digital ha mejorado significativamente la precisión de las mediciones. Actualmente, PALS se utiliza para investigar fenómenos complejos como posibles violaciones de la simetría CPT, análisis de defectos estructurales en materiales a nivel atómico y determinación de concentraciones de oxígeno en estudios biomédicos para imágenes PET. En PALS se analiza los espectros generados al medir la diferencia de tiempo entre la llegada de dos fotones gamma, uno de 511 keV proveniente de la aniquilación del positrón con el electrón del medio a estudiar, y el fotón gamma de 1275 keV proveniente del decaimiento del ^{22}Na . En base a estos espectros se obtiene información sobre la forma de aniquilación del positrón, ya sea mediante aniquilación directa o previa formación del positronio en uno de sus estados de spin, el p-Ps o el o-Ps. La implementación de los detectores LYSO y SiPM junto con osciloscopios digitales han otorgado a la técnica PALS de una accesibilidad y relativa simplicidad, siendo una herramienta popular en diversos laboratorios. En el Instituto de Tecnologías Físicas y de la Información "Torres Quevedo" (CSIC, Madrid), se ha desarrollado un sistema experimental PALS para el estudio de materiales. El objetivo del proyecto es optimizar este sistema para analizar diversos materiales, utilizando detectores LYSO-SiPM y scripts de Matlab para el ajuste de espectros PALS. El trabajo implica el montaje del sistema, la creación de scripts para el procesamiento de datos, la medición de fotones de aniquilación en diferentes materiales, el uso de una fuente de ^{22}Na como generador de positrones y el análisis de los espectros de diferencia de tiempos obtenidos. Se realizaron mediciones PALS en varios materiales, obteniendo espectros característicos de cada uno. A partir de estos, se extrajo información sobre el tiempo de vida media del positrón, comparando los resultados con la literatura existente. El cobre se utilizó como material de calibración debido a su espectro de decaimiento simple de una sola exponencial y por ende una sola vida media. Adicionalmente, se llevaron a cabo simulaciones en Matlab para validar la precisión de los scripts de análisis de espectros de diferencia de tiempos. Todo esto resultó en el desarrollo de un sistema experimental optimizado, listo para ser aplicado en diversas áreas de investigación.

Palabras clave

PALS, positronio, resolución temporal, detectores LYSO-SiPM, vida media, análisis de espectro

Abstract

Positron annihilation lifetime spectroscopy (PALS) is a versatile technique employed in various fields of physics. This methodology allows for the study of interactions between positrons and matter, including the formation of positronium. Since its inception, the PALS technique has undergone a notable evolution. Early systems used NaI(Tl) detectors and photomultiplier tubes with analog circuits, which offered limited temporal resolution. Over time, the introduction of new detectors and digital acquisition systems has significantly improved measurement precision. Nowadays, PALS is used to investigate complex phenomena such as violations of CPT symmetry, the analysis of structural defects in materials at the atomic level, and the determination of oxygen concentrations in biomedical studies for PET imaging. PALS analyzes the spectrum generated by measuring the time difference between the arrival of two gamma photons: one of 511 keV originating from the annihilation of the positron with the electron in the studied medium, and the 1275 keV gamma photon from the decay of ^{22}Na . Based on these spectra, information is obtained about the annihilation process of the positron, whether through direct annihilation or after forming positronium in one of its spin states, either p-Ps or o-Ps. The implementation of LYSO and SiPM detectors along with digital oscilloscopes has made PALS more accessible and simpler, turning it into a popular tool in various laboratories. At the Institute of Physical and Information Technologies "Torres Quevedo" (CSIC, Madrid), a PALS experimental system has been developed for the study of materials. The objective of this project is to optimize this system to analyze various materials, using LYSO-SiPM detectors and MATLAB scripts for PALS spectrum fitting. The work involves assembling the system, creating scripts for data processing, measuring annihilation photons in varied materials, using a ^{22}Na source as a positron generator, and analyzing the time-difference spectra obtained. PALS measurements were carried out on several materials, obtaining characteristic spectra for each. From these, information was extracted about the positron's mean lifetime, and the results were compared with existing literature. Copper was used as a calibration material due to its simple decay spectrum with a single exponential, and therefore, a single lifetime. Additionally, simulations were conducted in MATLAB to validate the accuracy of the time-difference spectrum analysis scripts. All this resulted in the development of an optimized experimental system, ready to be applied in various areas of research.

Keywords

PALS (Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy), Positronium, Temporal resolution, LYSO-SiPM detectors, lifetime, Spectral analysis

Índice general

Índice general	VII
Índice de Ilustraciones.....	XI
Índice de Tablas.....	XV
Agradecimientos	XVI
Motivación	XVII

FUNDAMENTOS TEÓRICOS Y TÉCNICOS 19

1. Introducción	21
1.1. Positrón	21
1.1.1. Fuente de positrones.....	22
1.2. Positronio	23
1.3. Positrones en materia condensada	24
1.3.1. Termalización de positrones	24
1.3.2. Modelo trapping	25
1.4. Propiedades del positronio	26
1.4.1. Energía del estado fundamental del positronio	26
1.4.2. Estados del Positronio	26
1.4.3. Tiempo de vida media del positronio.	27
1.5. Formación de positronio en líquidos y gases.....	29
1.5.1. Modelo de Spur	29
1.5.2. Modelo de Gap de Ore	30
1.5.3. Modelo combinado ore-spur	31
1.6. Formación de positronio en materia condensada.....	31
1.7. Interacción del positronio con la materia.....	32
1.7.1. Pick-off.....	32
1.7.2. Modelo de la burbuja.....	33
1.7.3. Intercambio de spin	34
1.7.4. Extinción del positronio en campos magnéticos	35
2. Técnicas experimentales.....	36
2.1. Técnicas actuales en el estudio del positrón y positronio	36
2.1.1. Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy (PALS)	36
2.1.2. Técnica de correlación angular	36
2.1.3. Técnica de aniquilación por 3-gamma	37
2.1.4. Técnica Doppler broadening	37
2.2. Espectroscopía PAL	38
2.3. Análisis de datos PALS.....	39
2.3.1. Contribución de la fuente (SC).....	40
2.4. Aspectos experimentales PALS	40
2.4.1. Detectores.....	40
2.4.2. Detector LYSO	41

2.4.3.	LYSO vs otros centelladores	42
2.4.4.	Fotomultiplicadores.....	42
2.4.5.	PMT.....	43
2.4.6.	SiPM.....	43
2.5.	Aplicaciones de PALS	44
2.5.1.	Positron emission tomography (PET)	44
MATERIALES Y MÉTODOS		46
3.	Materiales y métodos en PALS.....	48
3.1.	Setup experimental	48
3.1.1.	LYSO-SiPM	48
3.2.	Configuración de la fuente con los detectores	51
3.2.1.	Posición de los detectores	51
3.2.2.	Sandwich radiactiva	53
3.3.	Muestras estudiadas	53
3.3.1.	Vidas medias en la literatura	53
3.4.	Respuesta de tiempo	54
3.5.	Coincidence resolving time (CRT)	54
3.6.	Espectro de Energía	55
3.7.	READANDFIT2.mat	57
4.	Evolución experimental.....	58
5.	Simulaciones: Primera parte.....	65
5.1.	Introducción a las simulaciones	65
5.2.	Parámetros de simulación	65
5.3.	SIMULACIONPs.mat.....	67
5.4.	Materiales simulados	69
5.5.	fit_simulation2.mat	69
5.6.	Verificación de ajuste.....	71
5.7.	Procedimiento de las simulaciones	73
5.7.1.	Simulación de espectro de cobre (Calibración de resolución)	74
6.	Simulaciones: Segunda parte.....	76
6.1.	Simulaciones de otros parámetros	76
7.	Calibración de vida media	78
7.1.	Calibración con cobre y monedas.....	78
RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....		79
8.	Resultados simulaciones parte 1.....	81
8.1.	Calibración con cobre	81
8.1.1.	Fijando parámetros de resolución y tiempo inicial	82
8.1.2.	Búsqueda de la vida media proveniente de la fuente radiactiva.....	83
8.2.	Agua.....	83

9. Resultados simulaciones parte 2.....	86
10. Resultados CRT	88
10.1. Resultados experimentales CRT	88
10.2. Espectros CRT obtenidos	90
10.2.1. BIAS 30,2V	90
10.2.2. BIAS 31V	91
10.2.3. BIAS 32 V	91
11. Resultados del análisis PALS sobre muestras con PicoScope series 6000	93
11.1. Resultados de calibración con cobre	93
11.1.1. Espectro de energía y de diferencia de tiempo.....	93
11.1.2. Ajuste de espectro de diferencia de tiempo.....	93
11.1.3. Ajuste del espectro de cobre con 3 parámetros fijos	95
11.2. Teflón.....	96
11.2.1. Ajuste de espectro de diferencia de tiempo.....	97
11.3. Agua.....	99
11.3.1. Espectro de energía y de diferencia de tiempo.....	99
11.3.2. Ajuste de espectro de diferencia de tiempo.....	100
12. Resultados del análisis PALS sobre muestras con PicoScope series 2000	103
12.1. Resultados calibración monedas	103
12.1.1. Espectro de energía y de diferencia de tiempo.....	103
12.1.2. Ajuste de espectro de diferencia de tiempo.....	103
12.1.3. Ajuste del espectro de monedas con 2 parámetros fijos.....	105
12.2. Agua.....	106
12.2.1. Espectro de energía y de diferencia de tiempo.....	106
12.2.2. Ajuste de espectro de diferencia de tiempo.....	107
CONCLUSIÓN.....	110
13. Conclusiones.....	112
A. Scripts de Matlab	114
A.1. Script SIMULACIONPs.....	114
A.2. Script READANDFIT2.....	116
A.3. Script fit_simulacion2	119
A.4. Script getCRT	122
A.5. Script runpicoucml_loop	123
A.6. readandfit.....	128
A.7. Interfaz PicoScopeUCM.app.....	131
Bibliografía	132

Índice de Ilustraciones

Ilustración 1. Proceso de decaimiento del ^{22}Na a ^{22}Ne en el estado fundamental, emitiendo en el proceso un fotón gamma de 1274 MeV y un positrón. Figura obtenida de [1]	22
Ilustración 2. En la parte izquierda tenemos al átomo de hidrógeno, en la parte derecha tenemos al átomo de positronio formado por el electrón y su antipartícula el positrón. Imagen sacada de [5]	23
Ilustración 3. Perfil de implantación en elementos pesados. Imagen obtenida de [11]	24
Ilustración 4. Rangos de tiempo de vida para distintos materiales. Imagen sacada de [20]	29
Ilustración 5. Implantación de positrones a una muestra de Titanio, donde se observa el backscattering en la parte más cercana a la superficie.[22]	31
Ilustración 6. Configuración del setup para la técnica de correlación angular. Imagen sacada de [26]	36
Ilustración 7. Curva de correlación angular para el agua y cristales de hielo, esto a diferentes temperaturas. Se puede observar los picos de para-positronio que son las componentes angostas, y la parte ancha de la curva está asociada a la aniquilación del orto-positronio mediante el proceso de pick-off y por free annihilation.	37
Ilustración 8. Técnicas que se usan en la espectroscopía de aniquilación de positrones. 1) Técnica PALS, 2) Técnica Doppler broadening, 3) Técnica de correlación angular	38
Ilustración 9. Detectores LYSO. Imagen obtenida de https://www.luxiumsolutions.com/radiation-detection-scintillators/crystal-scintillators/lyso-scintillation-crystals	42
Ilustración 10. Valores de detectores centelladores.	42
Ilustración 11. Tomografía por emisión de positrones PET comparado con el tiempo de vuelo PET [33]	45
Ilustración 12. Configuración del setup usada en el estudio PALS	48
Ilustración 13. Sistema LYSO-SiPM desnudo sin teflón. Imagen sacada de [34]	48
Ilustración 14. Preamplificador AdvanSiD conectado con el SiPM	49
Ilustración 15. Esquema del preamplificador AdvanSiD	49
Ilustración 16. Fuente de alimentación de 3 canales, el primer canal a 31 V, el segundo canal a 5 V y el tercer canal es ground	50
Ilustración 17. Osciloscopios usados en el estudio PALS. Osciloscopio izquierdo PicoScope series 2000, osciloscopio derecho PicoScope series 6000	50
Ilustración 18. Medidas típicas en PALS en una configuración de 90 grados. a) evento correcto, b), c) y d) eventos falsos Esta imagen fue obtenida de [35]	51
Ilustración 19. Esquema de sistema Fuente-Muestras-detector visto de 3 puntos distintos. Imagen izquierda vista desde la parte lateral, imagen derecha desde la parte lateral, imagen debajo vista desde arriba.	52
Ilustración 20. Configuración 90 grados de los detectores para obtención de espectros PALS	52
Ilustración 21. Configuración Sandwich típico en los estudios PALS	53
Ilustración 22. Configuración 180 grados de los detectores para mediciones CRT	55
Ilustración 23. Espectros de energía obtenidos por cada detector	56
Ilustración 24. Interfaz PicoScope donde se puede cambiar los valores de rango de voltaje, threshold y ventanas de energía LET (low energy threshold) y UET (up energy threshold), donde C y D representan a los thresholds en energía de los detectores A y B. Events es el número de cuentas a medir. Threshold A y B representan los thresholds de tiempo	56
Ilustración 25. Espectros de energía correspondientes a los detectores A y B. Espectro verde solo toma al pico de 511 keV y el espectro amarillo solo considera al pico de 1275 keV	57
Ilustración 26. Espectros de energía y de diferencia de tiempos. Figuras proporcionadas por el script inicialmente	58
Ilustración 27. Primer setup experimental PALS usado	58

Ilustración 28. Proceso de ajuste de espectros obtenidos experimentalmente inicialmente.....	59
Ilustración 29. Interfaz PicoScope encargado de cargar los espectros de diferencia de tiempos y de energía. En la parte izquierda se observa parámetros que pueden modificarse como ser threshold y rango de voltaje.....	59
Ilustración 30. Espectro de diferencia de tiempos obtenida con la modificación del código del osciloscopio. 60	
Ilustración 31. Setup experimental dentro de una caja cuyo exterior es de aluminio.....	60
Ilustración 32. Interfaz Matlab PicoScope (ventana derecha), ajuste de espectro (ventana izquierda). En la ventana del interfaz PicoScope se observa los espectros de energía para el detector A (verde) y B (amarillo). El espectro de diferencia de tiempos (azul) es el resultado de medir “Aire” (sin muestra).....	61
Ilustración 33. Espectro de diferencia de tiempo (azul) contiene picos regulares en muestra de “Aire”......	61
Ilustración 34. Ajuste de espectro de diferencia de tiempos con picos regulares.....	62
Ilustración 35. Fuentes de alimentación del sistema LYSO-SiPM, posible fuente del ruido.	62
Ilustración 36. Nueva fuente de alimentación que reemplazó a las 2 fuentes anteriores.	63
Ilustración 37. Espectros de energía y diferencia de tiempo nuevas. Espectro de energía obtenido por el detector A (verde) solo considera el pico de 511 keV. Espectro de energía obtenido por el detector B (amarillo) solo considera el pico de 1275 keV.	63
Ilustración 38. Espectro de diferencia de tiempo obtenido para material "moneda". El espectro no contiene picos después de la optimización.	64
Ilustración 39. Osciloscopio picoscope 2000 (izquierda) usado al inicio de la serie de experimentos. Osciloscopio picoscope 6000 (derecha) usado en la etapa después de la optimización final.	64
Ilustración 40. Espectro generado por el script SIMULACIONPs. Cada color representa un decaimiento exponencial. La línea negra representa la convolución sin ruido y los puntos verdes representan la convolución con ruido.....	68
Ilustración 41. Espectro de cobre simulado para verificación del script de ajuste fit_simulacion2	72
Ilustración 42. Ajuste del espectro simulado sin ruido, los valores encontrados son iguales a los valores simulados.....	73
Ilustración 43. Ajuste del espectro simulado con ruido.....	73
Ilustración 44. Espectro de diferencia de tiempo simulado del cobre, la línea amarilla se corresponde a la vida media del positrón en el bulk, la línea morada se le atribuye a la contribución de la fuente sin formar positronio (free annihilation) y la línea verde se le atribuye a la contribución de la fuente formando o-Ps.	75
Ilustración 45. Espectros simulados con numero de cuentas 10000, 100000 y 1000000, con una resolución de 0.2 ns en los 3 espectros	76
Ilustración 46. Espectros simulados bajo un número de cuentas igual a 10000, 100000, 1000000, con una resolución igual a 1 ns	77
Ilustración 47. Tiempo inicial y resolución hallados en 10 repeticiones en el ajuste del espectro de cobre simulado	81
Ilustración 48. Resultados del ajuste del espectro de cobre simulado en 10 repeticiones sin parámetros fijos	81
Ilustración 49. Resultados de ajuste de espectro de cobre simulado con 2 parámetros fijos, resolución y tiempo inicial.....	82
Ilustración 50. Resultados de ajuste de espectro de cobre simulado con 3 parámetros fijos, resolución, tiempo inicial y vida media τ_1	83
Ilustración 51. Espectro simulado de agua con 4 exponenciales de decaimiento.....	84
Ilustración 52. Resultados de los ajustes del espectro de agua en 10 repeticiones con 4 parámetros fijos	85
Ilustración 53. Valores de tau1 y tau3 en el estudio del cobre. La línea punteada larga '- -' se sitúa en el valor de tau3 real. La línea punteada corta '....' se sitúa en el valor de tau1 real. Los puntos unidos por la línea son los valores promedio de 5 repeticiones con los valores de Numero de coincidencias y σ donde se sitúa el punto.	86
Ilustración 54. Valores de tau1 y tau3 en el estudio del agua. La línea punteada larga '- -' se sitúa en el valor real de $\tau_3 = 1.86 \text{ ns}$. La línea punteada corta '....' se sitúa en el valor real de $\tau_1 = 0.22 \text{ ns}$. Los puntos unidos	

por la línea son los valores promedio de 5 repeticiones con los valores de Numero de coincidencias y σ donde si sitúa el punto.....	87
Ilustración 55. Ejemplos de espectros de tiempo CRT con ruido para rango de voltaje igual a 2V. Todos los espectros fueron medidos con un threshold de 50 mV. El primer espectro es para un BIAS=30,2V, segunda derecha BIAS=31V, tercero debajo BIAS=32V	89
Ilustración 56. Resultados obtenidos en el experimento CRT para cada valor de BIAS.....	89
Ilustración 57. Ejemplos de espectros CRT para un BIAS de 30.2 V.....	90
Ilustración 58. Ejemplos de espectros CRT para un BIAS de 31 V	91
Ilustración 59. Ejemplos de espectros CRT para un BIAS de 32 V	92
Ilustración 60. Espectro de energía y espectro de diferencia de tiempos obtenidos en el estudio de cobre	93
Ilustración 61. Espectro de diferencia de tiempos de cobre ajustado a 4 exponenciales.....	94
Ilustración 62. Tres ejemplos de repeticiones realizadas en el ajuste del espectro de cobre sin parámetros fijos	94
Ilustración 63. Valores de vida media del ajuste de espectro del cobre en 10 repeticiones sin parámetros fijos.	95
Ilustración 64. Valores de resolución y tiempo inicial en 10 repeticiones obtenidas en el ajuste del espectro de cobre	95
Ilustración 65. Tres ejemplos del ajuste del espectro de cobre con 3 parámetros fijos	96
Ilustración 66. Valores de vida media obtenidas en el ajuste del espectro de cobre en 10 repeticiones con 3 parámetros fijos	96
Ilustración 67. Espectro de energía y espectro de diferencia de tiempos obtenidos en el estudio de teflón.....	97
Ilustración 68. Tres ejemplos de ajuste de espectro de agua con 4 exponenciales de decaimiento y resolución fija.....	98
Ilustración 69. Valores de vida media obtenidas en el ajuste del espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija	98
Ilustración 70. Valores de tiempo inicial obtenidas en el ajuste del espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija	99
Ilustración 71. Espectro de energía y de diferencia de tiempo. Espectro verde tomado por el detector A y espectro amarillo tomado por el detector B. Se corresponden a los picos de 511 keV y 1275 keV respectivamente. Espectro azul de diferencia de tiempo de agua.....	100
Ilustración 72. Tres ejemplos de ajuste de espectro de agua con 4 exponenciales de decaimiento y resolución fija.....	101
Ilustración 73. Valores de vida media obtenidas en el ajuste del espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija	101
Ilustración 74. Valores de tiempo inicial obtenidas en el ajuste del espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija	102
Ilustración 75. Espectro de energía y espectro de diferencia de tiempos obtenidos en el estudio de moneda de 20 céntimos.....	103
Ilustración 76. Espectro de diferencia de tiempos de monedas ajustado a 3 exponenciales.	104
Ilustración 77. Valores de vida media del ajuste de espectro de las monedas en 10 repeticiones sin parámetros fijos.....	104
Ilustración 78. Valores de resolución y tiempo inicial en 10 repeticiones obtenidas en el ajuste del espectro de monedas.....	105
Ilustración 79. Tres ejemplos del ajuste del espectro de monedas con 2 parámetros fijos.....	105
Ilustración 80. Valores de vida media obtenidas en el ajuste del espectro de monedas en 10 repeticiones con 2 parámetros fijos	106

Ilustración 81. Espectro de energía y de diferencia de tiempo de muestra de agua. Espectro verde tomado por el detector A y espectro amarillo tomado por el detector B. Se corresponden a los picos de 511 keV y 1275 keV respectivamente. Espectro azul de diferencia de tiempo de agua.....	107
Ilustración 82. Tres ejemplos de ajuste de espectro de agua con 4 exponenciales de decaimiento y resolución fija.....	108
Ilustración 83. Valores de vida media obtenidas en el ajuste del espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija.....	108
Ilustración 84. Valores de tiempo inicial obtenidas en el ajuste del espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija.....	109

Índice de Tablas

Tabla 1. Perfil de implantación del positrón en diferentes materiales	24
Tabla 2. Propiedades de los detectores LYSO	41
Tabla 3. Ejemplo de parámetros para considerar en el análisis de espectros PAL.	66
Tabla 4. Materiales usados para la simulación de espectros PALS	69
Tabla 5. Parámetros de simulación del espectro de cobre para verificación	71
Tabla 6. Parámetros iniciales del script fit_simulacion2 para el ajuste del espectro simulado.....	72
Tabla 7. Parámetros de simulación de espectro PALS para el cobre	74
Tabla 8. Resultados promedio del ajuste realizado sobre el espectro simulado del cobre, sin parámetros fijos	82
Tabla 9. Resultados promedio del ajuste realizado sobre el espectro simulado del cobre, resolución y tiempo inicial fijos.....	82
Tabla 10. Resultados promedio del ajuste realizado sobre el espectro simulado del cobre. Resolución, tiempo inicial y vida media del positrón en cobre fijos.....	83
Tabla 11. Parámetros simulados del espectro de diferencia de tiempo para el cobre	86
Tabla 12. Parámetros simulados del espectro de diferencia de tiempo para el agua	87
Tabla 13. Tabla de resultados obtenidos en el experimento CRT.	88
Tabla 14. Resultados promedio del ajuste de espectro de cobre sin parámetros fijos	95
Tabla 15. Resultados promedio del ajuste de espectro de cobre con 3 parámetros fijos (pintados en celeste) .	96
Tabla 16. Parámetros iniciales de ajuste del espectro de agua	100
Tabla 17. Límites del ajuste del espectro de agua	100
Tabla 18. Resultados promedio del ajuste de espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija	102
Tabla 14. Resultados promedio del ajuste de espectro de monedas sin parámetros fijos.....	105
Tabla 15. Resultados promedio del ajuste de espectro de cobre con 3 parámetros fijos (pintados en celeste)	106

Agradecimientos

Quisiera expresar mi más profundo agradecimiento a todas las personas e instituciones que han sido fundamentales en la realización de este trabajo y en mi crecimiento académico.

En primer lugar, deseo agradecer a mi tutor, Samuel España Palomares. Su apoyo, orientación y paciencia han sido imprescindibles para superar los desafíos de esta investigación. Su confianza en mi trabajo ha sido clave para mi desarrollo personal y profesional.

Extiendo también mi agradecimiento a la Dra. Begoña Quintana, por su valiosa ayuda desde el inicio de mis estudios en el máster de física nuclear. Su experiencia y disponibilidad para guiarme en este camino me han inspirado enormemente.

Agradezco profundamente al Instituto de Tecnologías Físicas y de la Información “Torres Quevedo”, donde realicé los experimentos el presente año y que me abrió las puertas para dicha investigación; y a la Universidad de Salamanca, que me brindó una educación excepcional durante este año de máster. A los docentes del máster de física nuclear, les expreso mi gratitud por compartir su conocimiento y acompañarme en este proceso de aprendizaje.

No puedo olvidar al Banco Santander, por haberme concedido la beca que hizo posible mi viaje desde mi querida Bolivia hasta la maravillosa España. Sin su apoyo, no habría podido realizar este sueño académico.

Por supuesto, quiero agradecer a mi familia: a mi padre Héctor Wilson Ramírez Melgarejo, a mi madre Marlene Rosa Tejerina Apaza y a mi hermano Alberto Wilson Ramírez Tejerina. Su amor incondicional y constante apoyo me han dado la fuerza para seguir adelante. Además, agradezco a toda la familia Ramírez, a toda la familia Tejerina, y a todos mis seres queridos y amigos en Bolivia, quienes han sido una fuente de motivación y fortaleza a lo largo de este viaje.

A todos ustedes, mi más sincero agradecimiento. Este logro también es suyo.

Motivación

Importancia Creciente de la Física de Positrones

En las últimas décadas, la investigación en física de partículas y la interacción de positrones con la materia ha ganado una relevancia significativa. La espectroscopía de aniquilación de positrones (PALS) se ha destacado como una técnica prometedora para caracterizar materiales a nivel atómico, desarrollar tecnologías avanzadas de imagen médica, como la Tomografía por Emisión de Positrones (PET).

El propósito central de esta investigación es desarrollar un sistema experimental utilizando detectores LYSO-SiPM para:

- Medir con precisión la vida media del positronio
- Optimizar la técnica PALS para su aplicación en la investigación de materiales
- Contribuir a la mejora de las tecnologías de imagen en PET

La imagenología de positronio, una técnica recientemente inventada, ha demostrado un gran potencial para mejorar los diagnósticos de cáncer. Esta técnica proporciona información más detallada sobre la patología de los tejidos en comparación con los métodos actuales de PET, subrayando la importancia de desarrollar sistemas experimentales más eficientes y precisos.

La implementación de detectores LYSO-SiPM representa un avance significativo debido a su alta eficiencia, excelente resolución temporal y su capacidad para mejorar el análisis en sistemas PALS

Este trabajo busca ser un punto de partida para el desarrollo y mejora en la imagenología de positronio, donde el campo aún está en construcción. La optimización de este sistema experimental no solo contribuirá al avance del conocimiento científico, sino que también tiene el potencial de promover el desarrollo de sistemas experimentales aplicados a la tecnología PET, así como también facilitar la caracterización de materiales con aplicaciones en diversos campos científicos y tecnológicos.

Parte I

Fundamentos teóricos y técnicos

Capítulo 1

1. Introducción

1.1. Positrón

Paul Dirac en 1930 interpreta la solución de la ecuación cuántica relativista encontrada por Klein y Gordon cuya solución daba como resultado una energía negativa para el electrón, siendo esta su interpretación como la de una partícula, un electrón positivo. Un par de años antes logra remover una de las grandes incomodidades que veía en la ecuación de Klein y Gordon, que estaba relacionado con la dependencia no lineal del tiempo.

En el mismo año se realizaron diversas investigaciones para estudiar los rayos cósmicos en cámaras Wilson, esto para estudiar más a detalle las reacciones de alta energía. En dichas cámaras se puede observar el camino recorrido por las partículas, además se puede distinguir su carga eléctrica viendo que dirección toma, ya que debido a la interacción carga-campo magnético, se sabe que las trayectorias de las partículas cargadas se curvan en presencia de campos magnéticos, por lo que unas partículas de carga positiva tienen trayectorias curvas opuestas en dirección a partículas de carga negativa. Además, se puede saber la energía y masa de la partícula analizando la ionización producida por las partículas en la cámara.

En esos años se veía las trayectorias formadas por una partícula positiva como el protón, pero la ionización producida era similar a la producida por un electrón, esto se registraba como un efecto adverso que no necesitaba explicación porque se pensaba que era “ruido” o un electrón moviéndose en la dirección equivocada. En 1932 se hizo un análisis más detallado, Anderson concluyó que el camino observado debe ser originado por una partícula de carga positiva y masa igual al del electrón, un electrón positivo. Esta observación sería la prueba de la teoría propuesta por Dirac, y en 1933 se confirmaría mediante otro estudio realizado por Blackett y Occhialini, por lo que la evidencia era clara y concisa, los electrones positivos existían.

En esta teoría de Dirac, los electrones positivos o “positrones” (simbolizados como ^+p), serían como huecos en la arena, que pueden ser llenados por electrones y desapareciendo ambos, emitiendo la energía durante este proceso, que se conoce como aniquilación. Esto se ve reflejado en la siguiente ecuación:

$$E = 2m_0c^2 + E_{+p} + E_{-e} \quad (1)$$

Donde la energía en reposo del electrón y el positrón es el primer término de la suma, que es igual a 511 KeV, y los otros dos términos son la energía cinética del positrón y el electrón. Esta energía es liberada en forma de rayos gamma, siendo sus propiedades dependientes del estado del positrón y el electrón al momento de aniquilarse.

Entonces, el estudio de estos fotones nos da información sobre cómo se aniquilaron el par electrón positrón. Usualmente se genera dos fotones en la aniquilación, aunque la emisión de un solo fotón implicaría que se emita otro cuerpo para poder conservarse el momento, es por esto por lo que se genera 2 fotones o más, esto se verá más adelante.

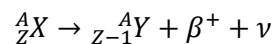
Los dos fotones emitidos en la aniquilación toman direcciones opuestas para poder conservar el momento, dependiendo de la energía esto puede ser diferente, es decir, emitirse en direcciones diferentes a 180° , pero a bajas energía se emite en direcciones opuestas con una energía de 511 KeV. Cuando un positrón entra en

un material este será frenado por la ionización de las moléculas, excitación de los electrones y vibraciones moleculares; además, usualmente llega a la energía térmica antes de aniquilarse.

La aniquilación puede ocurrir de diferentes maneras, dependiendo del estado del positrón, estos pueden ser: Aniquilación libre o Free Annihilation, es decir, aniquilación como una partícula libre, estado ligado con una molécula o defecto, o estado ligado con un electrón; este último es conocido como el átomo de positronio. El positrón tiene una vida media igual para todos los estados, exceptuando para el estado de positronio, y es igual o del orden de 0.1 ns a 0.5 ns ; en cambio, el estado de positronio puede ser mucho más grande.

1.1.1. Fuente de positrones

La antimateria puede generarse mediante procesos de desintegración, es decir, requiere de muchos procesos físicos para producirse, de estos es el decaimiento β^+ y la producción de pares:



Existen muchos isótopos que decaen mediante la emisión de positrones, pero nos centraremos en el ${}^{22}\text{Na}$ que es el más usado por la comunidad científica. Este isótopo es producido en un acelerador donde se realiza la siguiente reacción ${}^{24}\text{Mg}(D, \alpha){}^{22}\text{Na}$.

Su vida media es de 2.62 años, además, la energía final de su espectro de energía es bajo, alrededor de 545 KeV y después de un periodo corto de tiempo de alrededor de 3.6 ps, un rayo gamma es emitido del núcleo del ${}^{22}\text{Ne}$, este fotón energético tiene la energía de 1275 KeV. Además, el decaimiento es realizado con un 90% de eficiencia, el otro restante es captura electrónica.



En la siguiente figura podemos observar el decaimiento del ${}^{22}\text{Na}$ donde se muestra el fotón emitido al decaer al ${}^{22}\text{Ne}$ que es detectado y usado para una técnica experimental llamada PALS que se explicará más adelante.

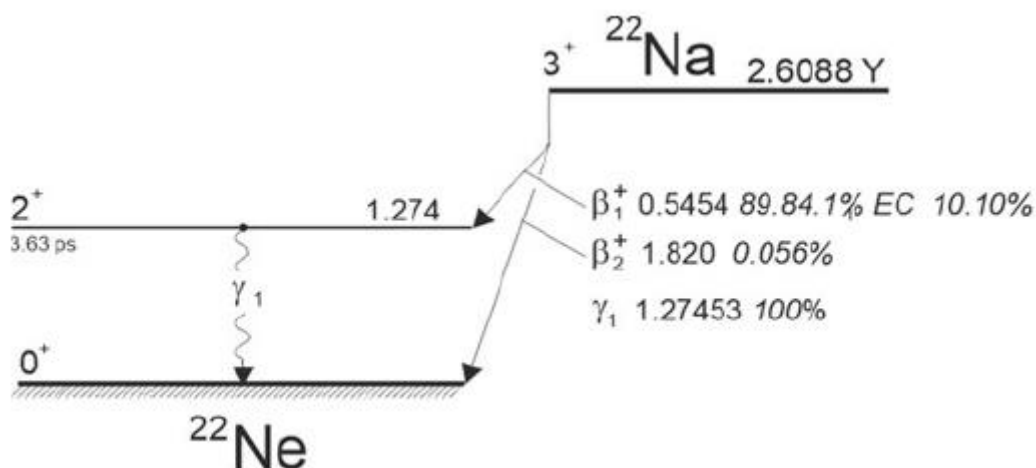


Ilustración 1. Proceso de decaimiento del ${}^{22}\text{Na}$ a ${}^{22}\text{Ne}$ en el estado fundamental, emitiendo en el proceso un fotón gamma de 1274 MeV y un positrón. Figura obtenida de [1]

1.2. Positronio

El positronio fue postulado por primera vez por Stjepan Mohorovičić en 1934 en su artículo titulado “Möglichkeit neuer Elemente und ihre Bedeutung für die Astrophysik” (“Posibilidad de nuevos elementos y su importancia para la astrofísica”)[2]. En este artículo hace referencia al hipotético estado ligado estable formado por un electrón y el positrón, siendo este nuevo estado llamado “electrum”; en su artículo realiza los cálculos prudentes para estimar el radio de este nuevo átomo y sus líneas espectrales, esto con el fin de comentar la forma en la que se podría encontrar al electrum, teniendo líneas espectrales similares a las del átomo de hidrógeno pero con 2 veces mayor longitud de onda; también afirmaba que este sería un estado estable por lo que no decaería en un periodo corto de tiempo.

Esto sería contradicho por Arthur E. Ruark en 1945, donde en una carta al editor establece que este sería un estado ligado inestable; por otro lado, daría el nombre que ahora conocemos como Positronio; además, establecería una forma de encontrar estas líneas espectrales en las nebulosas debido a los rayos cósmicos[3].

Por otro lado, Wheeler en 1946 encontraría los estados singlete y triplete, en particular su tasa de decaimiento, poniendo restricciones y estableciendo la razón por la cual el estado triplete tiene una vida media mayor que el estado singlete del positronio; además, establecería estados ligados formados por pares de electrones con positrón, pares de positrones con electrón y pares de positrones y electrones. [4]

Esto no sería descubierto hasta 1951, donde el primer resultado experimental lo obtuvo Deutsch en 1951, quien produjo positronios en gases, específicamente en gas Freón, además dando una descripción detallada de la estructura hiperfina en su artículo “Evidence for the formation of Positronium in Gases”.

Esto daría una descripción teórica y experimental del nuevo átomo formado por el electrón y su antipartícula el positrón, dejando varias características por medir tratando de mejorar la precisión de los instrumentos, estas características se pueden resumir en: El positronio “Ps” es un estado ligado cuasi-estable, tiene un tiempo de vida media que va desde el orden de los picosegundos a los nanosegundos, tiene dos estados de spin que ahora se los conoce como para-positronio “p-Ps”(estado singlete $S=0$) y orto-positronio “o-Ps”(estado triplete $S=1$), el radio del estado fundamental es mayor que el radio del átomo de hidrógeno, la estructura espectroscópica es similar a la del átomo de hidrógeno pero siendo 2 veces mayor en longitud de onda, existen diferentes descripciones dependiendo del medio por el que se encuentra el positronio y esto determina la duración de su vida media, en la aniquilación entre el positrón y el electrón se pueden emitir 2γ o 3γ . Se detallan las propiedades más importantes más adelante.

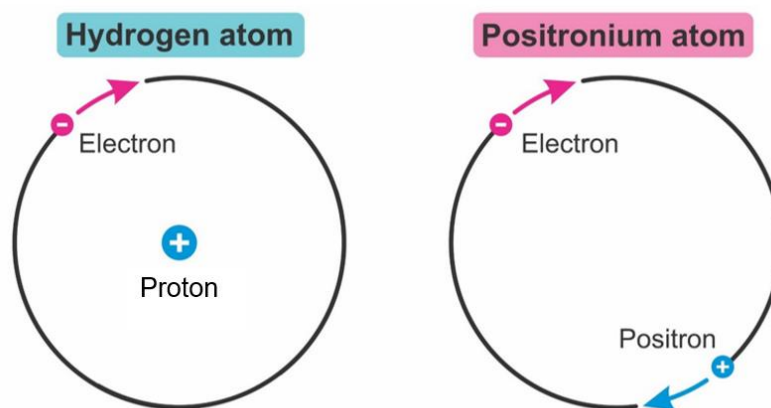


Ilustración 2. En la parte izquierda tenemos al átomo de hidrógeno, en la parte derecha tenemos al átomo de positronio formado por el electrón y su antipartícula el positrón. Imagen sacada de [5]

1.3. Positrones en materia condensada

1.3.1. Termalización de positrones

Los positrones pueden perder su energía cinética de manera desmedida rápidamente en materia condensada, ya que los procesos de scattering en los cuales los electrones pierden energía, también son aplicables para los positrones [6]. Los procesos más importantes por los cuales el positrón es termalizado son el scattering de conducción del electrón y la excitación de plasmones [7], además a energías más bajas domina el proceso de scattering con el fonón [8], esto para metales. En semiconductores, los positrones pierden energía de manera similar que en metales, con la diferencia que toma más tiempo en termalizarse y debido a que la creación del par electrón hueco en semiconductores ya no es posible cuando la energía se vuelve menor a la brecha de banda, por lo que el proceso de scattering con fonones es el protagonista. [9]

El perfil de implantación de positrones producidos en el decaimiento β^+ por una fuente de ^{22}Na fue medido para varios materiales por Brandt y Paulin [10]. Esto puede describirse mediante:

$$I(x) = I(0)e^{-\alpha_+x} \quad (5)$$

$$\alpha_+ = (16 \pm 1) \frac{\rho}{E_{max}^{1.43}} [cm^{-1}] \quad (6)$$

Donde x es la distancia desde el positrón hasta la producción de positrones, α_+ es el coeficiente de absorción y $I(0)$ es la densidad inicial de positrones. ρ es la densidad del material, E_{max} es la energía máxima del positrón.

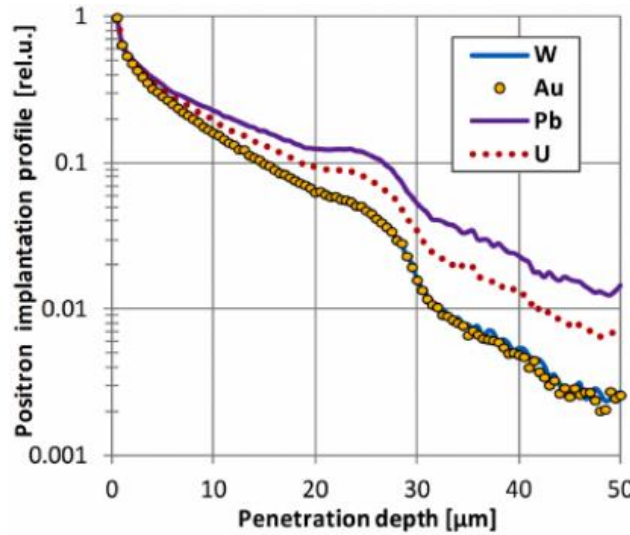


Ilustración 3. Perfil de implantación en elementos pesados. Imagen obtenida de [11]

En la siguiente tabla se muestra datos obtenidos por Brandt y Paulin para distintos materiales:

Tabla 1. Perfil de implantación del positrón en diferentes materiales

Elemento	$\rho[g/cm^3]$	$E_c[eV]$	$t_s[ps]$	$t_{term}[ps]$	r_s	$\alpha_+[cm^{-1}]$	$r_{90\%}[mm]$	$r_{99\%}[mm]$
Aluminio	2.70	0.14	0.8	13.2	2.12	104	0.221	0.442
Carbono	2.25	0.47	0.9	4.1	1.66	87	0.265	0.53
Silicio	2.33	0.21	0.9	8.9	1.97	90	0.256	0.512

1.3.2. Modelo trapping

Los positrones en el bulk (dentro del material) que se mueven libremente, pueden pasar a un estado donde quedan atrapados en un defecto del material alargando su tiempo de vida, esto debido a que en las regiones con volumen abierto tienen un potencial menor comparado con el bulk, ya que no tienen una repulsión coulombiana debido a que hay ausencia de iones positivos, por lo que el positrón puede estar en el defecto con una energía menor que si estuviera en el bulk; esto es conocido como el trapping del positrón [12].

La energía mínima de ligadura entre un positrón un defecto donde se produce el trapping es:

$$\Delta E_{min} \approx kT \ln \left(\frac{kT\tau_t}{h} \right) \quad (7)$$

Donde τ_t es el tiempo de aniquilación en el defecto específico.

Se puede determinar la tasa de transición de un positrón desde el bulk hasta el estado atrapado, que se conoce como la tasa de trapping, esto mediante experimentación. La tasa de trapping une la concentración de un defecto específico con la tasa de trapping por unidad de concentración de defecto:

$$\kappa = Cv \quad (8)$$

Donde κ es la tasa de trapping, C es la concentración de defecto, v es la tasa trapping por unidad de concentración de defecto.

Para el caso más simple, donde el positrón solo puede estar en dos estados posibles, que son el estado libre y el estado atrapado, la aniquilación es posible desde ambos estados y las transiciones solo son permitidas desde el estado libre al estado atrapado, por lo que las ecuaciones diferenciales de decaimiento son:

$$\frac{dn_{free}}{dt} = -\kappa n_{free} - \frac{n_{free}}{\tau_{free}} \quad (9)$$

$$\frac{dn_{trapped}}{dt} = \kappa n_{free} - \frac{n_{trapped}}{\tau_{trapped}} \quad (10)$$

Cuyas soluciones son:

$$n_{free}(t) = e^{-t/\tau_1} \quad (11)$$

$$n_{trapped}(t) = \frac{\kappa}{\frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2}} \left(e^{-t/\tau_2} - e^{-t/\tau_1} \right) \quad (12)$$

La probabilidad de que el positrón se aniquile en el estado libre o estado atrapado es:

$$P_{free} = \frac{1}{1 + \kappa\tau_{free}} \quad (13)$$

$$P_{trapped} = \frac{\kappa\tau_{free}}{1 + \kappa\tau_{free}} \quad (14)$$

Y los valores de tiempo de vida que se encuentran experimentalmente son:

$$\tau_1 = \frac{\tau_{free}}{1 + \kappa \tau_{free}} \quad (15)$$

$$\tau_2 = \tau_{trapped} \quad (16)$$

Además de las intensidades:

$$I_1 = \frac{\kappa \tau_{free} \tau_{trapped}}{\tau_{free} + \tau_{trapped} + \kappa \tau_{free} \tau_{trapped}} \quad (17)$$

$$I_2 = 1 - \frac{\kappa \tau_{free} \tau_{trapped}}{\tau_{free} + \tau_{trapped} + \kappa \tau_{free} \tau_{trapped}} \quad (18)$$

Para más estados se deben añadir ecuaciones diferenciales adicionales.

Una relación directa ente el positrón en el estado free o en el bulk del material se muestra en la siguiente ecuación, donde relaciona los tiempos de vida del positrón encontrados en el espectro.

$$\tau_{bulk} = \frac{1}{\left(\frac{I_1}{\tau_1} + \frac{I_2}{\tau_2}\right)} \quad (19)$$

Donde τ_2 sigue siendo igual al estado trapped, es decir, el tiempo de vida del positrón en el defecto.

1.4. Propiedades del positronio

El positronio (Ps) es un estado ligado entre el electrón y su antipartícula el positrón, estos forman un átomo cuasi-estable, que es similar al átomo de hidrógeno, variando únicamente en su masa y niveles de energía. Este estado cuasi-estable llamado positronio puede a su vez tener dos estados posibles correspondientes a sus dos estados de spin, el estado singlete y estado triplete, cada uno con un tiempo de vida distinto, y que a su vez la aniquilación del estado singlete se realiza via emisión de 2 fotones gamma cada uno de 511 keV antiparalelos, y el estado triplete mediante la emisión de 3 o más fotones gammas, siempre y cuando sea un número impar, aunque la emisión de 3 fotones es el que domina, teniendo estos gamma una distribución de energía extendiéndose hasta 511 keV, estos siendo coplanares, por lo que la medida de estos fotones son la prueba de la formación de positronio. Todo esto se detalla a continuación.

1.4.1. Energía del estado fundamental del positronio

El átomo de positronio al ser formado por un electrón y un positrón (antipartícula del electrón), éste tiene una masa reducida igual a la mitad de la masa del electrón, por lo que la energía del estado fundamental de este átomo es igual a 6,8 eV.

$$E_n = -\frac{\alpha^2 m_e c^2}{4n^2} \quad (20)$$

1.4.2. Estados del Positronio

Estos estados de spin pueden ser 2, uno que tiene como spin $S=0$ y el otro con spin $S=1$. El estado $S=0$ al tener spin neto cero se conoce como estado singlete; por otra parte, el estado de spin $S=1$ puede tener 3 estados posibles o triplete.

Estado singlete de spin total $S = 0, (m_s = 0)$ “Para-positronio”

$$\psi_S(m_s = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \quad (21)$$

Estado triplete de spin total $S = 1, (m_s = -1, 0, 1)$ “Orto-positronio”

$$\psi_T(m_s = -1) = \downarrow\downarrow \quad (22)$$

$$\psi_T(m_s = 1) = \uparrow\uparrow \quad (23)$$

$$\psi_T(m_s = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \quad (24)$$

El sistema formado por el electrón y su antipartícula con un momento angular ℓ y spin s tiene la siguiente paridad:

$$\Pi_{Ps} = (-1)^{\ell+s} \quad (25)$$

Este término de paridad es bajo una transformación de carga C , por lo que si se reemplaza los valores del estado fundamental donde $\ell = 0$, y los valores de spin total $s = 0$ y $s = 1$, tenemos los valores de paridad. Debido a la invarianza de carga de la interacción electromagnética, la diferencia es la que juega un papel importante en los modos de decaimiento; es decir, el estado singlete decae en números pares de rayos gamma, en cambio, el estado triplete decae en un número impar de rayos gamma, esto debido a que el sistema compuesto por n fotones tiene una paridad C igual a $(-1)^n$. El decaimiento de un único fotón está prohibido debido a la conservación de energía momento. Entonces, podemos resumir el número de fotones en los que decae el positronio de acuerdo con lo siguiente:

$$Ps \rightarrow n\gamma \quad (26)$$

Para-positronio p-Ps (estado singlete $s = 0$), paridad positiva, por ende $n = 2, 4, 6, 8, \dots$

Orto-positronio o-Ps (estado triplete $s = 1$), paridad negativa, por ende $n = 3, 5, 7, 9, \dots$

Los decaimientos en 2 y 3 gammas son los que dominan ante los valores superiores de 4, 5, 6, ...

El peso estadístico del estado triplete es tres veces mayor que el del estado singlete. Por lo tanto, en casos normales, se forma tres veces más orto-positronio que para-positronio.

1.4.3. Tiempo de vida media del positronio.

En el estado fundamental el positronio puede tener 2 vidas medias, estos son el del estado singlete (para-positronio) y estado triplete (orto-positronio). Estos pueden encontrarse en función de las constantes como ser la constante de la estructura fina, la masa del electrón, la velocidad de la luz y la constante de Planck. Las expresiones de las tasas de decaimiento son las siguientes:

Estado triplete (orto-positronio)

$$\Gamma_{3\gamma}(n_{Ps}, {}^3S_1) = \frac{2}{9\pi}(\pi^2 - 9) \frac{mc^2}{\hbar} \frac{\alpha^6}{n_{Ps}^3} \quad (27)$$

Estado singlete (para-positronio).

$$\Gamma_{2\gamma}(n_{Ps}, {}^1S_0) = \frac{1}{2} \frac{mc^2}{\hbar} \frac{\alpha^5}{n_{Ps}^3} \quad (28)$$

Para el estado fundamental $n = 1$ se tiene:

Parapositronio:

$$\Gamma_{2\gamma}(n_{Ps}, {}^1S_0) = \frac{1}{2} \frac{mc^2}{\hbar} \frac{\alpha^5}{n_{Ps}^3} \sim 8,032502 \times 10^9 [1/s] \quad (29)$$

La tasa de decaimiento para el parapositronio fue calculada por primera vez por Wheeler en 1946 [4] y por Jean Pirenne. Este cálculo se hizo a primer orden, por lo que se hizo una corrección años más tarde, dando como resultado un número más acertado con los experimentos; la expresión teórica usada incluyendo términos de orden superior da como resultado un valor [13] de $7,98950 \times 10^9 [1/s]$ que se acerca mucho más con el valor experimental $7,9909 \times 10^9 [1/s]$ [14].

Orto-positronio:

$$\Gamma_{3\gamma}(n_{Ps}, {}^3S_1) = \frac{2}{9\pi} (\pi^2 - 9) \frac{mc^2}{\hbar} \alpha^6 \sim 7,2111670 \times 10^6 [1/s] \quad (30)$$

El cálculo de la tasa de decaimiento para el estado triplete en primera aproximación fue logrado en 1949 por Ore y Powell [15], posteriormente se obtuvo una confirmación experimental dos años después por Deutsch en 1951 [16].

Este valor obtenido al orden más bajo puede mejorarse introduciendo correcciones predichas por el QED de orden superior; de hecho, esto fue realizado los años siguientes donde el valor teórico que es comúnmente usado es igual a $7,039979 \times 10^6 [1/s]$ [17].

Hubo controversia entre los experimentales y los teóricos entre los años 1970 y 2000 debido a que el valor teórico y experimental iban cambiando, buscando estar en acuerdo o buscando tener mayor precisión, pero conforme se iba produciendo los cambios con correcciones a un loop para los teóricos, o correcciones de diversos efectos como el efecto Stark o las contribuciones de la dependencia temporal de la tasa de aniquilación por pick-off en el fitting por parte de los experimentales, se iban produciendo estos desencuentros entre los teóricos y los experimentales haciendo que este se denomine como el “puzzle del tiempo de vida del orto-positronio”.

El dato experimental de la tasa de decaimiento del orto-positronio tenía una precisión del $\pm 10\%$, por lo que era necesario más experimentos con mayor precisión. Esto fue evolucionando en el transcurso de los siguientes 50 años, en donde no solo se usó gases como target para evaluar la vida media del orto-positronio, sino que se usó polvo y el vacío evidentemente. Estos experimentos pueden clasificarse en 3 de acuerdo con la técnica usada para crear los positronios, donde en cada medio existe un proceso diferente al formarse el positronio.

En los gases el positronio es formado mediante colisiones entre los positrones con las moléculas del gas que se encuentra a diferentes presiones.

En polvo se usa comúnmente SiO_2 como medio y en los huecos intergranulares de este polvo se producen los átomos de positronio, en las paredes de estos espacios se producen colisiones que provocan la aniquilación y por ende la emisión de gammas. El positrón de este átomo de positronio no se aniquila con su compañero, sino con los electrones de las paredes de los espacios intergranulares del polvo, conocido como proceso de pick-off, ya que el positrón toma un electrón del medio, por lo que la vida media depende de estos espacios intergranulares. [18]

En una cavidad de vacío se implantan positrones lentos que interactúan con una superficie de SiO_2 o de MgO , entonces estos positrones son usados para formar positronio y cuando llegan a la cavidad de vacío estos pueden ser libres y no sufrir muchas colisiones. [19]

El intervalo de tiempo entre la inyección de los positrones al target para formar el orto-positronio y la detección de los rayos gamma emitidos del orto-positronio es el usado para formar un espectro de tiempo, esto se detallará más adelante.

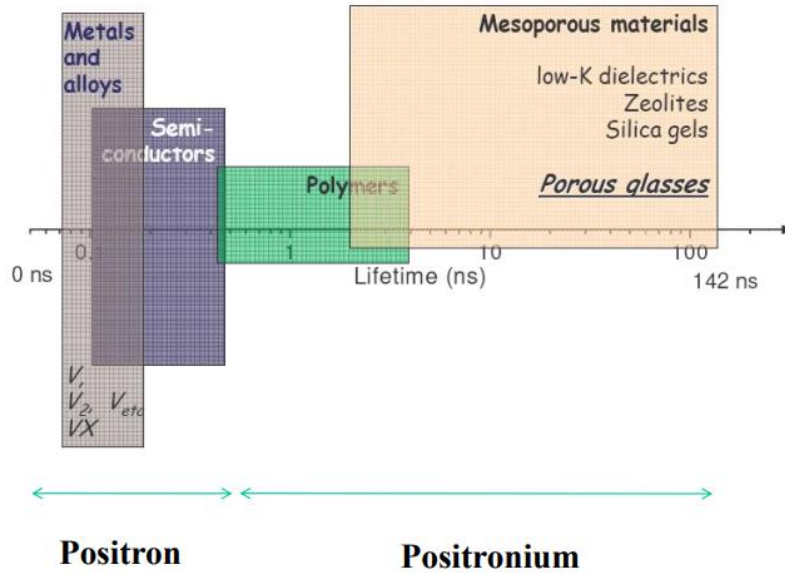


Ilustración 4. Rangos de tiempo de vida para distintos materiales. Imagen sacada de [20]

1.5. Formación de positronio en líquidos y gases

1.5.1. Modelo de Spur

Este modelo fue presentado por O. E. Mogensen en 1974 en su artículo titulado “Spur reaction model of positronium formation”[21]. Un positrón emitido por un proceso beta puede provocar ionización en su recorrido a través de un medio, en este rastro que deja en su camino llamado “spur” provoca que los positrones que vienen detrás del positrón inicial formen los átomos de positronio con los electrones libres del spur, por lo que la formación de los átomos de positronio dependerá de cuanta cantidad de electrones libres existan en el spur o de los iones generados, ya que los átomos de positronio también pueden generarse mediante el proceso de pick-off, donde los positrones quitan algunos electrones de los iones que están débilmente ligados. La creación de átomos de positronio entra en lucha con otros procesos que desvían electrones del spur y también batallan contra la recombinación entre los iones positivos y los electrones libres, por lo que hay una estrecha relación entre los electrones libres, su dispersión, distribución espacial, cantidad y la probabilidad de formación del positronio [21]. Las reacciones típicas en el spur son las siguientes:



$$[^{-}e + ^{+}p] \rightarrow Ps \quad (34)$$

$$[^{+}p + M_n \rightarrow q\gamma + M_{n-1}M^{+}] \quad (35)$$

Los corchetes se corresponden a los procesos dentro del spur. Estas reacciones son las más comunes para la formación de positronio en líquidos no polares. Donde la segunda reacción simboliza la recombinación del exceso de electrones e iones positivos, la tercera simboliza la difusión fuera del spur de ^{-}e , ^{+}p , M^{+} para convertirse en iones libres. La cuarta se corresponde a la formación de positronio y la última se corresponde al decaimiento del positrón libre.

1.5.2. Modelo de Gap de Ore

El modelo del Gap de Ore fue propuesto por A. Ore en 1949 en su artículo titulado “Annihilation of positrons in gases”[15]. Este modelo trata sobre la formación del positronio cuando interactúa con un material en estado gaseoso, hasta establecer un límite por el cual se puede formar el positronio. Cuando el positrón ingresa en el material gaseoso, este irá perdiendo su energía y se irá frenando debido a que este ioniza el gas. Cuando la energía del positrón está por debajo del potencial de ionización V , el positrón tendrá más probabilidad de frenarse que de formar el positronio, debido a la excitación electrónica de las moléculas. Cuando la energía baje más, en particular, cuando esté debajo de la energía más baja de excitación E^k , el positrón se irá frenando ahora debido a las colisiones elásticas y la excitación de las vibraciones de las moléculas, en este caso, la probabilidad de que se forme Positronio es más grande que la probabilidad de que se frene. Cuando la energía baje aún más, en particular, por debajo de la diferencia entre el potencial de ionización y la energía de ligadura del Positronio ($V - 6,8 \text{ eV}$), el positrón ya no podrá formar Positronio, ya que no tendrá la energía suficiente para romper la energía de ligadura del electrón con la molécula del material. Por tanto, el Positronio solo puede formarse dentro de un gap, conocido como gap de Ore:

$$V - 6,8 \text{ eV} \leq E_{\text{positrón}} \leq E^k \quad (36)$$

En medios condensados, debido a la presencia de moléculas y falta de espacio libre, el estado final del positronio difiere de su comportamiento en el vacío; este es el llamado positronio cuasi-libre.

El gap de Ore tiene una ligera modificación ya que se tomaría en cuenta valores del medio, como por ejemplo en un medio dieléctrico, podemos insertar la permitividad dieléctrica, que tiene una relación con el índice de refracción.

$$V_L - \frac{6,8}{\epsilon^2} \text{ eV} \leq E_{\text{positrón}} \leq E^k \quad (37)$$

Donde V_L llega a ser el potencial de ionización en fase líquida de una molécula, que llega a ser aproximadamente igual a $V_L = V - V_0 - |U_p|$, donde V_0 llega a ser la energía del estado fundamental del electrón en el medio, U_p es la energía de interacción de polarización del ion positivamente cargado con el medio. Este gap de Ore se ve reducido mucho, por lo que para medio moleculares se debe tener en cuenta otros mecanismos para explicar la formación del positronio.

La probabilidad de formación del positronio en función de las cross section es la siguiente:

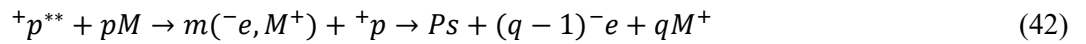
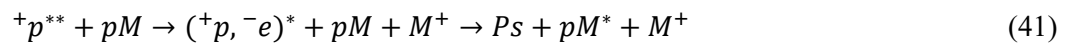
$$P(E) = \frac{\sigma_{Ps}(E)}{\sigma_{Ps}(E) + \sum \sigma_{inelastica}(E)} \quad (38)$$

Donde $\sum \sigma_{inelastica}$ se corresponde a los canales de colisión inelástica y σ_{Ps} es la cross section para la formación de positronio. En muchos casos no existe mucha información de las cross section, por lo que la ecuación no puede ser aplicada directamente.

1.5.3. Modelo combinado ore-spur

El modelo spur y Ore pueden ser combinados y unificados en un modelo más sencillo y compacto, implicando la necesidad de cambiar dos importantes cuestiones dentro de ambos modelos. Primero, permitiendo la moderación de positronio a energías mayores que 6,8 eV en un sentido muy general; y segundo, permitiendo la posibilidad de la formación de positronio en colisiones directas para energías de positrones por debajo de la barrera de ionización del medio. Esto provoca un acercamiento de ambos modelos hacienda que cubran todo el rango de densidades, desde gases diluidos hasta líquidos muy densos.

Para este modelo, los siguientes mecanismos deben ser considerados para la producción de positronios termalizados:



Donde la primera reacción se corresponde a la formación del positronio en una colisión directa, mientras que el resto de las reacciones se corresponden a la moderación de positronio “caliente”.

1.6. Formación de positronio en materia condensada

El modelo de Ore puede ser aplicado a sólidos, pero el gap de energía se reduce tanto que la formación de positronio se vuelve un evento extremadamente raro. Este gap se reduce debido a que la energía cinética mínima crece debido a la repulsión de las moléculas del medio, tanto el positrón como el electrón son repelidos por los iones de las moléculas circundantes. Sin embargo, el positronio puede formarse en la parte superficial del material, esto se puede explicar debido a otros procesos.

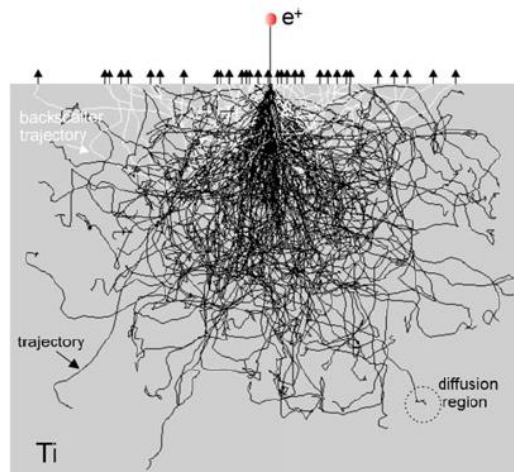


Ilustración 5. Implantación de positrones a una muestra de Titanio, donde se observa el backscattering en la parte más cercana a la superficie.[22]

Los positrones incidentes pueden sufrir backscattering, donde estos pueden llegar a tener una fracción de su energía cinética inicial o también llegar al estado bulk en el material, donde una fracción de estos pueden ser sobrevivir al trapping en los defectos y a la aniquilación, donde pueden retornar a la superficie termalizados. En ese camino de retorno, los positrones pueden pasar a través de una zona con densidad electrónica reducida en la superficie y capturar un electrón para formar un positronio que eventualmente terminará dejando el material [23]. El potencial de formación en la superficie está dado por:

$$E_{Ps} = \phi_+ + \phi_- - 6.8 \text{ eV} \quad (43)$$

Donde ϕ_+ y ϕ_- son las funciones de trabajo para el positrón y electrón respectivamente, que está definido como:

$$\phi_{\pm} = -D - \mu_{\pm} \quad (44)$$

Donde D es la barrera dipolar de superficie y $\mu_{\pm}$ es el potencial químico para el positrón y electrón.

1.7. Interacción del positronio con la materia

El átomo de positronio una vez formado puede interactuar de distintas maneras con el medio material que lo rodea, tanto con sus electrones o con las propias moléculas para formar otras estructuras o aniquilarse de maneras particulares. Existen ciertos mecanismos que causan la aniquilación produciéndose 2 fotones, estos pueden ser:

1.7.1. Pick-off

Existe una cierta probabilidad de la aniquilación del positrón con un electrón, pero no con su compañero con el que forma el estado de positronio, sino con un electrón del medio material, esto debido a que la función de onda del positrón dentro del positronio puede superponerse sobre la función de onda de un electrón circundante, por lo que la probabilidad de aniquilación se hace presente.

Cuando el positronio, en particular el orto-positronio se forma en el material, este continua su camino colisionando con el material de su alrededor y esto acelera el inevitable proceso de aniquilación por pick-off. Por otro lado, puede que el electrón del átomo de positronio intercambie su spin con los electrones del medio material, provocando la transformación de orto-positronio a para-positronio y decayendo más rápido aniquilándose en dos fotones, esto es conocido como intercambio de spin.

Existe una forma matemática más compacta para la tasa de pick-off, fenomenológicamente puede ser expresado como:

$$\Gamma_{pick-off} = n\sigma_a v(t) \quad (45)$$

Donde n es la densidad del material, σ_a es el cross section de aniquilación y $v(t)$ es la velocidad del orto-positronio. La velocidad dependiente del tiempo del orto-positronio es un problema debido a varias razones, pero este debería converger a una constante a temperatura ambiente y con esto usar extrapolación para encontrar valores de la tasa de pick-off. Esto se hizo en varios experimentos, pero estos fueron insatisfactorios, dejando una batalla entre experimentales y teóricos como se mencionó anteriormente. Las principales razones de los errores son: la dificultad a la hora de determinar el tiempo en el cual el orto-positronio está completamente termalizado; la variación de densidad, ya que el proceso de termalización depende mucho de la densidad del medio material, por ejemplo, se sabe que a baja densidad el orto-positronio no será completamente termalizado debido a su gran tiempo de decaimiento, esto provoca que no haya dependencia lineal con la densidad; y por

último, la energía cinética del orto-positronio en el aparato obedece la ecuación de Boltzmann, sin embargo en materiales con cavidades hay algunos que no son desacelerados completamente en el material, por lo que tienen alta probabilidad de sufrir aniquilación por pick-off con las paredes de las cavidades, estos se escapan del área de detección, por lo que se escapan de los cálculos.

1.7.2. Modelo de la burbuja

Este modelo fue propuesto por Richard Ferrell [24]. en 1957, donde el líquido usado como target fue Helio líquido. El modelo habla sobre la formación de una cavidad como una burbuja, producida por la repulsión entre el átomo de positronio en el estado de orto-positronio y los átomos del medio que lo rodean, es decir, los átomos se ven repelidos por el orto-positronio debido al electrón del positronio y a los electrones de los átomos circundantes, por lo que el positronio estaría confinado en un potencial. En una primera versión del modelo, se consideraba como un pozo esférico infinitamente repulsivo de radio R_0 . Posteriores modificaciones y estudios alteraron el modelo, haciendo que este pozo tenga una altura finita U_0 , además, los límites en forma de burbuja son eliminados para que se ajuste de mejor manera con los datos experimentales. Se trata entonces al átomo de positronio como una partícula puntual dentro de un pozo de potencial finito y con nulas perturbaciones del sistema interno, siendo esto una sobre simplificación.

El proceso de aniquilación por Pick-off entra también en juego, pero la tasa de decaimiento a través del proceso pick-off es mucho menor que lo esperado, esto ya que uno espera que debido a la densidad electrónica del material haya más probabilidad de que el positrón del positronio se encuentre con más facilidad con los electrones del medio, pero a esto se debe considerar el tipo de material, por lo que en líquidos la repulsión eléctrica entre el electrón del positronio y los electrones del medio líquido hacen que se cree una burbuja de vacío alrededor del positronio, como si estuviese atrapado, por lo que el modelo mencionado es el que describe mejor este proceso.

La energía del punto cero del átomo de positronio está dado por:

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4m_e R_0^2} \quad (46)$$

Esto produce una presión sobre las paredes de la burbuja, lo que debe ser compensada con fuerzas de compresión descritas por la tensión superficial del fluido, por lo que la energía total para el Ps viene dada por:

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4m_e R_0^2} + 4\pi R_0^2 \sigma \quad (47)$$

Donde σ es la tensión superficial, m_e es la masa del electrón, R_0 es el radio del pozo esférico.

Tomando la consideración del pozo finito de altura U_0 se puede obtener una ecuación de Schrodinger para el estado fundamental del movimiento del positronio en la burbuja, y la solución de la forma senoidal y exponencial.

Dentro del pozo:

$$\psi_{inside} = \frac{\sin kr}{r} \quad (48)$$

Fuera del pozo:

$$\psi_{outside} = \frac{e^{-kr}}{r} \quad (49)$$

Dando expresiones para el numero de onda igual a:

$$k_{inside} = \sqrt{\frac{4mE}{\hbar^2}} \quad k_{outside} = \sqrt{\frac{4m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (50)$$

Las condiciones de contorno del pozo dan lugar a los valores propios de la energía dentro de las expresiones de los números de onda inside y outside:

$$k_{outside} = -k_{inside} \cot kR_0 \quad (51)$$

Posteriormente se minimiza la energía total que contiene la fuerza de presión y la provocada por la tensión superficial que va desde afuera hacia dentro de la burbuja.

$$\frac{\partial}{\partial R_0} (E + 4\pi R_0^2 \sigma) = 0 \quad (52)$$

La aniquilación por pick-off debe contener información sobre el positrón dentro del positronio y los electrones del medio en el que se encuentra el positronio, por lo que la tasa para este proceso debe contener una probabilidad de encontrar al átomo de positronio en el medio, que en este caso es líquido y también debe contener la densidad de los electrones del medio, esta probabilidad es:

Probabilidad de encontrar al átomo de positronio en el medio líquido (fuera del pozo)

$$\mathcal{P} = 4\pi \int_{R_0}^{\infty} |\psi_{ps}(r)|^2 r^2 dr \quad (53)$$

Por lo que la tasa del proceso pick-off es:

$$\Gamma_{pick-off} = 4\pi r_0^2 c \rho Z_{eff} \mathcal{P} \quad (54)$$

Donde r_0 es el radio clásico del electrón, Z_{eff} es el número efectivo de electrones disponibles por molécula para aniquilación pick-off del positrón en el ortopositronio, c es la velocidad de la luz y ρ es la densidad de moléculas en el líquido.

Esto requiere modificaciones ya que la figura de un contorno definido entra en conflicto con la noción de interfaces liquido-vapor, además debería haber una transición entre las regiones mencionadas, es decir, la burbuja no tiene por qué tener un contorno definido.

Esto se resuelve con un modelo de interfaz suave, propuesto por Mukherjee en 1998 [25], donde el término de densidad tiene otra forma, dentro de esto proponen 2 formas para el perfil de densidad:

$$\rho(r) = \rho_0 \tanh^2 \left(\frac{r}{R_0} \right) \quad (55)$$

Y también:

$$\rho(r) = \rho_0 (1 - e^{-r/R_0}) \quad (56)$$

Además, propone que la interacción de repulsión eléctrica es de corto alcance, por lo que el potencial tendrá la misma forma que su respectiva densidad.

Estas modificaciones conllevan un cambio en las expresiones para la función de onda del positronio y la probabilidad de encontrar al átomo de positronio en el medio, dando un resultado mejor comparable con el modelo de contorno definido.

1.7.3. Intercambio de spin

En este proceso, el electrón del orto-positronio tiene una probabilidad de intercambiar la orientación de su spin con uno de los electrones del medio material.



Tomando como ejemplo común el caso del oxígeno, hay dos mecanismos diferentes de conversión de spin. El primero es la conversión inelástica que ocurre cuando el positronio excita a la molécula de oxígeno, este proceso tiene una energía umbral de 0.977 eV. El segundo proceso es la dispersión elástica que deja al oxígeno en el estado fundamental; debido a que no tiene umbral, este proceso es el dominante para positronios termalizados.

Las cross section son constantes cuando las velocidades de los positronios están en el rango de termalizado a temperatura ambiente. La cross section inelástica y elástica está determinada. La tasa de intercambio de spin es proporcional a la densidad del gas, por lo que la tasa de conversión orto-para puede ser expresado como la ecuación del proceso de pick-off.

$$\Gamma_{orto-para} = n\sigma_{spin}\bar{v} = n\sigma_{spin}\sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}} \quad (58)$$

La velocidad promedio es la velocidad térmica del positronio a temperatura ambiente.

1.7.4. Extinción del positronio en campos magnéticos

Otra forma de convertir el orto-positronio en para-positronio es mediante campos magnéticos. El estado triplete con spin igual a cero puede mezclarse con el estado singlete, esto ocasiona una reducción de la tasa de decaimiento observada del orto-positronio. Los estados triplete del orto-positronio con spin igual a 1 no son afectados por el campo magnético, por lo que la máxima reducción en la fracción del orto-positronio es de 1/3.

Capítulo 2

2. Técnicas experimentales

2.1. Técnicas actuales en el estudio del positrón y positronio

2.1.1. Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy (PALS)

Esta técnica consiste en la detección de dos rayos gamma provenientes del nacimiento del positrón y de su respectiva aniquilación. Se tiene dos detectores posicionados en una cierta configuración que recibirán los rayos gamma provenientes de la desintegración de la fuente de positrones, que comúnmente es el ^{22}Na . El ^{22}Na decae en $^{22}\text{Ne}^*$ y un positrón, el $^{22}\text{Ne}^*$ a su vez decae a ^{22}Ne emitiendo un gamma de 1275 KeV, este será el fotón que detecte uno de los detectores y se usa como punto de partida para iniciar un contador de tiempo. Posteriormente el positrón sigue su camino en el medio material y este puede formar un estado cuasi-estable llamado positronio, que está formado por el positrón emitido por el ^{22}Na y un electrón del medio material. En otras ocasiones el positrón simplemente no forma el estado de positronio y simplemente se aniquila con algún electrón. De cualquier forma, el positrón se aniquila emitiendo 2 o 3 rayos gamma, donde uno de estos es detectado por uno de los detectores, este es el punto final para parar el contador de tiempo. Para poder analizar esta diferencia de tiempo se convierte esta diferencia en una señal eléctrica, donde la altura de la señal es proporcional a esta diferencia de tiempo, además esta altura es analizada y guardada en un analizador multicanal.

2.1.2. Técnica de correlación angular

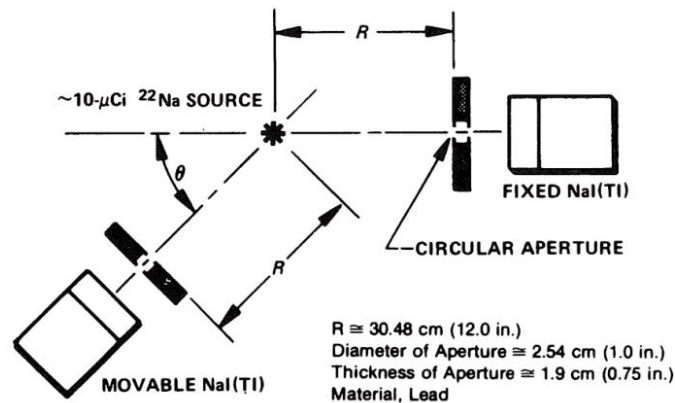


Ilustración 6. Configuración del setup para la técnica de correlación angular. Imagen sacada de [26]

En esta técnica se mide la correlación angular entre los 2 fotones de aniquilación del positrón y el electrón del medio. Para esto es necesario dos detectores, su disposición o configuración es diferente a la técnica PAL, ya que es necesario que existe una variación en el ángulo entre el eje de un detector y el eje del primer detector. El número de fotones en coincidencias es medido en función del ángulo, si el ángulo es diferente de cero entonces la suma del momento de los dos fotones en coincidencias debe ser diferente de cero, pero si el momento es conservado en la aniquilación, el momento total es igual al momento del centro de masa del par aniquilación electrón positrón. Usualmente el momento del centro de masa será igual al del electrón, esto es una buena aproximación ya que el positrón antes de la aniquilación será termalizado y el electrón (que está ligado en el medio material) tiene una energía cinética del orden de 5 eV. Los picos en el espectro obtenido hacen referencia al proceso de aniquilación; cuando el para-positronio es termalizado y se aniquila, este da en el

espectro una componente muy angosta, aproximadamente del orden de 1 mrad; en cambio, el componente amplio sin picos es debido al free annihilation y a la aniquilación del orto-positronio mediante el proceso de pick-off.

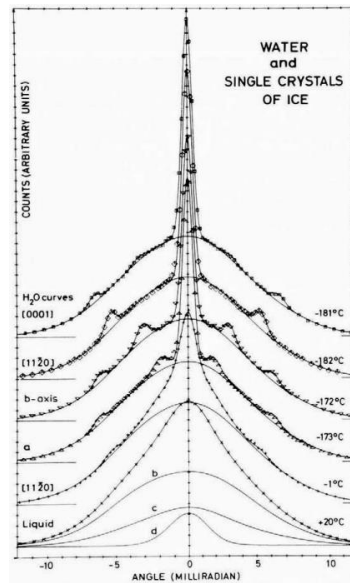


Ilustración 7. Curva de correlación angular para el agua y cristales de hielo, esto a diferentes temperaturas. Se puede observar los picos de para-positronio que son las componentes angostas, y la parte ancha de la curva está asociada a la aniquilación del orto-positronio mediante el proceso de pick-off y por free annihilation.

2.1.3. Técnica de aniquilación por 3-gamma

En esta técnica se hace uso de 3 detectores para detectar los 3 gamma que corresponden a los 2 gamma en coincidencias y al producido por la desexcitación del Neón que es el gamma de 1275 keV. Usualmente se colocan los detectores con un ángulo de 120° entre ellos y conectados a un circuito en coincidencias y con la muestra y la fuente radiactiva en medio. Esta técnica solo proporciona una figura que en principio puede ser deducida de las mediciones de tiempo de vida. Las dificultades experimentales como ser los tiempos exagerados de conteo son probablemente la razón por la que esta técnica no es usada tanto a comparación de las dos anteriores.

2.1.4. Técnica Doppler broadening

Esta técnica hace uso del efecto Doppler para obtener información de la aniquilación de los positrones con el medio material estudiado. En el marco de referencia en reposo, la energía del par rayos gamma emitidos en la aniquilación del electrón con el positrón es simplemente m_0c^2 , y son emitidos en direcciones opuestas formando un ángulo de 180°. En el marco de referencia del laboratorio el momento del par se manifiesta como un desplazamiento Doppler en la energía individual de cada rayo gamma. Esto se describe con la siguiente ecuación:

$$\Delta E = \pm \frac{cP_L}{2} \quad (59)$$

Donde P_L es la componente longitudinal del momento y c la velocidad de la luz.

Debido a esto, un rayo gamma tiene un desplazamiento al rojo y otro al azul, esto se manifiesta como un ensanchamiento en la línea de aniquilación cuando es observado por un espectrómetro que recolecta os fotones gamma rojos y azules.

En la siguiente figura se resume las técnicas más importantes:

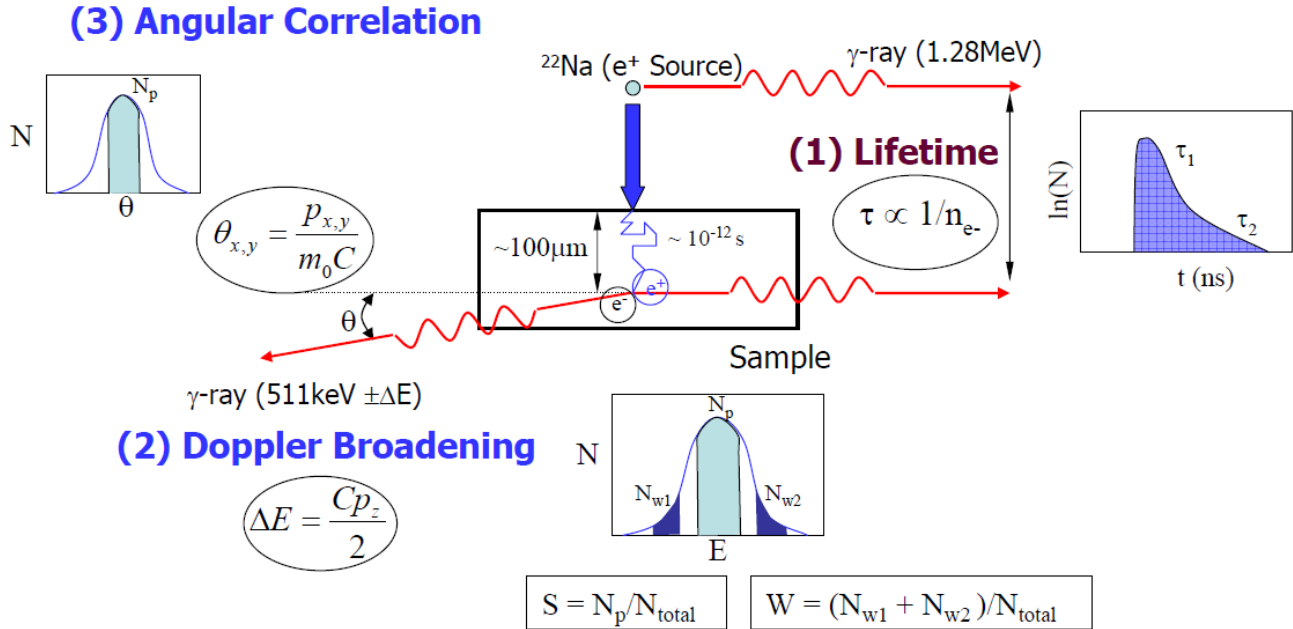


Ilustración 8. Técnicas que se usan en la espectroscopía de aniquilación de positrones. 1) Técnica PALS, 2) Técnica Doppler broadening, 3) Técnica de correlación angular

2.2. Espectroscopía PAL

La espectroscopía PAL (PALS) es una herramienta muy útil a la hora de buscar defectos de materiales a escalas atómicas [27], también para caracterizar materiales, o su más reciente uso en la medicina para encontrar relaciones entre el tiempo de vida del positronio, en particular el orto-positronio, y las células tumorales, siendo esto aun en desarrollo.

En PALS (Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy), con las diferencias de tiempo se obtiene un espectro, que no es más que una distribución estadística, del cual se obtiene la información deseada. Este espectro está compuesto por una o varias funciones exponenciales de decaimiento, cuyos parámetros de la función exponencial son la intensidad y la tasa de decaimiento del positrón y positronio. Debido a que existen varios canales de aniquilación del positronio, el espectro está formado por más de una exponencial, estos canales pueden suscitar la formación del estado para-positronio, orto-positronio y aniquilación libre, además algunos otros procesos como la conversión de para-positronio en orto-positronio; por lo que, usualmente se tiene una suma de 3 exponenciales dentro de un espectro. El tiempo de vida media τ_i más largo se le atribuye al estado del orto-positronio y al más cortó se le atribuye al para-positronio; la aniquilación libre se refiere a la no formación de positronio y se tiene la aniquilación directa entre el positrón y el electrón. El radio entre el área bajo cada componente y el área total es la intensidad relativa del componente I_i .

La ecuación matemática sobre la que se rige este espectro es la siguiente[28]:

$$y(t) = \sum_{i=1}^{k+1} \frac{I_i}{\tau_i} \exp\left(-\frac{t}{\tau_i}\right) + C \quad (60)$$

La función sumatoria de exponenciales puede involucrar $k + 1$ exponenciales de decaimiento, cada uno con su respectivo tiempo de vida media. Además, C es el fondo o background que se debe a datos random que no contribuyen en el tiempo de vida. Debido a que la electrónica en el espectrómetro de tiempo y los detectores tienen una resolución de tiempo finita, se genera un pico rápido en el espectro de tiempo que tiene la forma de una función gaussiana o mejor conocido como función de resolución:

$$G(t) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left[-\left(\frac{t - t_0}{\sigma}\right)^2\right] \quad (61)$$

Donde σ es conocido como la resolución y tiene relación con el ancho de la gaussiana a media altura, el full width high maximum de este pico (FWHM) es calculado de la siguiente manera:

$$FWHM = 2\sigma\sqrt{\ln 2} \quad (62)$$

El espectro de tiempo de vida medido por el espectrómetro es una convolución de la función sumatoria de exponenciales y la función gaussiana:

$$H(t) = y(t) \otimes G(t) \quad (63)$$

La función de resolución de tiempo $G(t)$ puede determinarse mediante experimentación, donde se usa una fuente radiactiva de ^{60}C que emite instantáneamente en cascada dos fotones gamma con energías de 1173 y 1332 keV; midiendo estos tiempos y obteniendo un espectro podemos obtener información sobre la función de resolución con precisión.

Existe una segunda forma de encontrar la función de resolución, ya que también es suficiente medir el espectro de tiempo de vida de una muestra de metal en lugar de hacer otro espectro con ^{60}C , ya que el espectro generado por el metal solo contiene una exponencial de decaimiento con un tiempo de vida muy pequeño, que se encuentra en el rango de 10 ps a 250 ps, y con esto realizar el proceso inverso de la convolución, la deconvolución para determinar el FWHM.

También hay una tercera forma, donde el valor de FWHM es ajustado con otros parámetros ajustables de la medida del espectro de tiempo de vida, pero en este caso, se toman en cuenta pequeñas derivas en la estabilidad del espectrómetro, que afectan su resolución temporal, para cada espectro medido. Este es el procedimiento preferido.

2.3. Análisis de datos PALS

El objetivo siempre es extraer los tiempos de vida y las intensidades relacionadas con el fenómeno físico del espectro medido. Para extraer esta información existen varios métodos, pero que caen en dos categorías: Deconvolución directa del espectro y ajuste de una función modelo a los datos experimentales.

La primera consiste en aplicar inversión de Laplace al espectro medido, o también emplean un filtro lineal y el principio de máxima entropía. El segundo implica ajustar una función modelo a los datos experimentales; en este caso se define el número de parámetros y la composición de la función de resolución $G(t)$, para luego realizar un ajuste por mínimos cuadrados. El número de componentes y parámetros depende de la naturaleza de la muestra, por ejemplo, un metal solamente podría contener una exponencial de decaimiento

y por ende solo un tiempo de vida. Generalmente se usa de 1 a 4 exponenciales de decaimiento, que dependen de cuan separadas están los tiempos de vida de cada exponencial y de la resolución del equipo experimental, además de la estadística de la medición. Además, la contribución de la fuente radiactiva puede tomar al menos 2 de esas 4 exponenciales de decaimiento.

2.3.1. Contribución de la fuente (SC)

Es importante tomar en cuenta estos valores ya que son inherentes a la muestra que se estudie; es ventajoso asumir los tiempos de vida que componen a la contribución de la fuente y en las mediciones poder extraerlas para fijarlas, esto se puede hacer al mismo tiempo que se extrae la resolución de la función de resolución como se mencionó antes.

Debido al backscattering de positrones de las muestras medidas a la fuente, la intensidad de la fuente dependerá del número atómico Z de la muestra. Esto se puede determinar experimentalmente para cada fuente radiactiva, obteniendo así la siguiente relación [29]:

$$I_{fuente}[\%] = 11.6 + 0.0994 Z \quad (64)$$

Para los tiempos de vida de la fuente, típicamente un tiempo de vida se encuentra entre el rango de 360 a 460 picosegundos y el segundo tiempo de vida depende del material que envuelve a la fuente o su soporte.

2.4. Aspectos experimentales PALS

En la técnica PALS, se utilizan diversos equipos para medir y detectar los fotones que resultan de la aniquilación del positrón con la materia. La espectroscopía es una herramienta fundamental en este contexto, permitiendo desarrollar y mejorar los experimentos con positrones. Para llevar a cabo estas mediciones, es esencial el uso de un espectrómetro conformado por diversos equipos que se detallan a continuación.

2.4.1. Detectores

Los espectrómetros típicos emplean al menos dos detectores que se encargan de detectar los fotones emitidos, los cuales suelen venir en coincidencia. Estos detectores se colocan enfrentados, con la fuente radiactiva de positrones y la muestra a analizar situada entre ellos. Los detectores de centelleo acoplados a fotomultiplicadores son los más comunes en estos experimentos. Los centelladores pueden fabricarse a partir de una amplia variedad de materiales, incluyendo orgánicos (cristales, líquidos, plásticos), inorgánicos, vidrios y gases. Entre los centelladores inorgánicos más utilizados se encuentran el CsI(Tl) (yoduro de cesio dopado con talio), BGO (óxido de bismuto), BaF_2 (fluoruro de bario), $PbWO_4$ (tungstato de plomo), NaI(Tl) (yoduro de sodio dopado con talio), LYSO (orto silicato de lutecio dopado con cerio) y LSO (ortosilicato de lutecio)[30].

Los detectores de centelleo son fundamentales en una amplia variedad de aplicaciones que van desde la radiografía convencional hasta tecnologías más avanzadas, como receptores radiográficos digitales, fluoroscopia, cámaras de centelleo, escáneres de tomografía computarizada (CT) y escáneres de tomografía por emisión de positrones (PET). Estos dispositivos están compuestos por un centellador y un dispositivo de conversión, como un fotomultiplicador, que transforma la luz emitida en una señal eléctrica. Se caracterizan por su alta eficiencia de conversión, tiempos de decaimiento rápidos de los estados excitados, y su transparencia a la propia emisión lumínica, así como por su durabilidad, resistencia a la humedad y bajo costo de fabricación.

El funcionamiento de un detector de centelleo se basa en la excitación de átomos o moléculas en el medio centellador cuando una partícula o fotón incide sobre él. Esta interacción provoca que los átomos

excitados decaigan, emitiendo fotones que son detectados y convertidos en señales eléctricas. La cantidad de luz emitida es proporcional a la energía depositada durante la interacción, lo que también influye en el proceso de multiplicación de electrones en el fotomultiplicador. Si el proceso de excitación es corto, en comparación con el tiempo de decaimiento, la forma del pulso de luz está dado por la siguiente función:

$$I(t) = \frac{I(t)}{\tau_{centellador}} \exp \left(-\frac{t}{\tau_{centellador}} \right) \quad (65)$$

2.4.2. Detector LYSO

Los cristales de Lutecio dopado con cerio LYSO ganan gran aceptación en aplicaciones médicas y en física experimental gracias a su excelente resolución temporal, alta densidad y respuesta rápida. El orto silicato de lutecio dopado con cerio ($Ce_x(Lu,Y)_{(1-x)}SiO_5$) es un cristal centelleador que se obtiene al dopar óxido de lutecio ($Lu_2Y_2SiO_5$) con cantidades variables de ytrio (Y) y una pequeña cantidad de cerio (Ce^{3+}) como activador. Este último es crucial, ya que los iones Ce^{3+} introducen niveles energéticos que favorecen la emisión eficiente de fotones en el rango visible cuando el cristal es excitado por radiación ionizante. En la siguiente tabla se observa las propiedades más importantes.

Tabla 2. Propiedades de los detectores LYSO

LYSO ($Lu_{2(1-x)}Y_{2x}SiO_5$)	
Número atómico efectivo Z_{eff}	65
Densidad	$7.1 \left[\frac{g}{cm^3} \right]$
Rendimiento luminoso	$41000 \left[\frac{fotones}{MeV} \right]$
Longitud de onda de emisión	420 [nm]
Tiempo de decaimiento	40 [ns]
Resistencia térmica	175 [$^{\circ}C$]
Índice de refracción	1.81
Radioactividad natural	$\sim 260 \left[\frac{Bq}{g} \right]$

El mecanismo de centelleo en LYSO dopado con cerio sigue un proceso típico de centelladores inorgánicos activados por tierras raras. Cuando una partícula ionizante o un fotón de alta energía interactúa con el cristal, los electrones en las capas más externas de los átomos de LYSO son excitados a niveles de energía superiores. Los iones Ce^{3+} proporcionan niveles intermedios que atrapan los electrones excitados y los liberan rápidamente mediante una transición radiativa que resulta en la emisión de fotones visibles. La intensidad de la luz generada es proporcional a la energía depositada en el cristal, lo que permite la cuantificación de la energía de la partícula o fotón incidente. Este rápido proceso de emisión, caracterizado por un tiempo de decaimiento de aproximadamente 40 nanosegundos, es fundamental para lograr una alta resolución temporal, permitiendo distinguir eventos que ocurren en rápida sucesión.

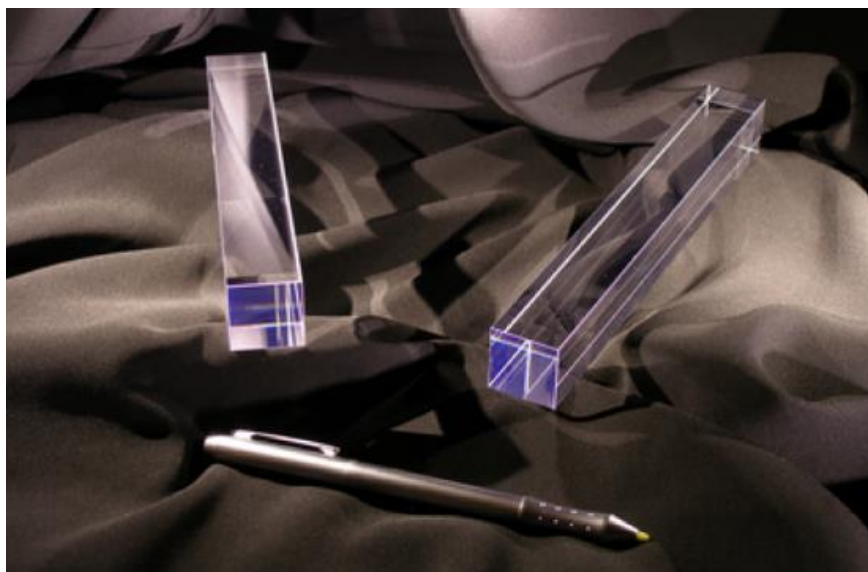


Ilustración 9. Detectores LYSO. Imagen obtenida de <https://www.luxiumsolutions.com/radiation-detection-scintillators/crystal-scintillators/lyso-scintillation-crystals>

2.4.3. LYSO vs otros centelladores

Comparado con otros centelladores inorgánicos como NaI(Tl) o BGO, el LYSO presenta una serie de ventajas que se muestran a continuación:

	Density (g/cm ³)	Z _{eff}	Wavelength at max.(nm)	Refractive index	Decay time (ns)	Light yield (ph/MeV)
NaI(Tl)	3.67	51	415	1.85	230	38000
CsI(Tl)	4.51	54	540	1.80	680, 3340	40000, 25000
Bi ₄ Ge ₃ O ₁₂ BGO	7.13	75	480	2.15	300	8200
BaF ₂	4.89	53	220, 310	1.56	0.6, 630	1500, 9500
CeF ₃	6.16	53	310, 340	1.68	5,27	4400
YAlO ₃ (Ce)	5.37	34	370	1.95	27	18000
Lu ₂ SiO ₅ (Ce) LSO	7.4	66	420	1.82	47	25000
LaBr ₃ (Ce)	3.79	47	350	1.9	25	63000
Plastic BC-400 *	1.03	4	420	1.58	2.4	10000
Gd ₂ (SiO ₄)O:Ce GSO	6.71	59	440	1.85	60	7500
Lu _{1.8} Y _{0.2} (SiO ₄)O:Ce LYSO	7.1	65	420	1.81	40	41000

Ilustración 10. Valores de detectores centelladores.

LYSO a diferencia del NaI(Tl) tiene un tiempo de decaimiento más bajo y a su vez un rendimiento luminoso mayor, siendo una ventaja considerable en el estudio PALS. Aunque el precio a pagar es el costo elevado de estos detectores.

2.4.4. Fotomultiplicadores

El uso generalizado de la contabilidad de centelleo en la detección de radiación y espectroscopia no sería factible sin dispositivos que conviertan la luz débil emitida por un pulso de centelleo en señales eléctricas

correspondientes. Los tubos fotomultiplicadores (PM) realizan esta función de manera excepcional, transformando señales de luz que suelen consistir en solo unos pocos cientos de fotones en pulsos de corriente útiles, minimizando al mismo tiempo el ruido aleatorio en la señal. Los fotomultiplicadores de silicio (SiPM) son una mejor alternativa a los PMT ya que no son sensibles a campos magnéticos que pueden alterar las medidas. Estos últimos son los más usados actualmente en la construcción de escáneres PET/MR.

2.4.5. PMT

Durante las primeras décadas del presente siglo y últimas del siglo pasado, los tubos fotomultiplicadores (PMT) han sido la opción preferida como fotodetectores, esto debido a su capacidad para fabricar fotocátodos de gran tamaño con una QE aceptable, entre 20% y 30%. Además, su capacidad de amplificar los fotoelectrones individuales permite utilizar electrónica comercial más asequible. Los PMT también tienen buenas propiedades, permitiendo definir ventanas de coincidencia de aproximadamente 2 nanosegundos, lo que disminuye las coincidencias aleatorias. Gracias a su costo moderado, estos dispositivos han facilitado avances importantes en los escáneres PET, mejorando la cobertura geométrica y, en consecuencia, la sensibilidad. También, la adición de más anillos en los escáneres ha permitido aumentar el campo axial, mientras que el uso de cristales más pequeños y la introducción de más canales por anillo han contribuido a mejorar la resolución espacial.[30]

Los PMT son dispositivos que amplifican la luz generada por los cristales de centelleo, pero su tamaño y el costo del acoplamiento uno a uno con estos cristales presenta desafíos en aplicaciones que requieren alta resolución espacial. Con el tiempo se propuso una solución al utilizar un número reducido de PMT en combinación con una matriz de cristales de BGO lo permitió obtener una mayor área de cobertura y sensibilidad sin la necesidad de un acoplamiento caro y complejo. Otra alternativa radica en los diodos PIN de silicio, ya que ofrecían un tamaño más compacto y un menor consumo energético, pero su falta de amplificación hacía que no fueran efectivos para detectar la luz generada por los centelladores. Es aquí donde entran en juego los fotodiodos de avalancha (APD). Estos dispositivos surgieron como una alternativa avanzada que podía manejar mejor la luz de baja intensidad y se acoplaban eficientemente con los cristales de centelleo. Además, eran menos sensibles a campos magnéticos, lo que es esencial para procedimientos que combinan PET y MRI.

Las desventajas de los APD radican en su costo, ya que el método de acoplamiento uno a uno entre el centellador y el fotodetector es desorbitante. También la amplificación que ofrecen los APD es modesta, típicamente entre 50 y 200 veces, lo que no es suficiente para competir contra los otros detectores que son más eficientes. Y por último, las capacidades de temporización de los APD están en el rango de nanosegundos, lo que no se compara favorablemente con los tubos PMT más rápidos ni con los fotomultiplicadores de silicio SiPM, que son una clase emergente de fotodetectores rápidos y eficientes.

2.4.6. SiPM

El SiPM (silicon photomultiplier) se compone de múltiples diodos de avalancha de fotón único (SPAD), que son dispositivos semiconductores que detectan luz. Cada SPAD funciona en una configuración específica que permite la detección de los fotones.

En el modo fotodiodo, los SPAD funcionan aplicando un voltaje inverso pequeño, en este caso, se generan pares de electrones y huecos, pero sin amplificación, lo que limita su uso en la detección de luz tenue. Cuando se aumenta el voltaje, se entra en el modo de avalancha fotónica (APD), donde se logra una amplificación significativa debido a la ionización por impacto, lo que permite la creación de pares adicionales de electrones y huecos. Pero si el voltaje se incrementa aún más, se activa el modo Geiger, donde la avalancha de carga eléctrica es mantenida por electrones y huecos en ambas direcciones. Esto exige un circuito de extinción externo para controlar la avalancha y evitar saturaciones.

Los SPAD son altamente sensibles a fotones individuales, ofreciendo una excelente relación señal-ruido, pero no pueden diferenciar entre uno o varios fotones detectados. Para contar fotones, se conectan múltiples SPAD en paralelo, creando un SiPM analógico con una alta capacidad de separación y conteo de fotones. La alta ganancia del SiPM le permite detectar una gran cantidad de fotones, pero la incapacidad para distinguir la cantidad exacta de fotones es una limitación, pero el factor de ruido en exceso es mucho más bajo en el modo Geiger, lo que mejora la calidad de la señal.

Los SiPM tienen varias ventajas, como alta ganancia y capacidad para contar fotones, pero también tienen limitaciones como ser el rango dinámico restringido, que se ve afectado por el número de SPAD integrados. Esto puede llevar a efectos de saturación cuando el flujo de luz excede lo que los SPAD pueden manejar, lo que afecta la resolución energética.

Otra desventaja tiene que ver con la tasa de conteo en la oscuridad que es más altas que de un PMT, lo que significa que pueden detectar más señales falsas generadas térmicamente. Esto requiere un diseño electrónico cuidadoso para minimizar el tiempo muerto.

Una fuente de ruido única en los SiPM es el "cross talk", donde la avalancha de electrones y huecos puede provocar la generación de fotones secundarios que activan avalanchas en SPADs cercanos.

La PDE (photon detection efficiency) es un indicador clave de la efectividad de un SiPM para detectar fotones[30]. Depende de varios factores, incluyendo la eficiencia cuántica, la probabilidad de activación de avalancha y el factor de llenado geométrico. La PDE es crucial para asegurar un rendimiento óptimo en la detección de la luz y su expresión es:

$$PDE = QE * PT * FF_{eff} \quad (66)$$

Donde QE se expresa como:

$$QE = \frac{\text{número de fotoelectrones emitidos}}{\text{número de fotones incidentes}} \quad (67)$$

Otro parámetro importante es el SPTR (single photon time resolution), este es un parámetro esencial para aplicaciones que requieren mediciones temporales precisas. La electrónica de lectura debe ser eficaz para medir tiempos de llegada de fotones en el rango de picosegundos, importante en un estudio PALS.

2.5. Aplicaciones de PALS

2.5.1. Positron emission tomography (PET)

El principio del funcionamiento de la tomografía por emisión de positrones es la aniquilación de estas antipartículas con electrones del medio mediante la emisión de 2 fotones gamma de 511 keV. En un PET convencional se usa la electrónica de coincidencias para determinar la línea sobre la que se produjo la aniquilación, es decir, se traza una línea entre ambos detectores.

Una mejora considerable en los PET se realiza tomando en cuenta el tiempo de vuelo TOF (time of flight), ya que con esto se determina el punto donde se produce la aniquilación a lo largo de la línea. Inicialmente se usaban centelladores como el BaF_2 , pero la resolución espacial no era muy buena para tal estudio, es por esto que se empezaron a usar los centelladores BGO, siendo una mejora. En las últimas décadas se reemplazaron estos detectores con los LSO [31], teniendo estos detectores una buena resolución temporal y excelentes especificaciones para el stopping power y resolución de energía. Los detectores LYSO también fueron introducidos para su estudio, y debido al gran avance computacional de las últimas décadas se puede solventar el problema que se tenía con los centelladores BaF_2 en PET. Todo esto junto con el TOF-PET se logra tener

imágenes con un tiempo de adquisición reducido y buena calidad de imagen. Adicional a esto, se está empezando a incorporar la nueva generación de detectores SiPM, que promete dejar a los sistemas TOF-PET con una resolución temporal por debajo de los 400 picosegundos [32]

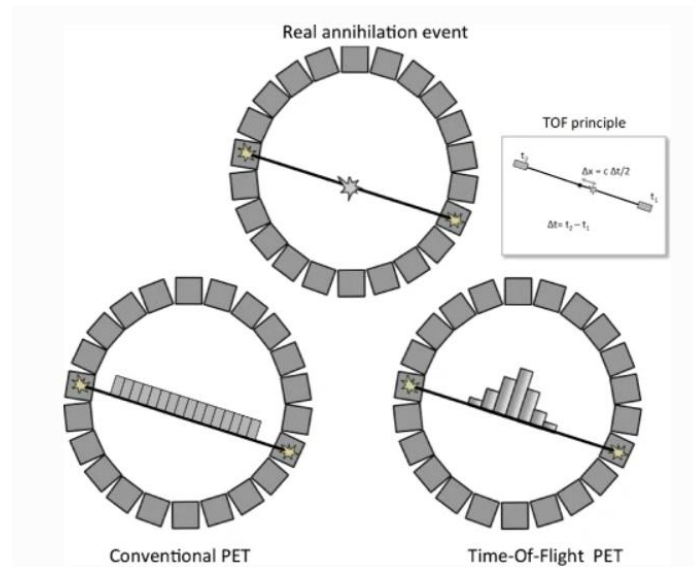


Ilustración 11. Tomografía por emisión de positrones PET comparado con el tiempo de vuelo PET [33]

Parte II

Materiales y métodos

Capítulo 3

3. Materiales y métodos en PALS

3.1. Setup experimental

El setup experimental consiste en varias partes, empezando por los detectores LYSO conectados a dos SiPMs, estos a su vez conectados a preamplificadores cuya alimentación es proporcionada por una fuente de voltaje; estos preamplificadores son conectados mediante cables coaxiales a un osciloscopio digital y este es conectado a una laptop para visualizar los datos y proceder con el análisis. En la siguiente figura se muestra un esquema del armado de experimento:

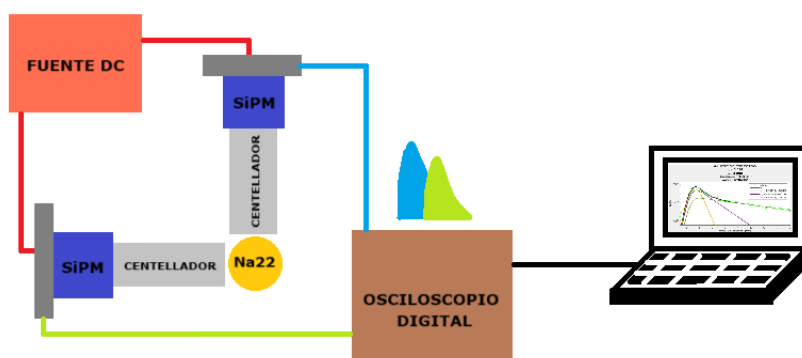


Ilustración 12. Configuración del setup usada en el estudio PALS

3.1.1. LYSO-SiPM

Los detectores usados en el estudio PALS fueron un par de detectores cristales LYSO acoplados a dos SiPM con grasa óptica en medio del detector y SiPM; estos fueron envueltos con teflón y situados dentro de una pequeña cavidad oscura para prevenir que luz exterior interfiera con el SiPM.

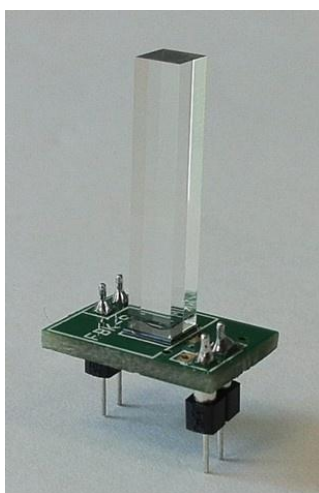


Ilustración 13. Sistema LYSO-SiPM desnudo sin teflón. Imagen sacada de [34]

El tamaño de cada cristal LYSO es de $1,5 \times 1,5 \times 12 \text{ mm}^3$, estos fueron envueltos con teflón y mediante la grasa óptica EJ 550 acoplados a cada SiPM.

Los SiPM estaban conectados a un preamplificador AdvanSiD de dos canales, uno para energía y otro para tiempo.



Ilustración 14. Preamplificador AdvanSiD conectado con el SiPM

En el siguiente esquema se observa el preamplificador AdvanSiD, que es una placa de evaluación para los SiPMs RGB y NUV de la marca AdvanSiD, en nuestro experimento se usó SiPM NUV. La placa se basa en una etapa de amplificación de transimpedancia no inversora de baja ganancia, seguida de dos etapas de salida independientes, siendo estas OUT 1 y OUT 2. OUT 2 no preserva ni la forma ni la carga de la señal original del SiPM, pero permite la supresión efectiva de las fluctuaciones de la línea de base debidas a conteos oscuros (falsos positivos), que es importante para las medidas de tiempo. En el siguiente esquema se muestra el preamplificador:

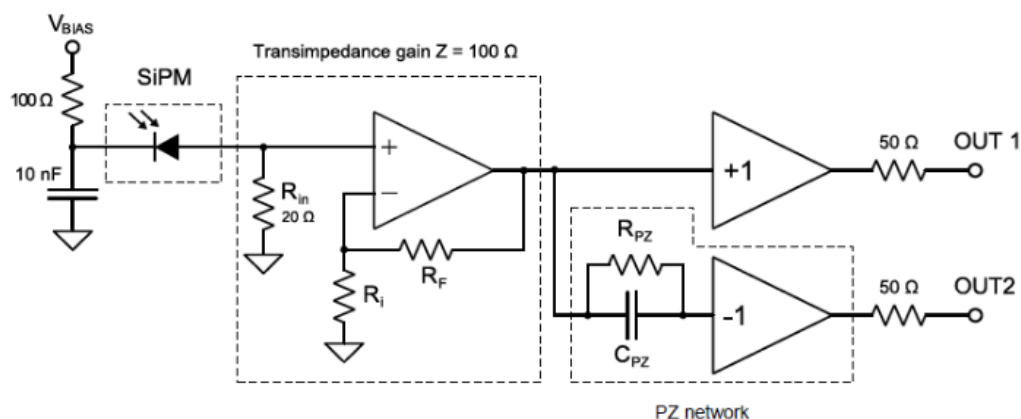


Ilustración 15. Esquema del preamplificador AdvanSiD

La fuente usada en el experimento contenía 3 canales, dos de los cuales se podía regular. El primer canal fue puesto a un voltaje que variaba desde 30 V hasta 32 V, y el segundo canal fue puesto a 5 V. Estos se conectaron mediante cables extensos al preamplificador:

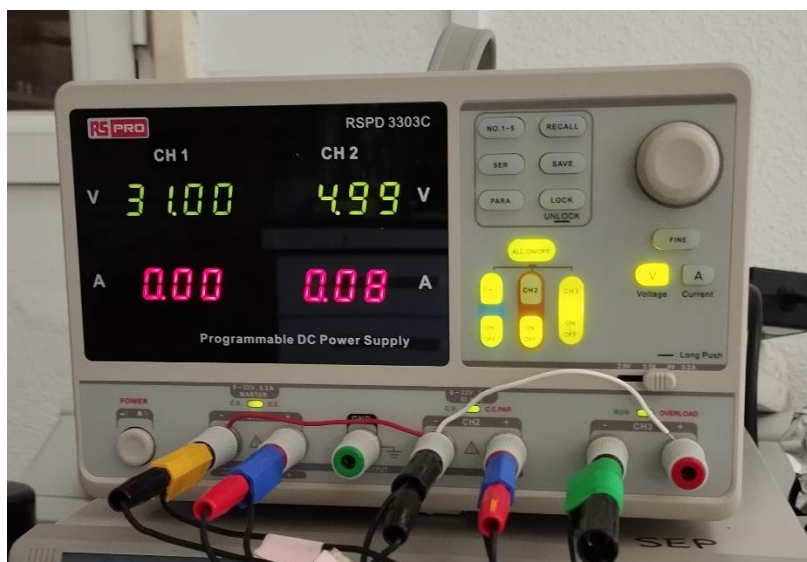


Ilustración 16. Fuente de alimentación de 3 canales, el primer canal a 31 V, el segundo canal a 5 V y el tercer canal es ground

Para la adquisición de los datos se usaron dos osciloscopios digitales de diferente número de canales, esto debido a que se necesitó una mejora para obtener espectros con menos ruido y más eficientes. El osciloscopio fue conectado a cada detector con cables coaxiales. El primer osciloscopio usado fue un PicoScope 2200AB Series, de dos canales, cuya tasa de muestreo es de 100 MS/s, un ancho de banda de 10 MHz y una memoria buffer de 8 kS, con un generador de función integrada y generador de formas de onda arbitrarias (AWG). El segundo osciloscopio usado fue un PicoScope 6000 series, de 4 canales, cuya tasa de muestreo es de 2GS/s, un ancho de banda de 1 GHz y una memoria de 1GS. El rango de voltaje de ambos puede variar desde 50 mV hasta 20 V.



Ilustración 17. Osciloscopios usados en el estudio PALS. Osciloscopio izquierdo PicoScope series 2000, osciloscopio derecho PicoScope series 6000

Todo el sistema LYSO-SiPM + fuente + muestra + bloques de plomo, se pusieron dentro de una caja cubierta de aluminio para evitar el ruido ambiental. La fuente de alimentación se encontraba un poco alejada de la caja para evitar ruido provocado por la fuente de alimentación.

3.2. Configuración de la fuente con los detectores

3.2.1. Posición de los detectores

La posición de los detectores es importante a la hora de hacer experimentos PALS, ya que según la forma espacial se puede obtener mejores resultados y reducir la detección de falsas coincidencias ocasionadas por el Compton scattering. Lo que uno espera en PALS es recolectar fotones solo de las energías de 511 keV y 1275 keV; no se desea medir scattering. Es por esto por lo que la configuración de 180° con la fuente puesta sobre el eje es la menos adecuada. La fuente debe colocarse fuera del eje de unión de los detectores.

Una forma de mejorar el espectro y reducir las falsas coincidencias es colocar ambos detectores en una posición de 90° entre sus ejes, en la siguiente figura se muestra esta configuración de 90° con los tipos de detecciones que uno encuentra.

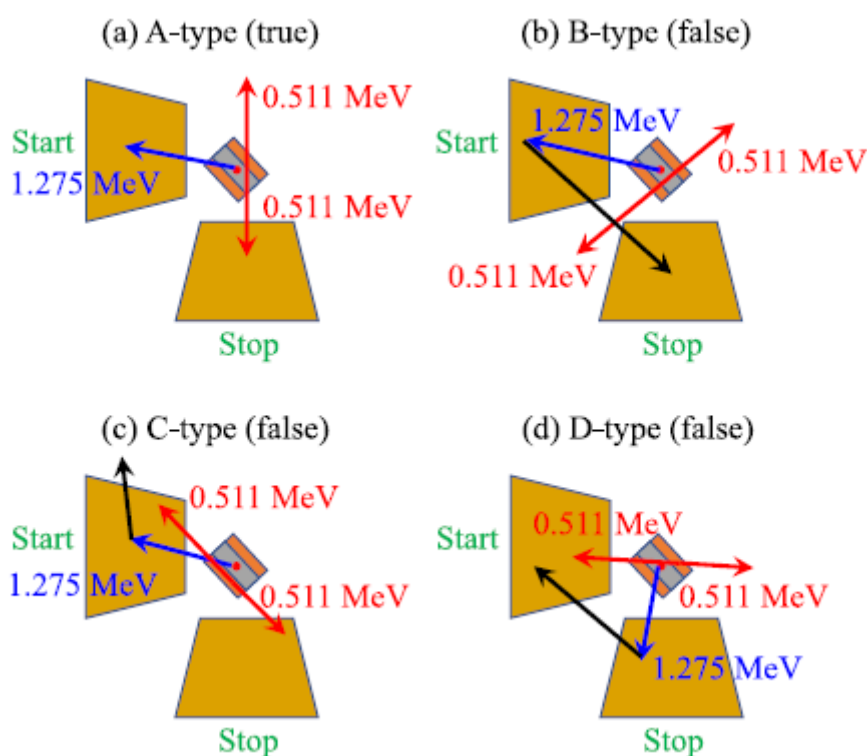


Ilustración 18. Medidas típicas en PALS en una configuración de 90 grados. a) evento correcto, b), c) y d) eventos falsos Esta imagen fue obtenida de [35]

La imagen a) representa la detección correcta y deseada, las 3 siguientes representan las falsas coincidencias ocasionadas por el scattering Compton, y las flechas negras se corresponden a los fotones que sufrieron Compton scattering.

La configuración espacial del sistema formado por la fuente radiactiva + muestras + detectores es ligeramente diferente a la presentada en PALS, con la posición del sándwich perpendicular al plano de los detectores, como se muestra en el siguiente esquema:

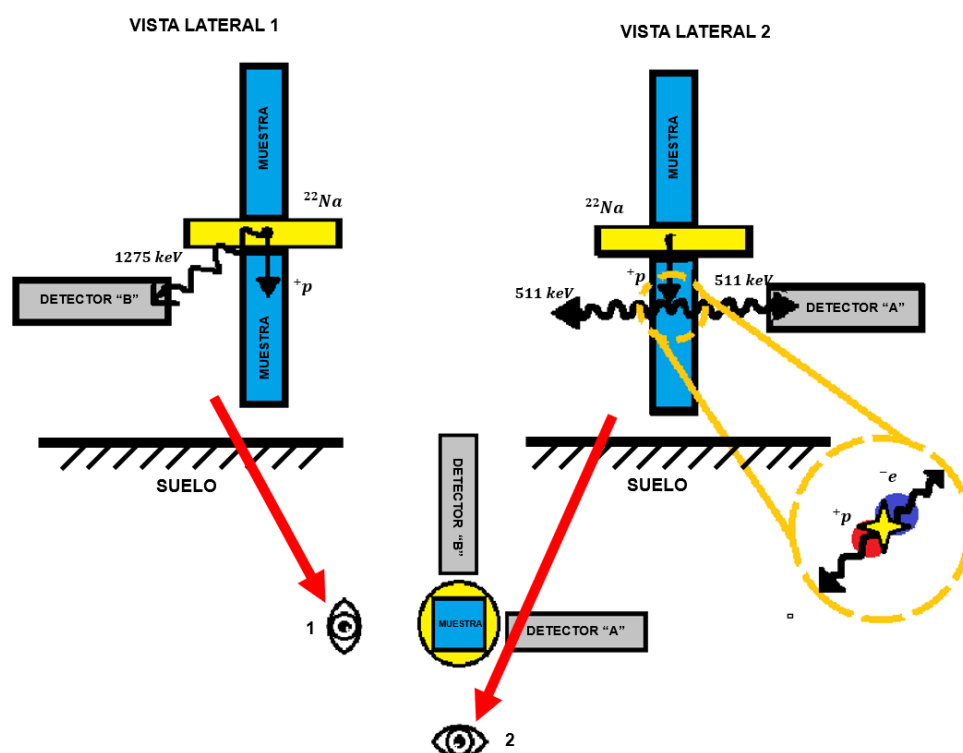


Ilustración 19. Esquema de sistema Fuente-Muestras-detector viste de 3 puntos distintos. Imagen izquierda viste desde la parte lateral, imagen derecha desde la parte lateral, imagen debajo vista desde arriba.

La fuente representada por amarillo está en medio de las muestras, esta fuente es colocada unos centímetros por encima del eje de los cristales LYSO. La vista lateral 1 y 2 son las que uno vería si estuviera sobre la mesa o suelo viendo un detector, pero no el otro ya que estaría detrás del sándwich muestra-fuente-muestra. El detector A solo contempla

La configuración usada para el experimento PALS fue la configuración de 90°. Pero la configuración usada para las medidas CRT fue la configuración de 180°.

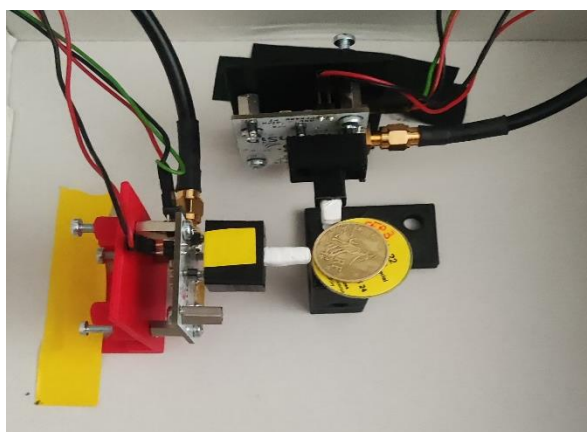


Ilustración 20. Configuración 90 grados de los detectores para obtención de espectros PALS

3.2.2. Sandwich radiactiva

Para el estudio PALS de cualquier muestra, se necesita colocarla junto con la fuente radiactiva tal que capture la mayor cantidad de positrones que emite la fuente, por lo que la configuración usual para la fuente y la muestra es la del “sandwich”. Se coloca una muestra encima de la fuente y otra muestra del mismo tipo por debajo de la fuente, haciendo un sándwich muestra-fuente-muestra de la siguiente manera:

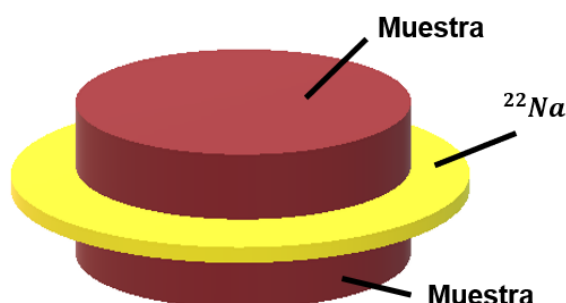


Ilustración 21. Configuración Sandwich típico en los estudios PALS

3.3. Muestras estudiadas

Los materiales estudiados mediante PALS con detectores LYSO-SiPM se dividen en dos grupos. Un grupo se corresponde al estudio usando el osciloscopio PicoScope series 2000 y el segundo grupo se corresponde al estudio usando el osciloscopio PicoScope series 6000.

En la tabla siguiente se muestran los materiales estudiados:

Tabla 3. Lista de materiales estudiados con cada osciloscopio

	PicoScope series 2000	PicoScope series 6000
Materiales	Cobre Agua Teflón	Monedas (cobre) Agua Teflón
Material fuente	Plástico	Plástico

3.3.1. Vidas medias en la literatura

En la literatura se tiene los valores de vida media para diversos materiales, en la siguiente tabla se observa estos valores que servirán como referencia:

Tabla 4. Valores de vida media e intensidad según la literatura recabada para 4 materiales

Materiales	τ_1 [ns]	τ_2 [ns]	τ_3 [ns]	I_1 [%]	I_2 [%]	I_3 [%]
Agua [36]	0.22 (p-Ps)	0.46 (free annihilation)	1.86 (o-Ps)	25	48	27
Cobre [37]	0.12 (bulk)	0.18 (defecto)	-	100	-	-

Moneda 20 cent[38]	0.12 (cobre)	0.165 (aluminio)[37]	-	95	5-	-
Teflón [39]	0.23 (p-Ps)	0.39 (free annihilation)	4.33 (o-Ps)	21	47	14
Plástico EPOXY [40]	0.22 (p-Ps)	0.48 (free annihilation)	2.28 (o-Ps)	45	32	23

3.4. Respuesta de tiempo

Un espectro PALS no es más que una distribución de diferencias de tiempo, esta diferencia de tiempo es la que se mide entre la llegada de un fotón gamma de 1275 keV y otro de 511 keV. Como ya se mencionó en la sección de espectroscopía, este espectro obedece a la convolución de una función sumatoria de exponenciales de decaimiento y la función de resolución de tiempo o gaussiana, donde el parámetro más importante en esta función resolución de tiempo es el FWHM, que es conocido como la resolución del espectrómetro.

Como se mencionó anteriormente, existen diversas formas de encontrar la resolución, y pueden resumirse en las siguientes:

- Obteniendo un espectro similar al espectro similar al formado por el ^{22}Na , es decir, un espectro formado por la diferencia de tiempo entre dos fotones simultáneos con energías similares a 511 keV y 1275 keV. El ^{60}Co cumple esta función ya que emite fotones de energías 1.17 y 1.33 MeV con 1 picosegundo de diferencia. El espectro será un prompt peak a tiempo cero del espectrómetro; las ventanas de energía son puestas como si se estuviera midiendo el ^{22}Na para reflejar las condiciones experimentales reales.
- Realizando mediciones CRT. Se pone en modo coincidencias para que se registren los dos fotones de aniquilación de 511 keV. Esto también da lugar a un prompt peak, sin embargo, la ventana de energía es diferente a la usada para los espectros PALS, en particular, es diferente en tamaño, por lo que no es una representación real del experimento. Además, la configuración del setup es diferente ya que se colocan los detectores en una posición enfrentada con la fuente sobre el eje que los une, pero en el estudio PALS la fuente debe estar fuera del eje y los detectores es preferible que no estén enfrentados. Esto nos puede dar una idea de la resolución, mas no ser un valor real.
- Dejando a la resolución como un parámetro libre en el análisis de un espectro con solo una componente de tiempo de vida. Es común usar un metal en este caso ya que uno está seguro que solo contiene una componente de tiempo de vida. Si se encuentran más componentes estas se consideran provenientes de la fuente.

3.5. Coincidence resolving time (CRT)

Las medidas de tiempo de resolución de coincidencias son realizadas para obtener la precisión temporal con la que se pueden detectar dos eventos que ocurren simultáneamente, como ser la emisión de dos fotones gamma opuestos tras la aniquilación de un positrón con un electrón [41].

Se dispuso la configuración del setup para coincidencias, donde los detectores estaban enfrentados y la fuente de ^{22}Na en medio para que los fotones que viajan en direcciones opuestas sean recibidos por ambos

detectores LYSO. El CRT depende del voltaje bias del SiPM y del threshold escogido, por lo que una elección buena de estos puede mejorar la resolución temporal y por ende mejorar la calidad de los espectros PALS, ya que con esto uno es capaz de encontrar valores pequeños de tiempo de vida como ser de los metales.

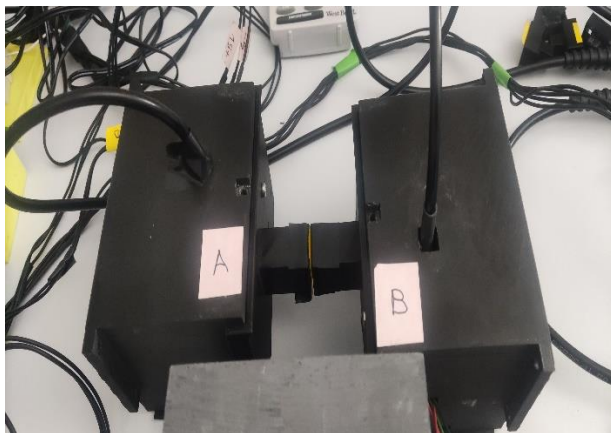


Ilustración 22. Configuración 180 grados de los detectores para mediciones CRT

El incrementar el voltaje bias ocasiona que el SiPM sea más sensible, lo que permite que se detecte señales más débiles, pero esto tiene un límite ya que puede ocasionar que el ruido tome el protagonismo. Algo similar ocurre con el threshold, que es el umbral que una señal debe superar para que este sea reconocido; un valor pequeño de threshold puede ser útil, pero tiene un cierto límite ya que el ruido podría manifestarse. Una buena combinación y equilibrio de ambos es necesario para reducir lo máximo posible el CRT.

Se tomaron medidas en modo coincidencias donde se hizo variar los threshold desde 40 mV hasta 100 mV en intervalos de 10 mV, esto para un rango de valores de Rango de Voltaje igual a 0.5 V y 1 V, aunque también se evaluó para 2 V, pero se descartaron por contener mucho ruido. Estos valores de threshold y Voltage range se tomaron para 3 valores de BIAS que eran 30,2 V, 31 V y 32 V. La mejor combinación de estos 3 parámetros es el que reduce más el CRT que se mide en picosegundos. El osciloscopio usado en las medidas CRT fue el PicoScope series 2000.

3.6. Espectro de Energía

Los espectros de energía obtenidos mediante la medición del ^{22}Na mediante los detectores LYSO-SiPM son los descritos por la literatura[42]. Cada espectro se corresponde a cada detector. El espectro verde se corresponde al detector A y el espectro amarillo se corresponde al detector B. Ambos presentan los picos característicos de 511 keV y 1275 keV, además de los bordes Compton.

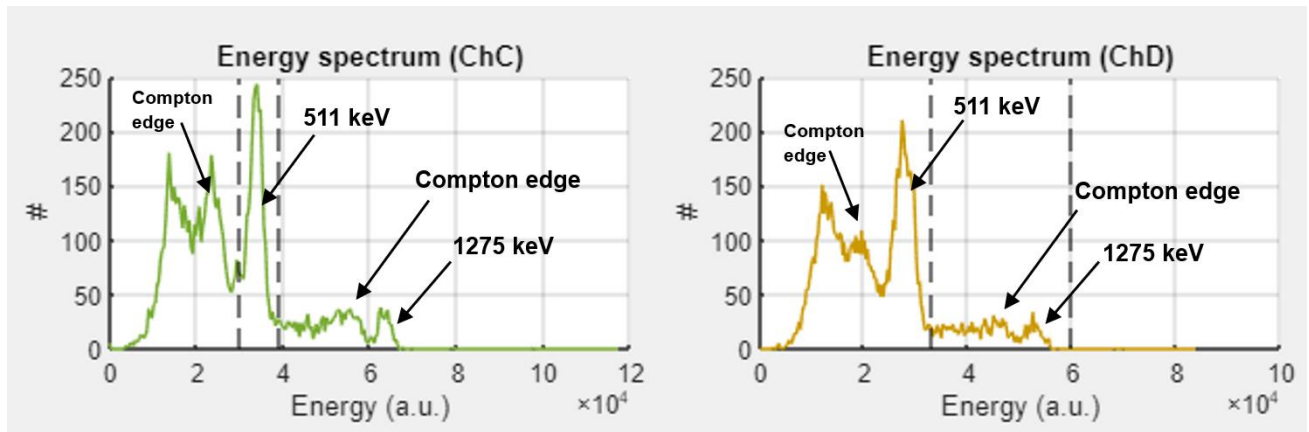


Ilustración 23. Espectros de energía obtenidos por cada detector

Para optimizar las medidas, se configuró los detectores con un threshold antes del procesamiento de la señal para que solo sean capaces de adquirir su pico correspondiente, es decir, que el detector A solo considere el pico de 511 keV y el detector B solo considere gammas de 1275 keV. Estos thresholds son de 500 mV y 700 mV.

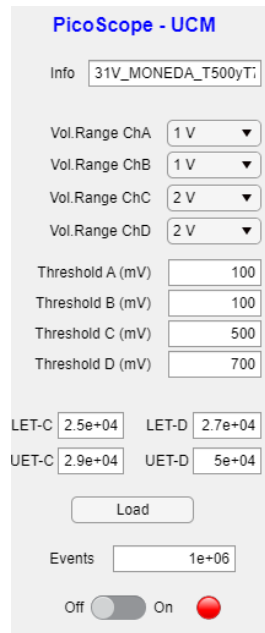


Ilustración 24. Interfaz PicoScope donde se puede cambiar los valores de rango de voltaje, threshold y ventanas de energía LET (low energy threshold) y UET (up energy threshold), donde C y D representan a los thresholds en energía de los detectores A y B. Events es el número de cuentas a medir. Threshold A y B representan los thresholds de tiempo.

Los espectros de energía optimizados son los siguientes, cuyo espectro verde es obtenido por detector A y el espectro amarillo es obtenido por el detector B, donde se mide en base a thresholds de 500 y 700 mV, por lo que cada detector A y B trabajan para medir los picos 511 keV y 1275 keV respectivamente.

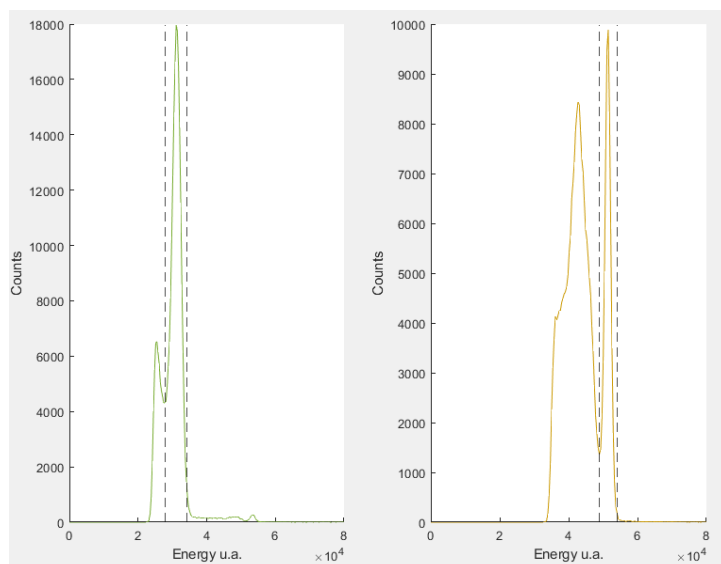


Ilustración 25. Espectros de energía correspondientes a los detectores A y B. Espectro verde solo toma al pico de 511 keV y el espectro amarillo solo considera al pico de 1275 keV

Las ventanas de energía son puestas sobre los picos correspondientes, ya que los detectores también reciben parte del borde Compton por lo que es necesario filtrar una segunda vez con las ventanas de energía.

3.7. READANDFIT2.mat

Los datos experimentales son almacenados en un archivo txt que posteriormente lo carga este script para formar el espectro de energía de cada detector y el espectro de diferencia de tiempos.

Capítulo 4

4. Evolución experimental

El setup experimental fue cambiando a lo largo del tiempo, esto debido a que se fue corrigiendo las medidas experimentales y todas las causas posibles ante resultados de espectros insatisfactorios, cambiando algunos aparatos experimentales y modificando los scripts en Matlab que se encargaban del procesamiento de los datos. En la siguiente figura se muestra el espectro de energía, y el espectro de diferencia de tiempo.

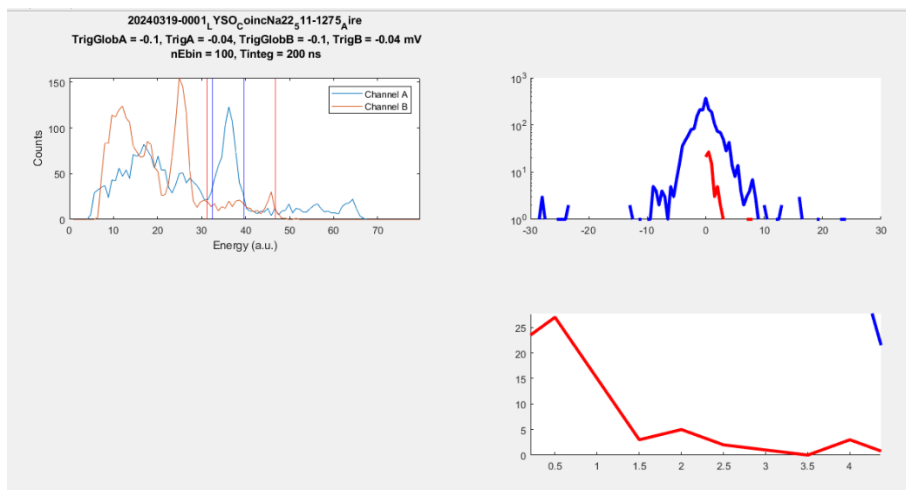


Ilustración 26. Espectros de energía y de diferencia de tiempos. Figuras proporcionadas por el script inicialmente

Esto iba de la mano con la configuración del setup que se muestra en la siguiente imagen:

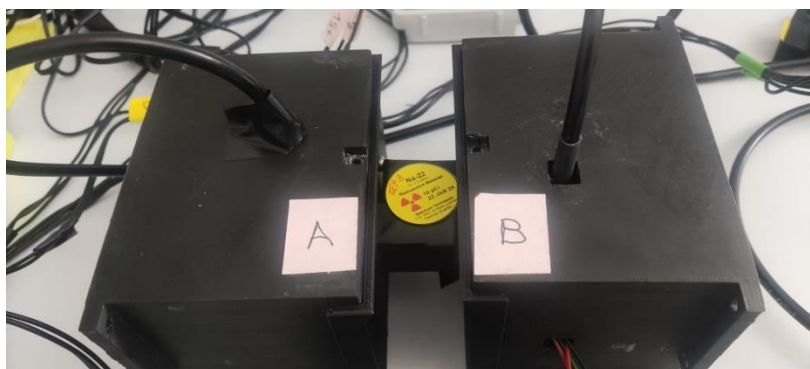


Ilustración 27. Primer setup experimental PALS usado

La estructura negra protege todo el equipamiento LYSO-SiPM del ruido, por lo que se creía que esta disposición era la correcta. Sin embargo, los espectros no fueron los deseados, visualmente no se parecían a los espectros presentados en la literatura. Además, el número de cuentas no era el deseado ya que se obtenían un numero de cuentas del orden de 10^4 sin filtrar, por lo que no era suficiente para tener un espectro del cual se pueda obtener correctamente los valores de vida media.

Los datos obtenidos experimentalmente eran guardados en un CSV que los leía el script “readpulse_TOF_SINGLES_SEP_gaussian” que evolucionó a otro llamado “runicoucm1”. En la siguiente figura se muestra un ejemplo de una prueba hecha con el material a estudiar plástico.

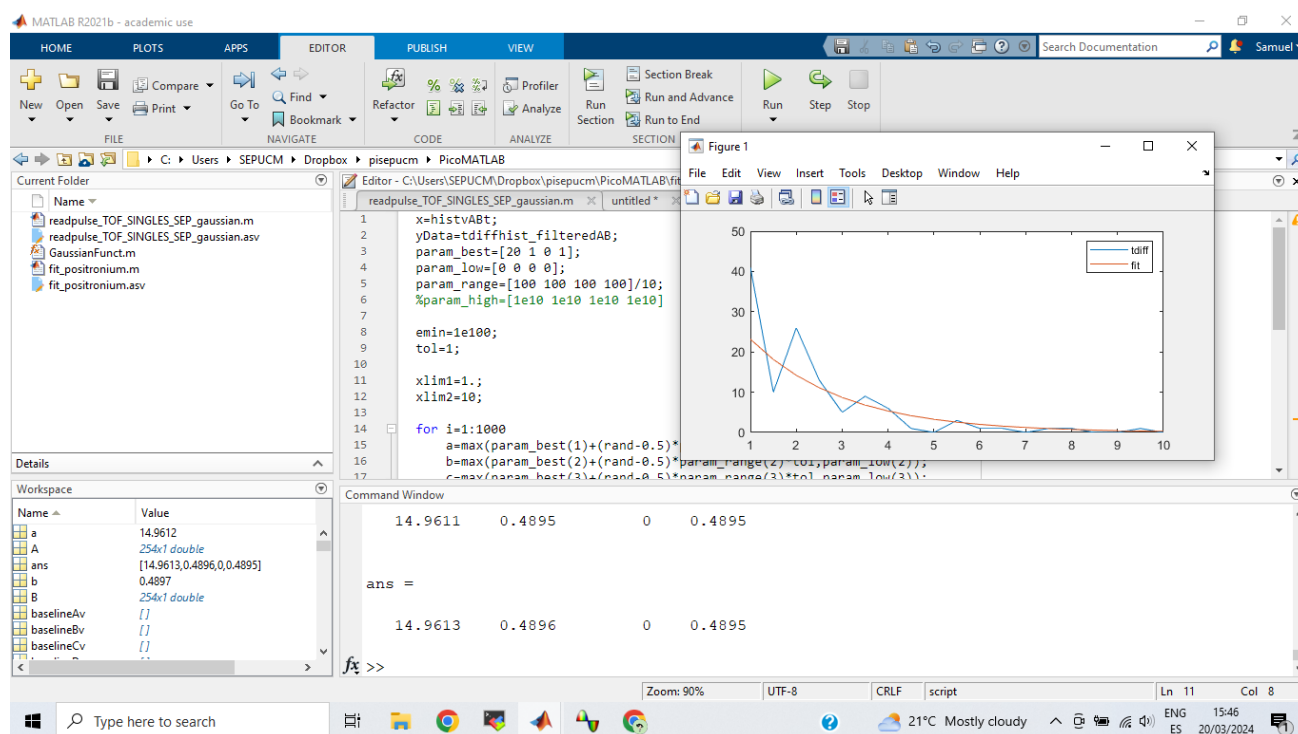


Ilustración 28. Proceso de ajuste de espectros obtenidos experimentalmente inicialmente

Se diseñó una mejor interfaz para poder acceder de manera más ordenada a los parámetros como ser las ventanas de energía, los voltajes de rango y el número de cuentas a tomar, esto se llamó PicoScope-UCM

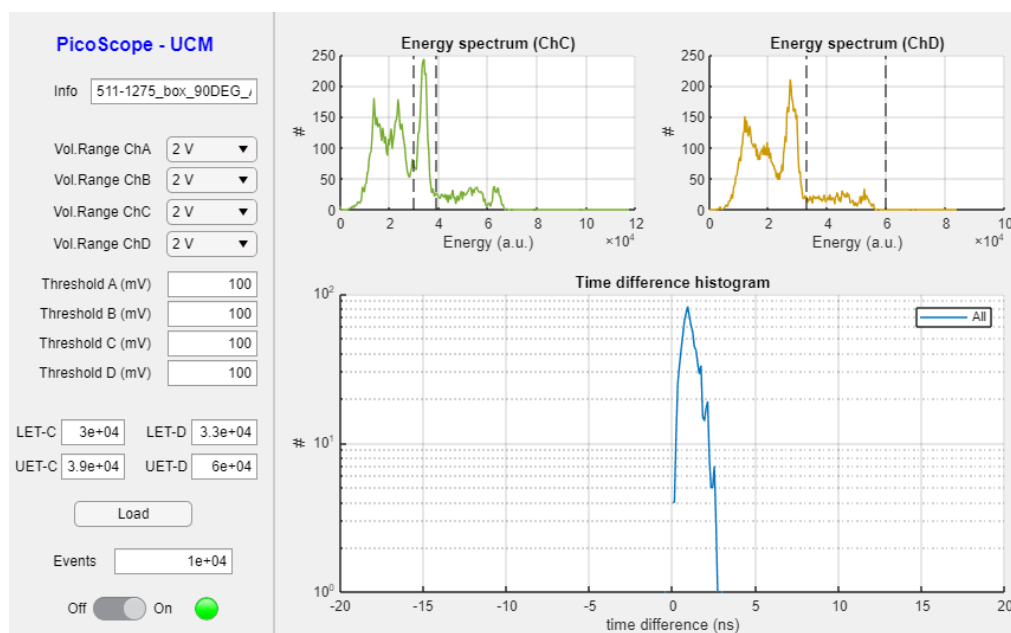


Ilustración 29. Interfaz PicoScope encargado de cargar los espectros de diferencia de tiempos y de energía. En la parte izquierda se observa parámetros que pueden modificarse como ser threshold y rango de voltaje

En PicoScope se ven los espectros de energía tomados por cada detector LYSO-SiPM. En ellos se puede apreciar cómo se tomaba las ventanas de energía, en el primer detector se tomaba el pico de 511 keV, pero en el segundo detector se tomaba el pico de 1275 keV más el Compton ya que con esto se creía que el número de cuentas que formarían el espectro de diferencia de tiempos aumentaría, esto eventualmente se cambió ya que al tomar el Compton se añade ruido de la dispersión del fotón de 1275 keV, produciendo un espectro de vida media inadecuado.

Para mejorar el número de cuentas se modificó el trigger en el código del osciloscopio, cambiando el modo “rising” por “inside”, provocando un mayor conteo y con esto teniendo un espectro de diferencia de tiempo acorde a la literatura:

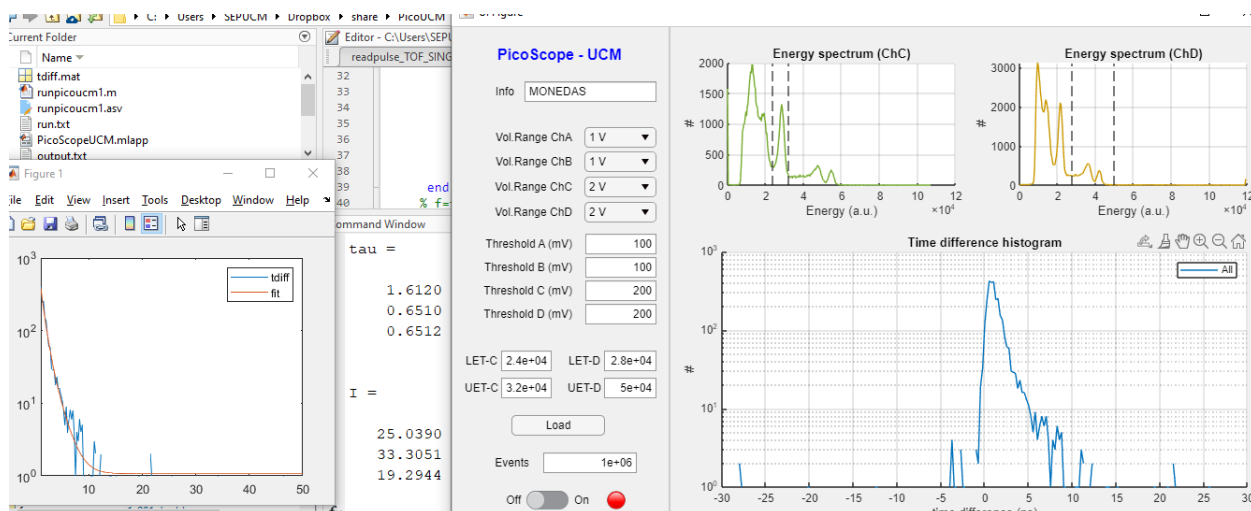


Ilustración 30. Espectro de diferencia de tiempos obtenida con la modificación del código del osciloscopio

Se puede apreciar el espectro de diferencias de tiempo con la pendiente que lo caracteriza, en la parte izquierda se encuentra el ajuste realizado con el script “fit_positronium_app”, que es el precursor del script usado finalmente para este trabajo.

Otro problema encontrado fue la estructura negra que recubría el sistema LYSO-SiPM, ya que no encajaban muy bien, además la separación entre la fuente y los detectores era grande, por lo que se decidió quitar las cubiertas negras y dejar a los detectores al descubierto dentro de una caja cubierta de aluminio:



Ilustración 31. Setup experimental dentro de una caja cuyo exterior es de aluminio

Se puede apreciar los detectores LYSO y los SiPM a simple vista, también se puede apreciar dos bloques de plomo que servían de protección ante la radiación. También se puede apreciar el cambio de la posición de los detectores, ya que estos ya no se encuentran enfrentados. Este cambio se debe a lo mencionado en la sección de Configuración de la fuente, una mejor configuración espacial para los detectores es la posición de 90°. Esto enfoca el estudio en la detección de los rayos gamma 511-1275 keV que es la necesaria para obtener el espectro de diferencia de tiempo PALS en lugar de la detección del par 511-511 keV.

Por otro lado, se puso la ventana de energía en los picos de 511 keV y 1275 keV sin incluir el Compton:

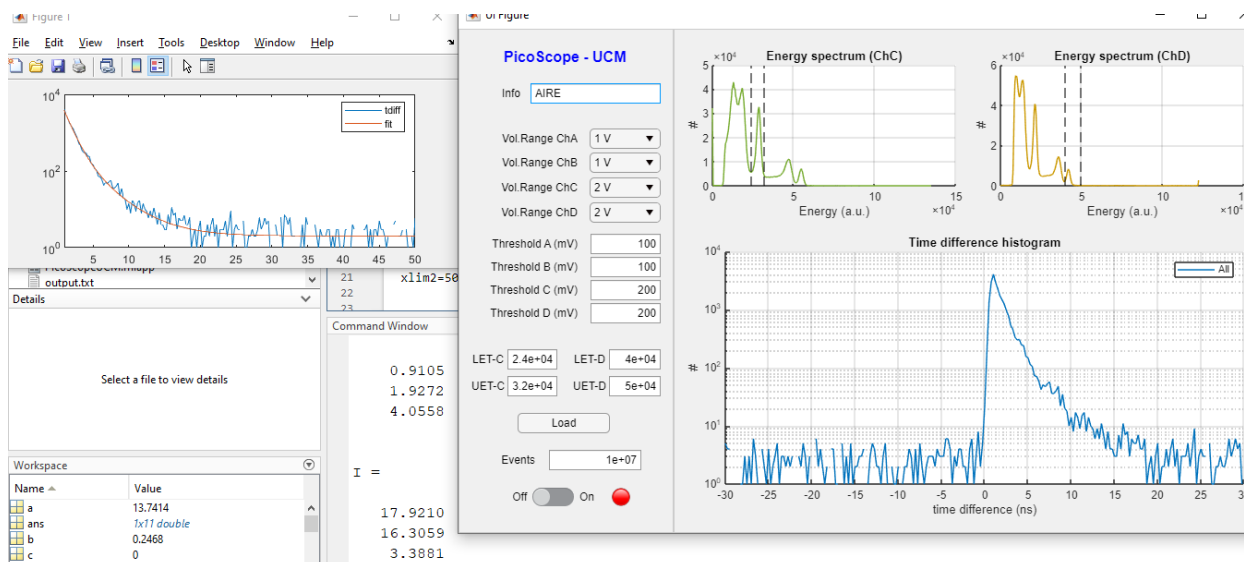


Ilustración 32. Interfaz Matlab PicoScope (ventana derecha), ajuste de espectro (ventana izquierda). En la ventana del interfaz PicoScope se observa los espectros de energía para el detector A (verde) y B (amarillo). El espectro de diferencia de tiempos (azul) es el resultado de medir “Aire” (sin muestra).

Todo esto contribuyó a una mejor obtención de espectros PALS, pero encontrando otro problema que no se lograba ver anteriormente, y es la presencia de picos en el espectro de diferencia de tiempo, con una diferencia entre pico y pico de aproximadamente 4 nanosegundos, lo que se le atribuyó en primer lugar a ruido proveniente de la fuente de alimentación.

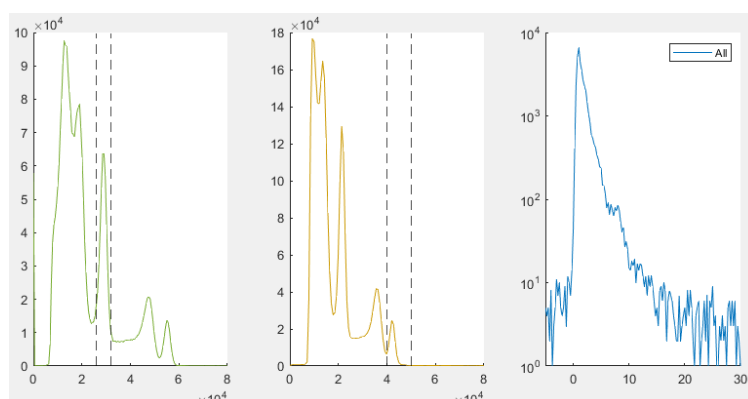


Ilustración 33. Espectro de diferencia de tiempo (azul) contiene picos regulares en muestra de “Aire”.

En el espectro de diferencia de tiempos de color azul podemos observar picos que se encuentran debajo de los 10 nanosegundos, esto se hizo más evidente al aumentar el voltaje de alimentación a 32 Voltios.

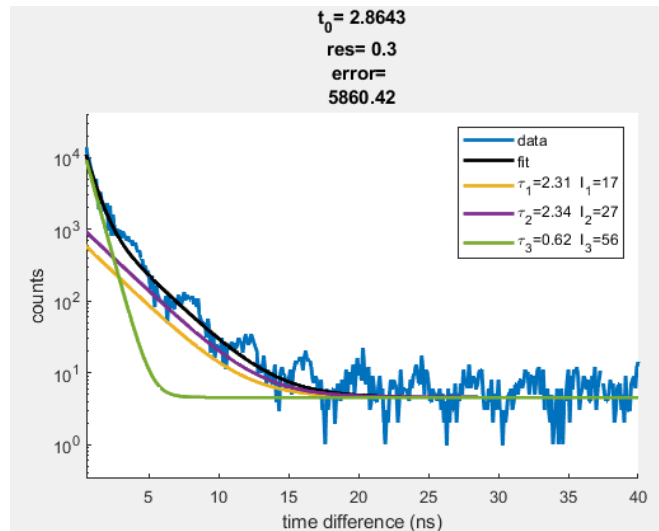


Ilustración 34. Ajuste de espectro de diferencia de tiempos con picos regulares.

En el espectro se observa la distancia entre crestas de aproximadamente 4 nanosegundos, dificultando la posibilidad de hacer un buen ajuste.

Las fuentes de alimentación, que eran 2 en primera instancia, se cambiaron a una sola que era más estable, ya que la fuente de alimentación blanca usada inicialmente tenía un problema de estabilidad, los valores de voltaje descendían mientras se realizaba las mediciones.



Ilustración 35. Fuentes de alimentación del sistema LYSO-SiPM, posible fuente del ruido.

Por este motivo se cambió a otra fuente de alimentación, y también se hicieron correcciones en el código ya que el rango de voltaje no obedecía a los cambios que se hacía.

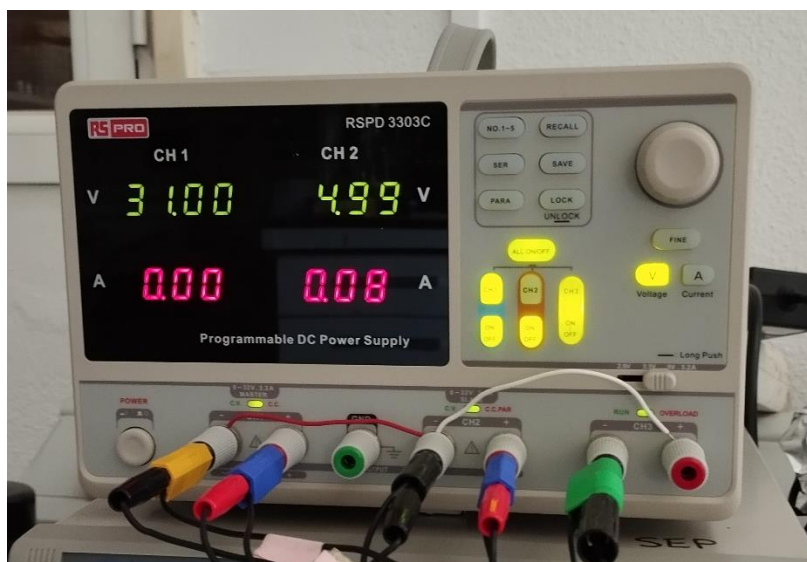


Ilustración 36. Nueva fuente de alimentación que reemplazó a las 2 fuentes anteriores.

Esto sirvió para realizar las medidas CRT con el fin de encontrar el menor FWHM ante el cambio de los voltajes de la fuente, del threshold y el rango de voltaje. Los resultados CRT se detallan en la sección de resultados.

No hubo mejoría en los espectros obtenidos, aún persistía la aparición de los picos en el espectro y el número de cuentas registradas se redujo considerablemente, por lo que el código fue el que entró en el punto de mira como posible problema y también la forma en la que se detectaban los fotones de 511 y 1275 keV. Primero con respecto al código, se cambió el timing hasta 400 nanosegundos; segundo con respecto a los detectores, se puso a un detector a medir solo fotones de 511 keV y al otro detector solo fotones de 1275 keV, restringiendo la medición de todo el espectro de energía a ambos detectores. En la siguiente figura se muestran los picos que mide cada detector:

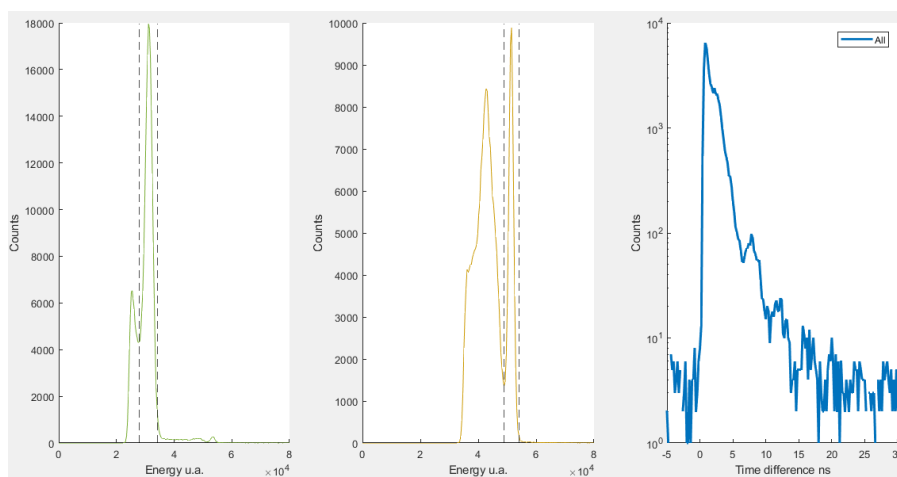


Ilustración 37. Espectros de energía y diferencia de tiempo nuevas. Espectro de energía obtenido por el detector A (verde) solo considera el pico de 511 keV. Espectro de energía obtenido por el detector B (amarillo) solo considera el pico de 1275 keV.

En el espectro verde podemos ver cómo se toma solo el pico de 511 keV, esto es tomado por el detector A. El segundo espectro de color amarillo solamente toma el pico de 1275 keV. El espectro azul es el espectro

de diferencia de tiempos, donde podemos ver que aún están presentes los picos. Esto se midió con un threshold de 70 mV y un rango de voltaje de 1 V, además de un voltaje de la fuente igual a 31 V. El material estudiado fueron las monedas.

Se fue subiendo el threshold hasta lograr reducir los picos del espectro de diferencia de tiempos. En la siguiente figura se muestra el espectro de energía del fotón gamma de 511 keV de color verde, el espectro de energía del fotón de 1275 keV en color amarillo y el espectro de diferencia de tiempos de color azul. Esto fue tomado usando monedas como muestra. Los valores de threshold, rango de voltaje y voltaje de la fuente de alimentación fueron 200 mV, 2V y 31 V respectivamente. Por último, se utilizó otro osciloscopio con mucha mayor capacidad en varios factores.

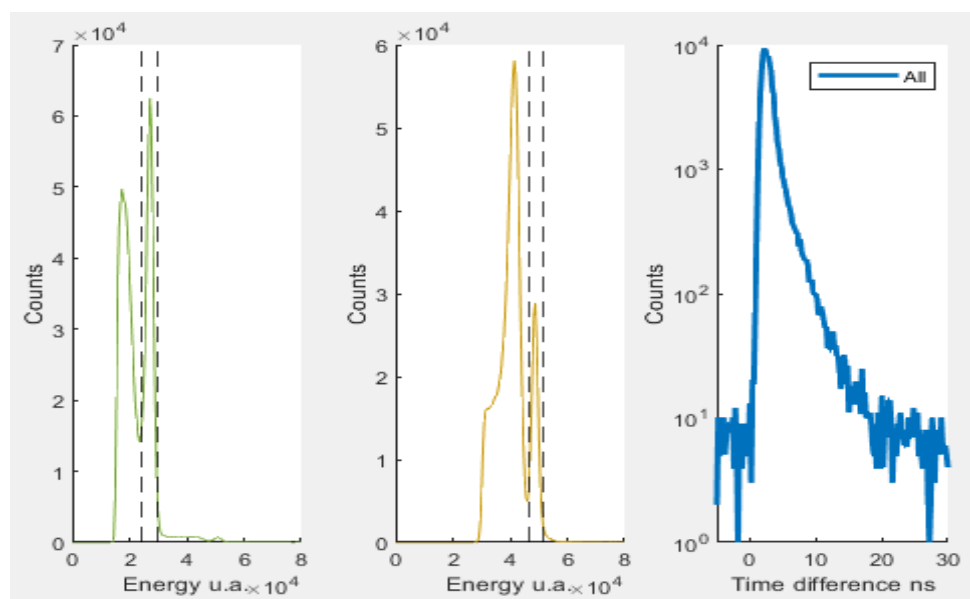


Ilustración 38. Espectro de diferencia de tiempo obtenido para material "moneda". El espectro no contiene picos después de la optimización.

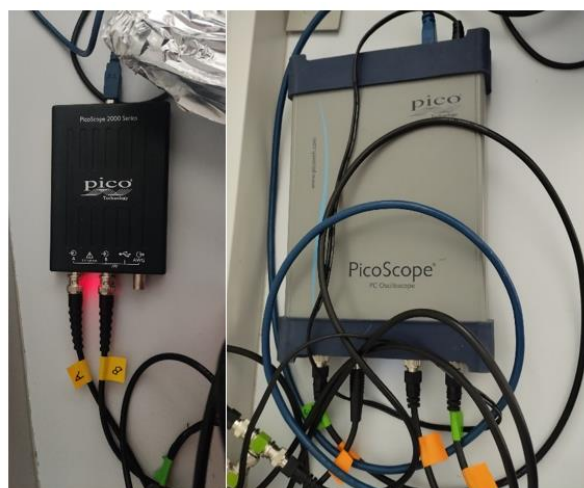


Ilustración 39. Osciloscopio picoscope 2000 (izquierda) usado al inicio de la serie de experimentos.

Osciloscopio picoscope 6000 (derecha) usado en la etapa después de la optimización final.

Esta configuración fue la usada definitivamente para tomar datos de agua, cobre y teflón. Los resultados se muestran en la parte de resultados y discusión.

Capítulo 5

5. Simulaciones: Primera parte

5.1. Introducción a las simulaciones

Las simulaciones han sido una herramienta esencial en el estudio de diversos modelos físicos, contribuyendo de manera significativa al avance de las ciencias exactas a lo largo de la historia. En física, su importancia radica en la capacidad de replicar y analizar sistemas complejos bajo un control preciso de parámetros conocidos, los cuales pueden ser modelados con base en un marco teórico sólido. Este enfoque permite explorar escenarios que, en condiciones experimentales, serían difíciles de manipular directamente.

En el contexto del presente trabajo, el objetivo principal de las simulaciones realizadas es generar espectros con parámetros conocidos, basados en los modelos teóricos previamente presentados. Estos espectros simulan resultados experimentales con la finalidad de mejorar la eficiencia del script en MATLAB encargado de ajustar los espectros al modelo matemático presentado. Al proporcionar espectros de referencia confiables, es posible optimizar el algoritmo del script y obtener resultados coherentes al momento de realizar el análisis de los espectros experimentales obtenidos en el laboratorio. En concreto, se busca afinar el ajuste de los espectros PAL experimentales mediante un proceso iterativo que permita no solo evaluar la precisión del script, sino también identificar las limitaciones inherentes al modelo y sugerir mejoras para futuras versiones del código.

De esta forma, las simulaciones no solo sirven como una prueba para validar el script de MATLAB, sino que también ofrecen un marco de referencia crucial para avanzar en la comprensión de los fenómenos involucrados en los estudios de positronio, optimizando así la calidad y fiabilidad de los resultados experimentales.

5.2. Parámetros de simulación

Los parámetros que gobiernan el comportamiento del espectro se fundamentan en la formulación matemática presentada en la sección PALS. La función que describe el espectro es una sumatoria de funciones exponenciales de decaimiento convolucionado con la resolución temporal, donde cada término de la sumatoria depende de un conjunto de parámetros que incluye los tiempos de vida y las intensidades asociadas a cada componente exponencial. A esto se le añade un término adicional conocido como background o fondo, el cual representa las cuentas aleatorias no relacionadas directamente con el tiempo de vida del positronio, pero que afectan al espectro total.

En el caso de una sumatoria de tres funciones exponenciales, los parámetros esenciales incluyen tres tiempos de vida media y tres valores de intensidad correspondientes a cada uno de esos tiempos. En total, se tienen siete parámetros, contando también el background que ajusta el ruido de fondo.

La función suma de exponenciales está convolucionada con una función suma de curvas gaussianas, lo que incorpora otros dos parámetros cruciales: la resolución del detector y el tiempo inicial en el que se comienza a contar las cuentas del espectro. La resolución del detector describe el ancho de las gaussianas y representa la precisión temporal con la que se pueden distinguir los eventos de aniquilación, mientras que el tiempo inicial establece el punto a partir del cual se inicia el conteo de eventos en el espectro.

Estos dos parámetros, la resolución y el tiempo inicial, se suman a los siete parámetros provenientes de la sumatoria de exponenciales, resultando en un total de nueve parámetros libres que deben ser determinados por el programa de ajuste de espectros. Estos parámetros no son fijos, y su correcta determinación es clave para ajustar con precisión los datos experimentales, logrando un modelo que reproduzca fielmente el comportamiento observado en los experimentos.

La optimización de estos nueve parámetros es uno de los objetivos principales del script de ajuste, ya que su adecuada estimación permite una descripción más precisa del fenómeno y una mejor comprensión de los tiempos de vida media e intensidades asociados a los procesos de formación y aniquilación del positronio en los materiales estudiados.

Tabla 5. Ejemplo de parámetros para considerar en el análisis de espectros PAL.

Parámetro	Símbolo
Tiempo de vida media p-Ps	τ_1
Tiempo de vida media free annihilation	τ_2
Tiempo de vida media o-Ps	τ_3
Intensidad p-Ps	I_1
Intensidad free annihilation	I_2
Intensidad o-Ps	I_3
Resolución temporal	σ
Tiempo inicial	t_0
Fondo	background

Una estrategia para facilitar la tarea de encontrar los 9 parámetros libres en el ajuste de espectros es fijar algunos de ellos a valores previamente conocidos o que se aproximen a un valor específico. Por ejemplo, es posible fijar los parámetros asociados a la función de resolución temporal, que describe la precisión del detector; también se puede fijar el valor de tiempo inicial. Al hacer esto, se reduce la complejidad del ajuste, permitiendo concentrar la búsqueda en los parámetros relacionados con la función sumatoria de exponenciales, que corresponden a las vidas medias y sus respectivas intensidades. De este modo, el número de parámetros libres se reduce de 9 a 7.

Otra forma de reducir aún más el número de parámetros libres es fijando ciertos tiempos de vida que son constantes y recurrentes en los experimentos, ya que representan procesos que no pueden ser eludidos físicamente. Un ejemplo de esto es la vida media del positronio dentro de la fuente, este valor debe considerarse para fijarlo si se repite en todos los experimentos. Estos tiempos de vida son bien conocidos y pueden ser fijados, lo que disminuye aún más el número de parámetros que deben ser determinados por el ajuste.

En el caso más optimizado, el número mínimo de parámetros libres que el script desarrollado puede manejar es de 4: un parámetro para la vida media del positronio o la aniquilación del positrón en el material, y tres parámetros de intensidad. Este enfoque es viable porque la vida media del positronio, en particular, la vida media del o-Ps en el material es precisamente el parámetro que se busca estudiar. Los tres parámetros de intensidad se asocian a las vidas medias del positronio tanto en el material a estudiar como en la fuente de ^{22}Na .

Es importante destacar que las intensidades correspondientes a la fuente de ^{22}Na no pueden fijarse, ya que no existe un valor específico para ellas. Sin embargo, se puede aplicar una restricción basada en la relación entre las tasas de aniquilación del p-Ps y o-Ps. Debido a las propiedades cuánticas del positronio, la relación de creación entre p-Ps y o-Ps es de 1:3 [43]. Esto implica que la intensidad de la aniquilación del o-Ps debería ser tres veces mayor que la del p-Ps.

No obstante, en muchos casos, esta relación no se refleja completamente en los datos experimentales, debido a la presencia de otros procesos que pueden influir en las mediciones. Por esta razón, en este análisis no se adopta esta restricción, y se establece que el número mínimo de parámetros libres es cuatro.

5.3. SIMULACIONPs.mat

El script encargado de realizar las simulaciones tiene como nombre SIMULACIONPs, y su funcionamiento se basa en el modelo matemático presentado en la sección *PALS*. Este script toma valores de entrada tomados de referencias de otros experimentos y se elabora un espectro de diferencias de tiempo. Este espectro contiene las vidas medias y las intensidades del positronio, la resolución y el tiempo inicial que deben ser encontrados y ajustados en otro script llamado “fit_simulacion2”.

En la primera parte del código podemos encontrar los parámetros que se usan para recrear los espectros:

```
I = [40, 40, 20, 0];
I0=I;
tau = [0.12, 0.43, 2.28, 0];
tau0=tau;
a = [I(1)/tau(1) I(2)/tau(2) I(3)/tau(3) I(4)/tau(4)];
b = [1/tau(1) 1/tau(2) 1/tau(3) 1/tau(4)];
background = 0;
t0 = 0; % desfase de las exponenciales
tg0 = 0.6; % centro de la gaussiana
exponenciales=3;
```

En la segunda parte tenemos la función suma de exponenciales y la función resolución temporal, además de su convolución que llamamos “h”.

```
% Iterar sobre las tres exponenciales
for i = 1:exponenciales
    y_sum = y_sum + a(i) * exp(-b(i) * (t - t0)) .* (t >= t0);
end

y_sum = y_sum + background ;

gg = exp(-(tg-tg0).^2 / (s^2))/(s*sqrt(pi));

h = conv(y_sum, gg, 'same'); % con convolucion
```

En la tercera parte tenemos código que recrea un ruido dentro de los espectros, esto es indispensable ya que para tener una simulación coherente con la realidad se espera que todos los espectros obtenidos en los experimentos tengan ruido asociado que es inevitable de corregir, además de esta forma se puede obtener información sobre la dificultad que tiene el script de ajuste para encontrar los valores en espectros con mucho ruido.

```
% ruido Poisson a valores menores que 10
ruido_poisson = h < 10;
y_ruidosa(ruido_poisson) = poissrnd(h(ruido_poisson));
y_ruidosa(y_ruidosa < 1) = 0;

% ruido gaussiano a valores mayores o iguales a 10
ruido_gaussiano = h >= 10;
sigma = sqrt(h(ruido_gaussiano));
y_ruidosa(ruido_gaussiano) = normrnd(h(ruido_gaussiano), sigma);
y_ruidosa(y_ruidosa < 1) = 0;
```

Se aplica un ruido de Poisson cuando el número promedio de eventos es pequeño, en nuestro script, se seleccionan todos los valores en h que sean menores de 10, por lo que a estos valores se les aplica el ruido Poisson.

Por otro lado, se aplica ruido gaussiano cuando el número de cuentas es grande, por lo que para valores mayores o iguales a 10 se les aplica el ruido gaussiano. La desviación estándar para cada valor de h se calcula como su raíz cuadrada.

En la cuarta parte se grafica el espectro generado, junto con cada exponencial de decaimiento:

```
% Graficar función original y con ruido
figure(1+k); clf; hold on;
plot(t, y_ruidosa, 'g.', 'MarkerSize', 10); hold on;
plot(t, h, 'k', 'LineWidth', 2);
%I(exponenciales+1:end)=0;

for j=1:exponenciales
    f= a(k,j) * exp(-b(k,j)*(t-t0)).* (t >= t0);

    gg = ((1/(s*sqrtpi))) * exp(-(tg-tg0).^2 / (s^2)));

    h_i = conv(f, gg, 'same');
    h_i = h_i * N / val;

    h_i = h_i + background;

    plot(t,h_i,'linewidth',2)
end
```

En la siguiente figura se puede observar un ejemplo del espectro generado, donde se observa la función convolucionada con y sin ruido:

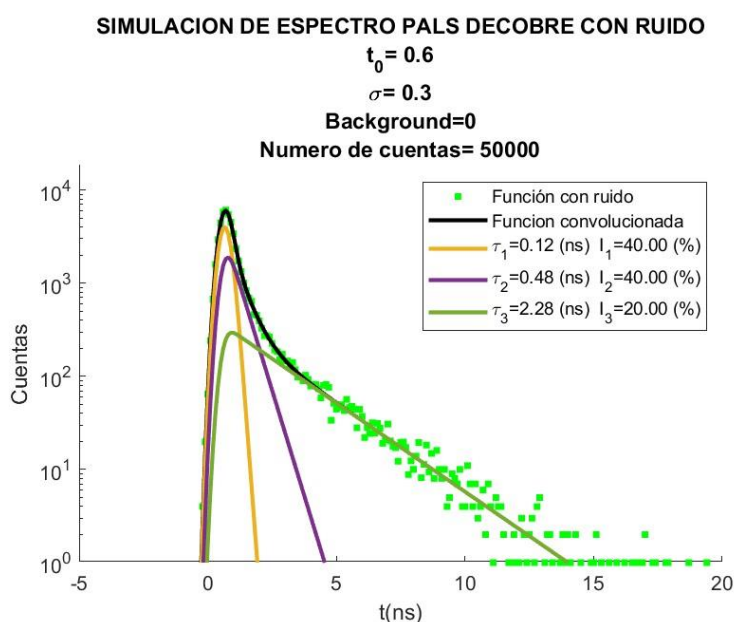


Ilustración 40. Espectro generado por el script SIMULACIONPs. Cada color representa un decaimiento exponencial. La línea negra representa la convolución sin ruido y los puntos verdes representan la convolución con ruido.

En la última parte se llama al script fit_simulacion2 para realizar el ajuste del espectro simulado y se guardan los valores.

```
fit_simulacion2

pall(nN,ns,nrep,:)=param_best;
```

El script está detallado en la parte de Anexos

5.4. Materiales simulados

Se seleccionaron tres materiales representativos para las simulaciones, con el objetivo de cubrir distintas situaciones en las que el positronio puede o no formarse, dependiendo de las características del medio en el que se encuentre. Estos materiales fueron elegidos para representar medios moleculares, polímeros y metales, proporcionando una gama diversa de entornos físicos en los cuales estudiar el comportamiento del positronio. Los materiales seleccionados fueron cobre, agua y teflón.

El cobre, como metal, es un ejemplo de un entorno donde la formación del positronio es improbable debido a la alta densidad de electrones libres. Por otro lado, el agua, un medio molecular, permite la formación de positronio y de sus estados que son el p-Ps y o-Ps, en un entorno donde las interacciones moleculares afectan significativamente su vida media, pero teniendo un valor de vida media de o-Ps muy conocido en la literatura de física del positronio en aplicaciones médicas. Finalmente, el teflón, un polímero, cuyos valores de vida media de o-Ps son los mayores de entre los materiales estudiados.

Los valores de vida media del positronio en estos materiales fueron obtenidos de diversas fuentes bibliográficas, donde se realizaron experimentos específicamente diseñados para medir tanto los tiempos de vida media como las intensidades asociadas a la formación de positronio en diferentes medios. Estos valores experimentales se utilizaron como referencia fundamental para las simulaciones, garantizando que los espectros simulados reflejaran de manera realista los comportamientos observados en experimentos previos. Al emplear estos datos reales, se asegura que las simulaciones proporcionen información útil y confiable para mejorar la precisión del script de ajuste de espectros, permitiendo una validación efectiva de los resultados.

Además, los parámetros de resolución temporal y tiempo inicial utilizados en las simulaciones fueron elegidos basándose en mediciones experimentales realizadas específicamente para este trabajo. Al seleccionar estos parámetros cercanos a los valores obtenidos en los experimentos, se garantiza que los espectros simulados sean lo más fieles posibles a las condiciones experimentales, facilitando la comparación entre los datos simulados y los datos obtenidos experimentalmente.

Tabla 6. Materiales usados para la simulación de espectros PALS

Materiales	τ_1 [ns]	τ_2 [ns]	τ_3 [ns]	I_1 [%]	I_2 [%]	I_3 [%]
Agua [36]	0.22 (p-Ps)	0.46 (free annihilation)	1.86 (o-Ps)	25	48	27
Cobre [37]	0.12 (bulk)	0.18 (defecto)	-	100	-	-
Plástico EPOXY [40]	0.22 (p-Ps)	0.48 (free annihilation)	2.28 (o-Ps)	45	32	23

5.5. fit_simulation2.mat

El script encargado de ajustar y encontrar los parámetros simulados tiene el nombre de `fit_simulation2`. Las partes más importantes de este script se presenta a continuación. Para una explicación más detallada ver la sección de ANEXOS.

La primera parte contiene a los parámetros iniciales, los límites entre los que busca el script y los rangos entre los que oscila. En esta parte se colocan los valores para cada exponencial que dependen de su naturaleza física, es decir, se colocan límites de los valores que se conocen teóricamente en base a las formas de aniquilación y al proceso que se anticipa a la aniquilación.

Los parámetros iniciales se agrupan en grupos de 3, es decir, cada 3 términos se corresponden a una exponencial de decaimiento, donde el primer término se corresponde a la intensidad de la exponencial de decaimiento, el segundo término se corresponde a la tasa de aniquilación y el tercero se corresponde al background, pero solo para la primera exponencial ya que el fondo se debe añadir una sola vez. En total hay 14 términos, donde los 12 primeros son correspondientes a 4 exponenciales de decaimiento que conforman la función sumatoria de exponenciales.

Usualmente los primeros valores del vector se corresponden con la formación del para positronio, los 3 valores siguientes se corresponden con la aniquilación libre; los 3 siguientes valores se corresponden a la formación del orto-positronio; los 3 siguientes se corresponden a la contribución de la fuente y los últimos 2 valores se corresponden a los valores de resolución σ y tiempo inicial t_0 . Pero esto no es una regla, el orden no altera al espectro. En el estudio se ordena los valores de menor a mayor, es decir, τ_1 es el menor valor de vida media y τ_4 es el valor más grande, independientemente si es de la fuente o del material a estudiar.

	<code>%[I1/tau1</code>	<code>1/tau1</code>	<code>background</code>	<code>I2/tau2</code>	<code>1/tau2</code>	<code>0</code>	<code>I3/tau3</code>	<code>1/tau3</code>	<code>0</code>	<code>I4/tau4</code>	<code>1/tau4</code>	<code>0</code>	<code>resolucion</code>	<code>t0</code>	<code>]</code>
<code>param_best=</code>	<code>[a(1)</code>	<code>1/0.1</code>	<code>c0</code>	<code>a(1)</code>	<code>1/0.4</code>	<code>0</code>	<code>a(1)</code>	<code>1/2</code>	<code>0</code>	<code>a(1)</code>	<code>1/2</code>	<code>0</code>	<code>0.5</code>	<code>xlim3]</code>	
<code>param_low=</code>	<code>[0</code>	<code>1/0.12</code>	<code>0</code>	<code>0</code>	<code>1/3</code>	<code>0</code>	<code>0</code>	<code>1/3</code>	<code>0</code>	<code>0</code>	<code>1/3</code>	<code>0</code>	<code>0</code>	<code>0</code>	<code>]</code>
<code>param_max=</code>	<code>[0</code>	<code>1/0.12</code>	<code>0</code>	<code>0</code>	<code>1/0.1</code>	<code>0</code>	<code>0</code>	<code>1/0.1</code>	<code>0</code>	<code>0</code>	<code>1/0.1</code>	<code>0</code>	<code>0.5</code>	<code>1</code>	<code>]</code>
<code>param_range=</code>	<code>[a(1)</code>	<code>10</code>	<code>c0/10</code>	<code>a(1)</code>	<code>10</code>	<code>0</code>	<code>a(1)</code>	<code>10</code>	<code>0</code>	<code>a(1)</code>	<code>10</code>	<code>0</code>	<code>0.1</code>	<code>xlim3]</code>	

El vector `param_best` contiene los parámetros iniciales; `param_low` contiene el rango inferior, `param_max` contiene el rango superior y `param_range` contiene los pasos o saltos entre valores. Escoger un buen rango entre valores de `param_low` y `param_max` contribuye mucho a una búsqueda más eficaz de los valores reales. Escoger también buenos valores iniciales provoca que no se caiga en bucles cerrados o no convergencias que llevan a resultados erróneos dentro del ajuste.

La segunda parte contiene el ajuste como tal, donde se procede a realizar una búsqueda con valores aleatorios y una tolerancia establecida.

```
f=zeros(size(x));
param=zeros(14,1);
%t0=0.6;
t0=max(param_best(14)+(rand-0.5)*param_range(14)*tol,param_low(14));
param(14)=t0;
for j=0:nexp-1
    a=max(param_best(1+j*3)+(rand-0.5)*param_range(1+j*3)*tol,param_low(1+j*3));
    b=max(param_best(2+j*3)+(rand-0.5)*param_range(2+j*3)*tol,param_low(2+j*3));
    b=min(b,param_max(2+j*3));
    if j==0
        c=0; %max(param_best(3+j*3)+(rand-0.5)*param_range(3+j*3)*tol,param_low(3+j*3));
    else
        c=0;
    end
    f=f+a*exp(-b*(x)).*(x >= 0) + c;
    param(1+j*3:3+j*3)=[a b c];
end
```

Los parámetros iniciales entran dentro de la iteración hasta conseguirse la convergencia a valores cuyo error sea pequeño.

```

g=exp(-(xg - t0).^2/(d^2))/(d*sqrt(pi));
h=conv(f,g,'same');

error=((yData-h).^2./yData);
error2=sum(error(x>xlim1&x<xlim2 & yData>0));

```

El error se calcula de la siguiente manera:

$$Error = \sum \frac{(H(t) - h(t))^2}{H(t)} \quad (68)$$

Donde $H(t)$ son los valores experimentales y $h(t)$ es la convolución de la función sumatoria de exponenciales con la función resolución.

El script finaliza su trabajo cuando la tolerancia sea menor a 10^{-6} , ya que se observó que para esa tolerancia todos los ajustes de cualquier espectro terminan convergiendo.

5.6. Verificación de ajuste

Se debe verificar si los ajustes que realiza el script son correctos o no, para ello se creó un espectro con los siguientes parámetros:

Tabla 7. Parámetros de simulación del espectro de cobre para verificación

Parámetro	Valor
τ_1	0.12 [ns]
τ_2 (<i>fuelle</i>)	0.48 [ns]
τ_3 (<i>fuelle</i>)	2.28 [ns]
I_1	40%
I_2 (<i>fuelle</i>)	40%
I_3 (<i>fuelle</i>)	20%
σ	0.3 [ns]
t_0	0.6 [ns]
background	0

Con estos parámetros obtenemos el espectro siguiente:

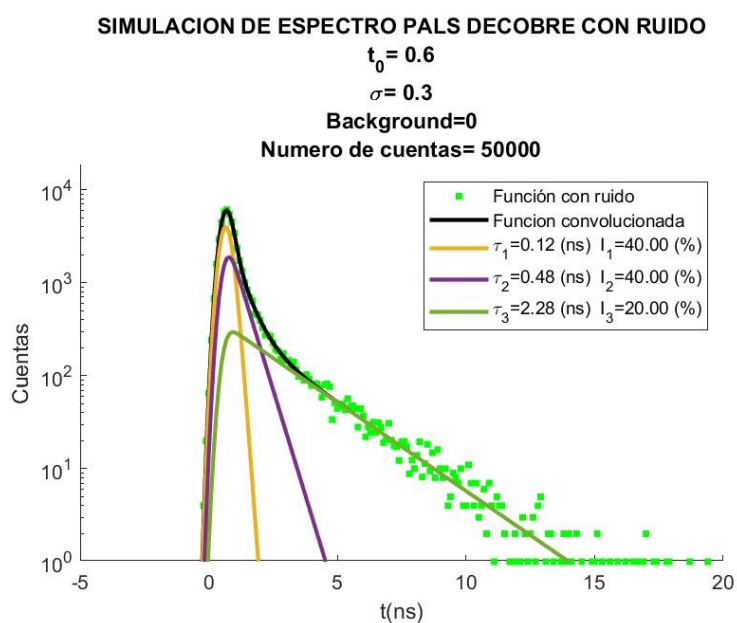


Ilustración 41. Espectro de cobre simulado para verificación del script de ajuste fit_simulacion2

El script de ajuste fit_simulacion2 toma el espectro sin ruido primero para verificar el ajuste, los parámetros iniciales del script de ajuste son:

Tabla 8. Parámetros iniciales del script fit_simulacion2 para el ajuste del espectro simulado

Cobre								
	I_1/τ_1	I_2/τ_2	I_3/τ_3	$1/\tau_1$	$1/\tau_2$	$1/\tau_3$	σ	t_0
Param_best	a(1)	a(1)	a(1)	1/0.5	1/1	1/3	0.5	0.5
Param_low	0	0	0	1/0.5	1/1	1/3	0	0
Param_max	0	0	0	1/0.1	1/0.1	1/2	0.5	1
Param_range	a(1)	a(1)	a(1)	10	10	10	0.1	0.5

En base a esa lista de parámetros iniciales el script fit_simulacion2 realiza el ajuste para encontrar los valores que componen al espectro simulado, dando el siguiente resultado:

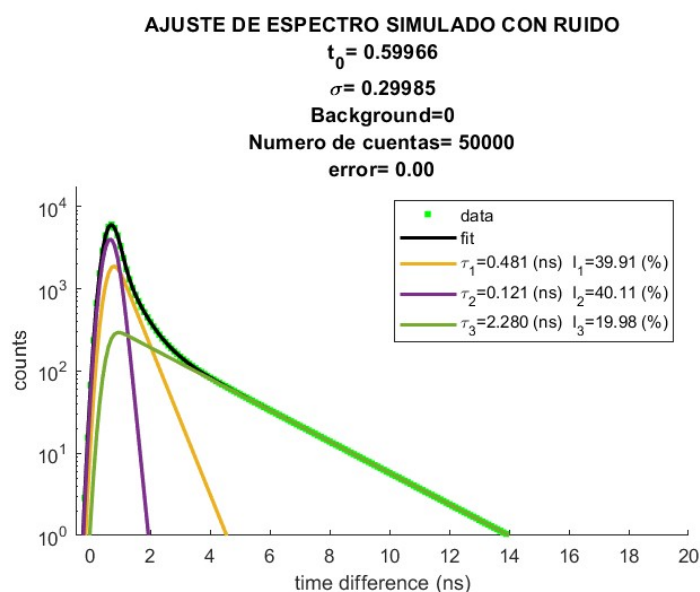


Ilustración 42. Ajuste del espectro simulado sin ruido, los valores encontrados son iguales a los valores simulados

Estos valores encontrados son iguales a los valores del espectro simulado, por lo que el ajuste es bueno sin ruido. El ajuste sobre el espectro con ruido se aleja un poco de los valores simulados, esto se puede ver en el siguiente grafico:

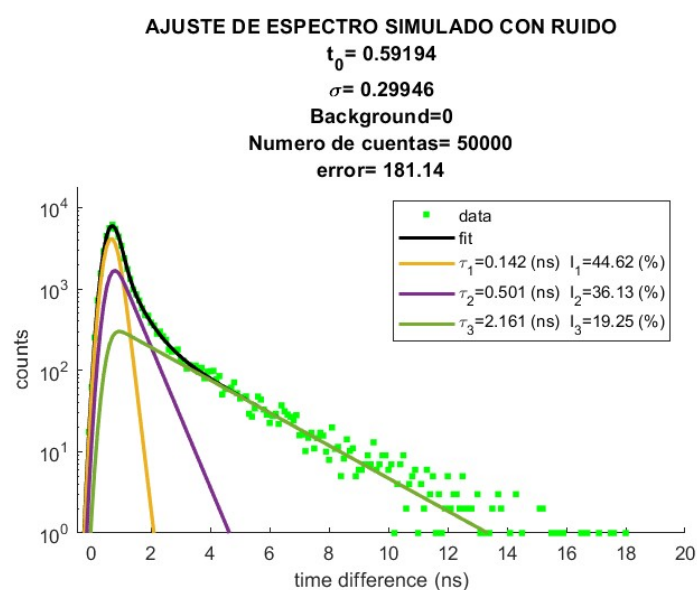


Ilustración 43. Ajuste del espectro simulado con ruido

5.7. Procedimiento de las simulaciones

El procedimiento para realizar las simulaciones debe seguir un orden debido a que el número de exponenciales afecta en la dificultad de encontrar los valores reales en el ajuste. Lo ideal es ir reduciendo el número de parámetros libres empezando desde la resolución y el tiempo inicial e ir avanzando en la reducción hasta fijar los valores de vida media de la fuente radiactiva. Por lo que primero se debe realizar una simulación sin ningún parámetro fijo para encontrar la resolución y tiempo inicial. Esto se debe hacer con un material que solamente contenga un tiempo de vida media conocido, este es el caso del cobre, por lo tanto, se debe comenzar

con este material al realizar las simulaciones. Luego se debe realizar una simulación con los parámetros de resolución y tiempo inicial fijos para obtener el valor de τ_1 y poder fijarlo. Todo esto se realiza con el objetivo de encontrar el valor más próximo de vida media de la fuente radiactiva.

5.7.1. Simulación de espectro de cobre (Calibración de resolución)

Primeramente, se simuló un espectro de cobre ya que se sabe que los espectros de metales como cobre, aluminio o níquel contienen sólo una función exponencial, por lo que, si tenemos un espectro con 3 exponenciales, las 2 pendientes restantes son contribuciones de la fuente, a estas vidas medias de la fuente las pondremos en el lugar de τ_2 y τ_3 . Este primer paso es necesario para obtener el valor de resolución y así poder fijar este parámetro para el estudio de los materiales restantes.

Tabla 9. Parámetros de simulación de espectro PALS para el cobre

Cobre	
Parámetro	Valor
τ_1 (<i>bulk</i>)	0.12 [ns]
τ_2 (<i>fuentes</i>)	0.48 [ns]
τ_3 (<i>fuentes</i>)	2.28 [ns]
I_1 (<i>bulk</i>)	40%
I_2 (<i>fuentes</i>)	40%
I_3 (<i>fuentes</i>)	20%
σ	0.3 [ns]
t_0	0.6 [ns]
background	0

Entonces, con estos parámetros de simulación de espectro, el script SIMULACIONPs genera el típico espectro que se obtiene en experimentos PALS, y se visualiza las pendientes que corresponden a las exponenciales dentro de la función suma de exponenciales con un color diferente.

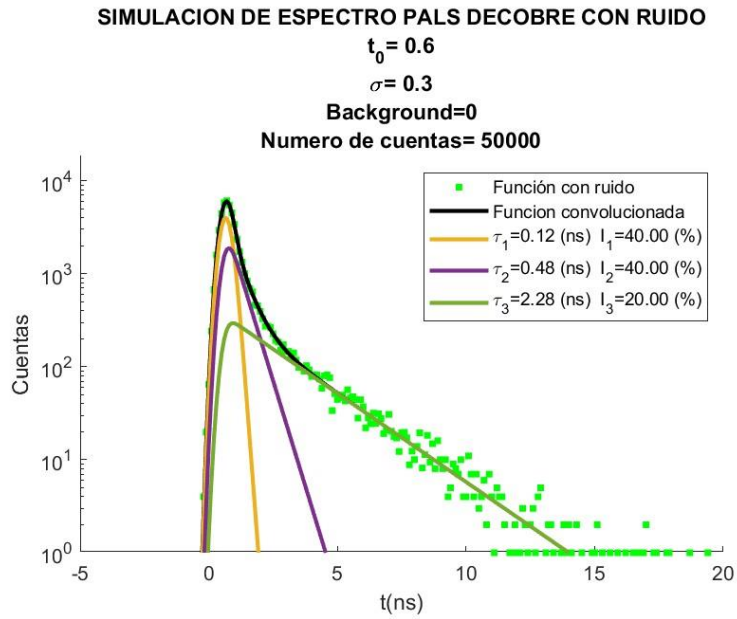


Ilustración 44. Espectro de diferencia de tiempo simulado del cobre, la línea amarilla se corresponde a la vida media del positrón en el bulk, la línea morada se le atribuye a la contribución de la fuente sin formar positronio (free annihilation) y la línea verde se le atribuye a la contribución de la fuente formando o-Ps.

Se repitió el ajuste del espectro 10 veces para observar la variación de los resultados del ajuste, con esto observamos si existe mucha discrepancia entre cada repetición. Los límites del ajuste se configuraron para que este tome el límite inferior y superior del espectro en la figura, es decir, los límites del ajuste son entre -5 y 20 ns.

Capítulo 6

6. Simulaciones: Segunda parte

6.1. Simulaciones de otros parámetros

Un parámetro para considerar muy importante dentro de las mediciones de tiempos de vida y aniquilación de un material es la cantidad de eventos que el experimentador logra obtener. Para un mejor estudio PALS se debe tomar medidas con números de cuentas que rondan valores grandes como ser del orden de 10^6 , esto deja en evidencia un asunto a tratar, de la que se puede elaborar una pregunta con una respuesta no tan obvia. ¿Qué valor del número de cuentas debe ser el mínimo para estudiar un espectro PALS? La respuesta no es sencilla ya que a pesar de tener un número de cuentas bajo se puede realizar un estudio, con mucha dificultad, pero es posible estimar valores de vida media. No obstante, también surge la pregunta ¿Cómo cambia los espectros cuando cambia el número de cuentas? Esta pregunta es la inspiración para realizar simulaciones y poner a prueba el script de ajuste `fit_simulation2`. Se presupone que este script no tendrá mucho éxito para valores del número de cuentas bajo y mientras va aumentando el número de cuentas recabado, la dificultad se va reduciendo.

Otro parámetro muy importante es la resolución temporal de la que ya se trató. Sobre este parámetro también uno se puede preguntar ¿Cómo afecta un aumento o reducción de la resolución temporal al espectro? ¿Qué valores contribuyen con la facilidad de ajustar el espectro? Todas las preguntas se pueden responder con una simulación, donde se varía los valores de resolución temporal para obtener espectros mejor ajustados o peor ajustados.

Se procedió a realizar las simulaciones en el material de cobre variando la resolución temporal desde 0.2 hasta 0.8 nanosegundos, con pasos de 0.3 nanosegundos, esto se hizo para un número específico de cuentas que varía desde 10000, pasando por 100000 hasta llegar a 1000000 cuentas, realizando 5 repeticiones de ajuste con cada combinación posible de resolución y número de cuentas en el script `fit_simulation2`. Se obtuvo los valores de vida media del positronio en cobre (bulk) y la vida media del o-Ps de cualquier material que represente la contribución de la fuente.

En la siguiente figura se muestra simulaciones de espectros con ruido, se ve como la distribución de las cuentas depende del número de cuentas y del valor de resolución temporal:

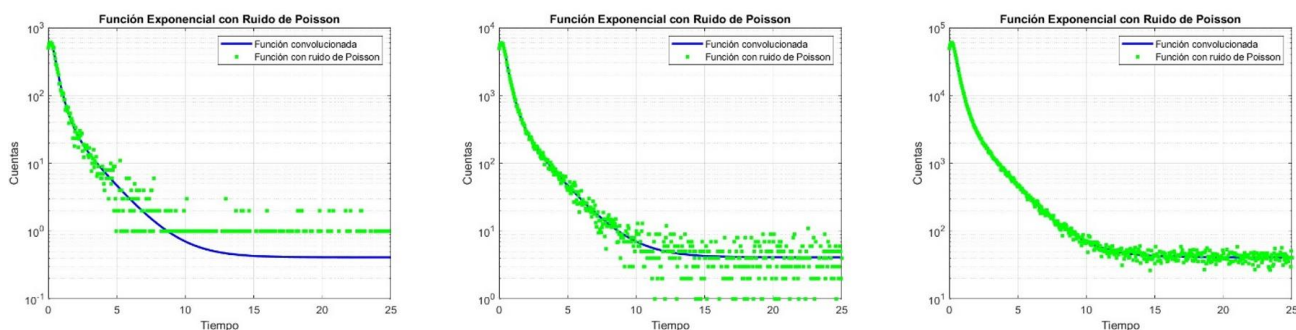


Ilustración 45. Espectros simulados con numero de cuentas 10000, 100000 y 1000000, con una resolución de 0.2 ns en los 3 espectros

Si se aumenta el valor de resolución a 1 ns, se tiene un pico en el espectro más amplio, teniendo otra forma estos espectros bajo el mismo número de cuentas:

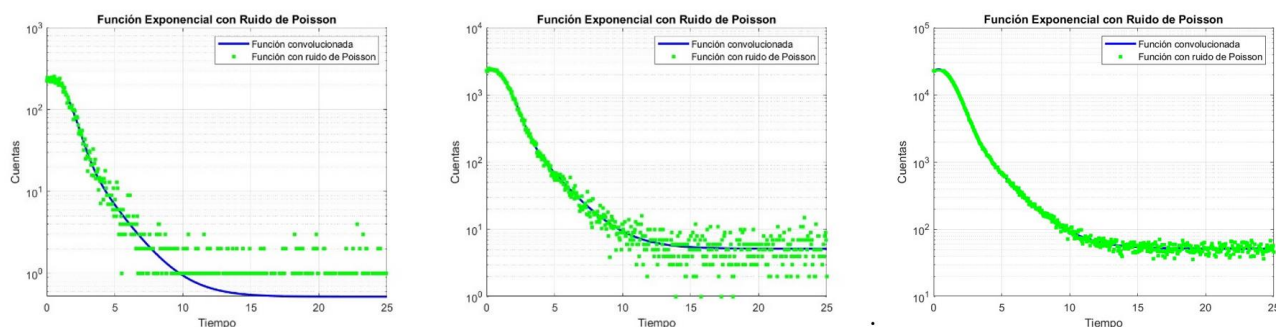


Ilustración 46. Espectros simulados bajo un número de cuentas igual a 10000, 100000, 1000000, con una resolución igual a 1 ns

Por lo que estos espectros pueden llegar a ser mal ajustados en la parte final del espectro, ya que la forma se ve distorsionada a menor numero de cuentas, independientemente de la resolución que tenga.

Una resolución alta seria la responsable de un ajuste del espectro distorsionado, ya que el pico es el afectado por el cambio de resolución, haciendo que las vidas medias del orden de los cientos de picosegundos se vean afectados. En cambio en ajustes de vida media del orden de nanosegundos como las del o-Ps se ven afectados sobre todo por el número de cuentas.

Capítulo 7

7. Calibración de vida media

7.1. Calibración con cobre y monedas

La calibración se hace ajustando un espectro de diferencia de tiempo que se conoce de antemano que solo contiene una vida media, como ser algunos metales como el aluminio, hierro o cobre. Si dentro del espectro aparecen más de una pendiente, se considera el resto como contribuciones de la fuente o del soporte de la fuente y de la muestra.[44]

En este estudio de calibración, se midió cobre con el osciloscopio PicoScope series 6000 y monedas de 20 céntimos que están hechas de cobre y aluminio[38] con el osciloscopio PicoScope series 2000, por lo que el espectro solamente contiene una sola pendiente perteneciente a la vida media del positrón en el material cobre y el resto son contribuciones por conocer.

Se usó el cobre como primer material de estudio ya que según la teoría presentada en la formación del átomo de positronio regido por el modelo del gap de Ore, este no forma al positronio en metales, por lo que el espectro solamente se verá afectado por la aniquilación libre entre el positrón y los electrones del medio, esto viéndose reflejado en el espectro, específicamente en la parte del pico, por lo que el resto del espectro será solamente la contribución de la formación del positronio en la fuente o en el material que sostiene la fuente con la muestra. Esto aplica tanto para las simulaciones como para los espectros obtenidos experimentalmente.

Primero se realiza un ajuste del espectro de material X con parámetros libres, esto para identificar los rangos en los que se mueve los ajustes, esto se debe corroborar con la literatura siempre ya que un ajuste que varíe mucho entre lo analizado y lo que ya se conoce debe ser corregido. Para evitar falsos ajustes se realizó 10 repeticiones del ajuste. Este primer paso es fundamental ya que en este se encuentran los valores de resolución temporal y tiempo inicial. La resolución es el único parámetro que se repite en todos los experimentos ya que representa la resolución del equipo experimental. El tiempo inicial puede variar debido a otros factores, un cambio mínimo en la toma de los datos puede alterar este tiempo inicial.

Como segundo paso se ajustó el mismo espectro se debe ajustar pero con los parámetros de resolución y tiempo inicial fijos. Tercer paso es ajustar el espectro con 3 parámetros fijos, es decir incluimos uno de vida media. Finalmente se obtienen los valores de contribución de la fuente que pueden o no ser los mismos en los diferentes espectros de los materiales estudiados.

Parte 3

Resultados y discusión

Capítulo 8

8. Resultados simulaciones parte 1

Para visualizar el resultado de los ajustes de los espectros simulados se graficó la intensidad vs los valores de vida media encontrados por el script de ajuste fit_simulation2, para así observar claramente el alejamiento o acercamiento al valor conocido.

8.1. Calibración con cobre

Al ejecutar el script de ajuste se obtuvieron los siguientes resultados de resolución temporal y tiempo inicial en 10 repeticiones:

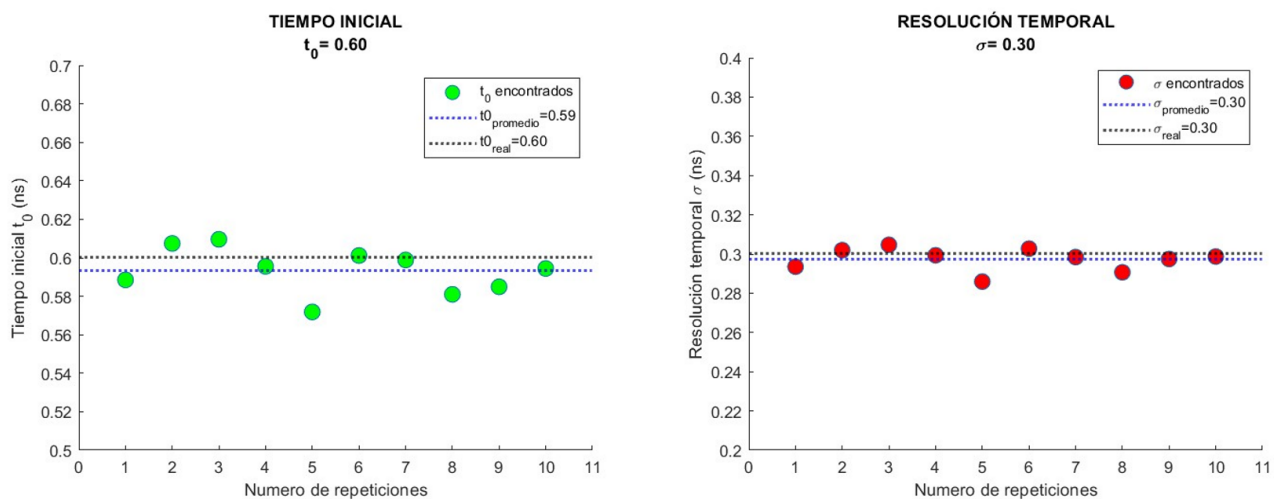


Ilustración 47. Tiempo inicial y resolución hallados en 10 repeticiones en el ajuste del espectro de cobre simulado

Los valores obtenidos en cada repetición se asemejan al valor real, por lo que podemos fijar estos valores para reducir el número de parámetros libres.

Los resultados obtenidos para los valores de tiempo de vida e intensidad son los siguientes:

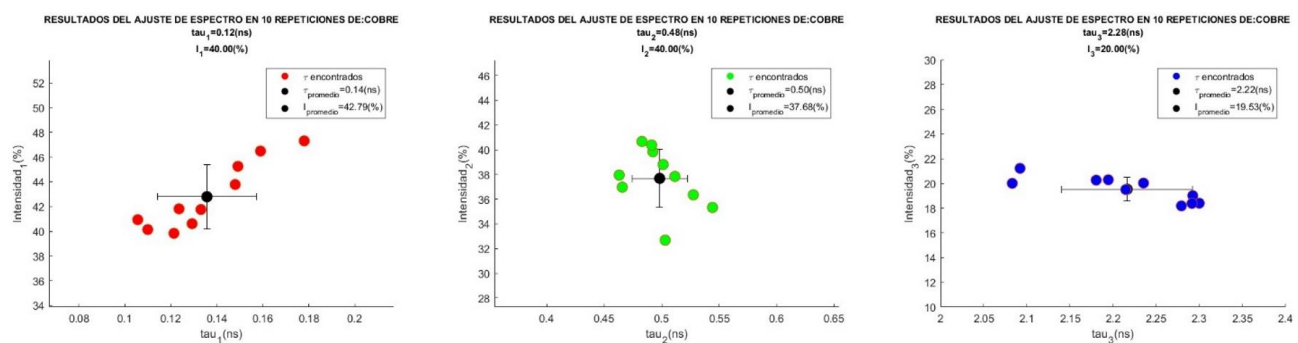


Ilustración 48. Resultados del ajuste del espectro de cobre simulado en 10 repeticiones sin parámetros fijos

En la siguiente tabla se encuentran los resultados promedio con sus respectivas desviaciones:

Tabla 10. Resultados promedio del ajuste realizado sobre el espectro simulado del cobre, sin parámetros fijos

Cobre								
Real	τ_1 [ns]	τ_2 [ns]	τ_3 [ns]	I_1 [%]	I_2 [%]	I_3 [%]	σ [ns]	t_0 [ns]
Ajustado	0.12	0.48	2.28	40	40	20	0.3	0.6
	0.1357	0.4983	2.2163	42.7907	37.6778	19.5315	0.2973	0.5933
	± 0.0215	± 0.0241	± 0.0760	± 2.5913	± 2.3443	± 0.9563	± 0.0058	± 0.0119

En las 10 repeticiones hubo una convergencia al valor real de los parámetros de resolución y tiempo inicial. El promedio efectuado obtenido fue de $\sigma = 0,30$ y $t_0 = 0,59$, por lo que estos valores al ser cercanos los podemos fijar para la siguiente etapa de la simulación, reduciendo así los parámetros libres a 6.

8.1.1. Fijando parámetros de resolución y tiempo inicial

Para poder obtener el valor de vida media en la fuente radiactiva, es necesario fijar los parámetros de resolución y tiempo inicial. Se tomó el valor medio de los parámetros σ y t_0 de las 10 repeticiones y se fijó ese valor al valor encontrado en la primera parte, para realizar una nueva tanda de simulaciones. En estas simulaciones solo disponemos de 6 parámetros libres. Los resultados de los ajustes de la simulación se muestran en las siguientes figuras:

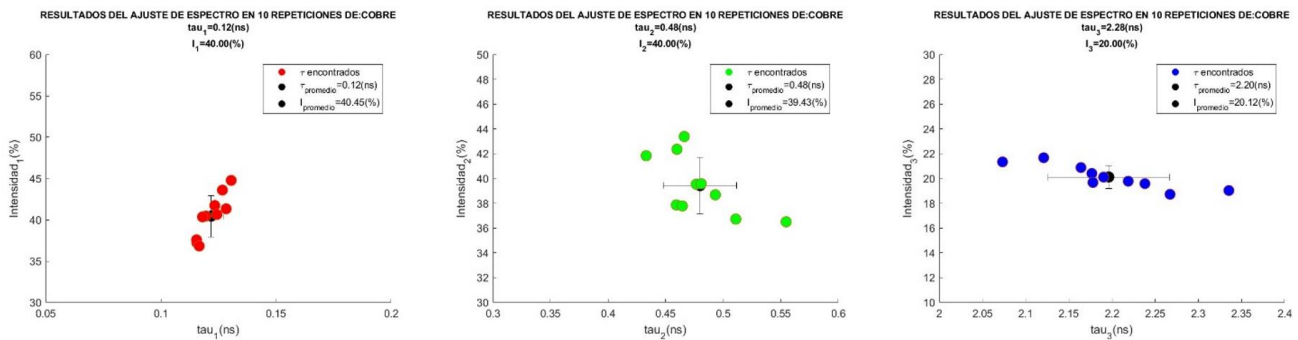


Ilustración 49. Resultados de ajuste de espectro de cobre simulado con 2 parámetros fijos, resolución y tiempo inicial

En la siguiente tabla se encuentran los resultados promedio con sus respectivas desviaciones:

Tabla 11. Resultados promedio del ajuste realizado sobre el espectro simulado del cobre, resolución y tiempo inicial fijos (amarillo)

Cobre								
Real	τ_1 [ns]	τ_2 [ns]	τ_3 [ns]	I_1 [%]	I_2 [%]	I_3 [%]	σ [ns]	t_0 [ns]
Ajustado	0.12	0.48	2.28	40	40	20	0.3	0.6
	0.1219	0.4799	2.1962	40.4524	39.4259	20.1218		
	± 0.0053	± 0.0319	± 0.0702	± 2.5052	± 2.2721	± 0.9114		

Se puede apreciar como los valores promedio se aproximan a los valores reales, con una desviación estándar más pequeña que cuando se dejó todos los parámetros libres. Las intensidades se acercan un poco más al valor real. El siguiente paso que es necesario trata sobre hallar el valor de la vida media proveniente de la fuente. En los resultados de la vida media τ_3 que representa la fuente, no hay mucho acercamiento entre el valor promedio y el valor real. Por otro lado, el valor de τ_1 es muy acertado, por lo que una forma de ayudar al script fit_simulacion2 para encontrar el valor de τ_3 es fijar τ_1 , por lo que el siguiente paso trata sobre fijar este valor.

8.1.2. Búsqueda de la vida media proveniente de la fuente radiactiva

El parámetro de vida media del positrón en cobre pasa a ser un parámetro fijo. Ahora disponemos del número de parámetros fijos igual a 4, por lo tanto, el trabajo se reduce casi a la mitad. Se procedió a simular nuevamente el espectro y ajustar los valores realizando 10 repeticiones con 5 parámetros libres y 4 fijos. Los resultados se muestran a continuación:

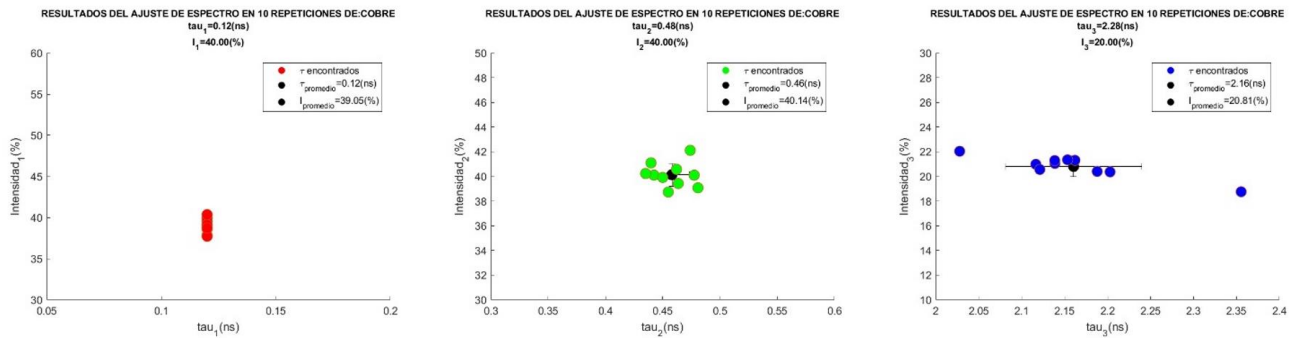


Ilustración 50. Resultados de ajuste de espectro de cobre simulado con 3 parámetros fijos, resolución, tiempo inicial y vida media τ_1

Se observa que los valores promedio son cercanos a la simulación realizada con vida media del positrón sin fijar. Para el valor de τ_3 no es muy cercano, lo cual indica un posible problema dentro del script de ajuste.

En la siguiente tabla se muestra los valores y sus respectivas desviaciones estándar:

Tabla 12. Resultados promedio del ajuste realizado sobre el espectro simulado del cobre. Resolución, tiempo inicial y vida media del positrón en cobre fijos

Cobre								
	τ_1 [ns]	τ_2 [ns]	τ_3 [ns]	I_1 [%]	I_2 [%]	I_3 [%]	σ [ns]	t_0 [ns]
Real	0.12	0.48	2.28	40	40	20	0.3	0.6
Ajustado	0.12	0.4580 ± 0.0154	2.1604 ± 0.0792	39.0505 ± 0.8099	40.1383 ± 0.9313	20.8113 ± 0.83732	0.3	0.6

8.2. Agua

La simulación de este nuevo material implica dos cosas muy importantes a destacar.

Primero, el número de exponenciales que entran en juego ahora son 4, haciendo que la dificultad sea mayor; y segundo, los parámetros fijos aumentan a 4 sin contar el background, por lo que el encontrar los valores aproximados debería ser más sencillo para el script.

Tabla 13. Parámetros de simulación del espectro de agua con parámetros fijos (amarillo)

Agua	
Parámetro	Valor
τ_1	0.22 ns
τ_2	0.48 ns
τ_3	1.86 ns

τ_4	2.28 ns
I_1	30%
I_2	20%
I_3	30%
I_4	20%
σ	0.3 ns
t_0	0.6 ns
background	0

Los cuadros pintados de amarillo son los parámetros fijos. El objetivo ahora es de encontrar los valores restantes de tiempo de vida e intensidad para el material del agua. Se crea un nuevo espectro formado por 4 exponenciales que se muestra a continuación:

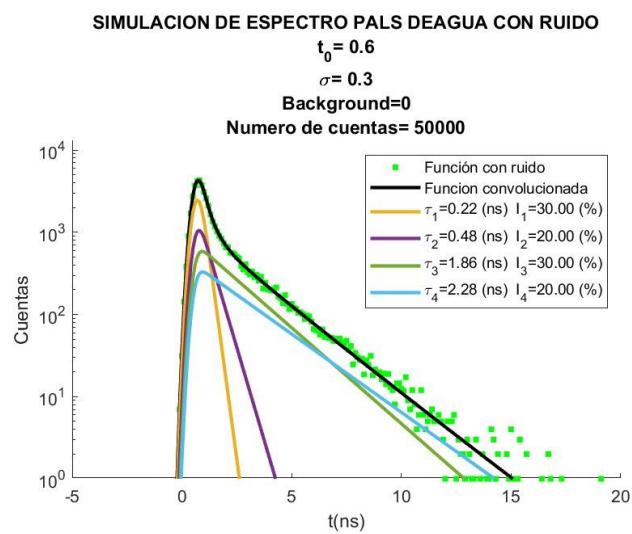


Ilustración 51. Espectro simulado de agua con 4 exponenciales de decaimiento

Los resultados de realizar el ajuste sobre el espectro son los siguientes:

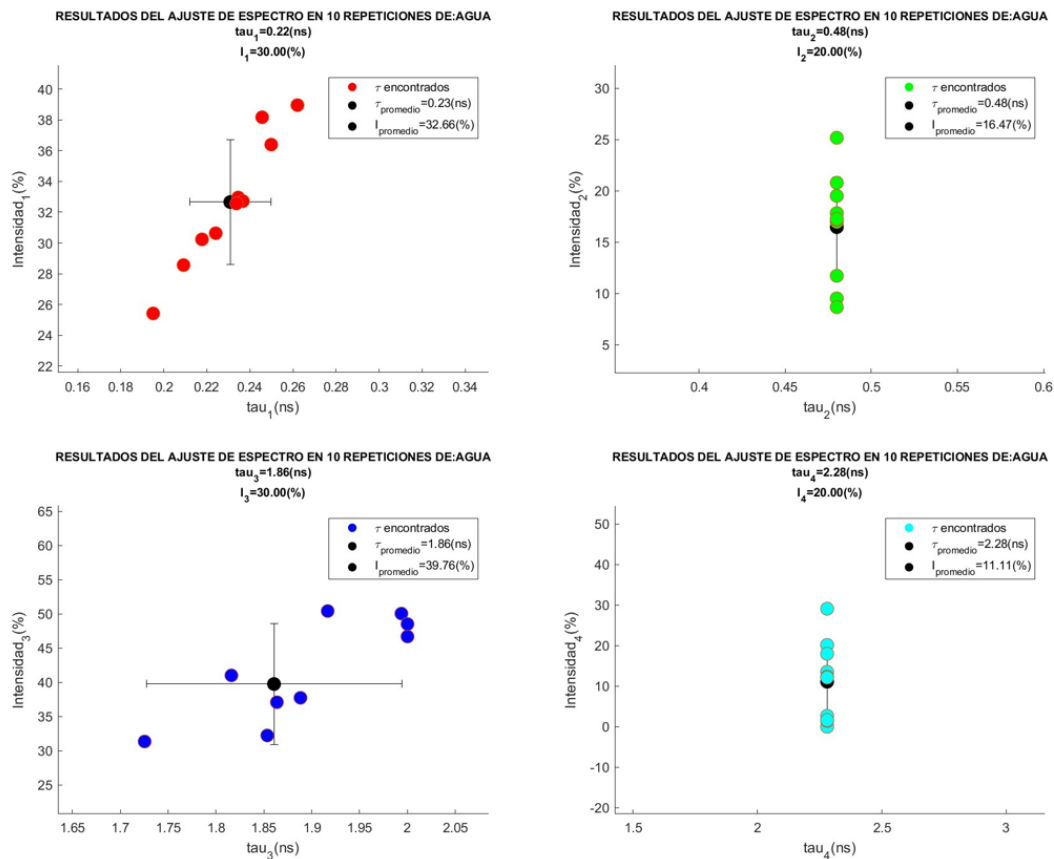


Ilustración 52. Resultados de los ajustes del espectro de agua en 10 repeticiones con 4 parámetros fijos

Se puede observar cómo los parámetros a encontrar son cercanos a los valores promedio, aunque la variación entre cada ajuste fue grande. Pero la media se acerca al valor real para el p-Ps y o-Ps que es lo que queríamos encontrar. Sobre todo los valores de o-Ps del agua que es un valor característico.

Tabla 14. Resultados del ajuste de espectro de agua simulado con 4 parámetros fijos (amarillo)

Agua										
	$\tau_1[ns]$	$\tau_2[ns]$	$\tau_3[ns]$	$\tau_4[ns]$	$I_1[\%]$	$I_2[\%]$	$I_3[\%]$	$I_4[\%]$	$\sigma[ns]$	$t_0[ns]$
Real	0.22		1.86		30	20	30	20		
Ajustado	0.23 ± 0.02	0.48	1.86 ± 0.13	2.28	32.7 ± 4.0	16.5 ± 4.9	39.8 ± 8.9	11.1 ± 9.3	0.3	0.6

Capítulo 9

9. Resultados simulaciones parte 2

A continuación se muestran los resultados de la variación del número de cuentas, la resolución en 5 repeticiones para cada simulación de espectros de cobre y agua.

Tabla 15. Parámetros simulados del espectro de diferencia de tiempo para el cobre

Cobre		
Parámetro	Símbolo	Valor
Tiempo de vida media (bulk)	τ_1	0.12 [ns]
Tiempo de vida media o-Ps	τ_3	2.35 [ns]
Número de coincidencias	N	$(10^4, 10^5, 10^6)$
Resolución temporal	σ	$(0.2, 0.5, 0.8)$ [ns]
Numero de repeticiones de ajuste	n	10

En la siguiente figura se encuentra los resultados promedio del ajuste realizado en los espectros simulados.

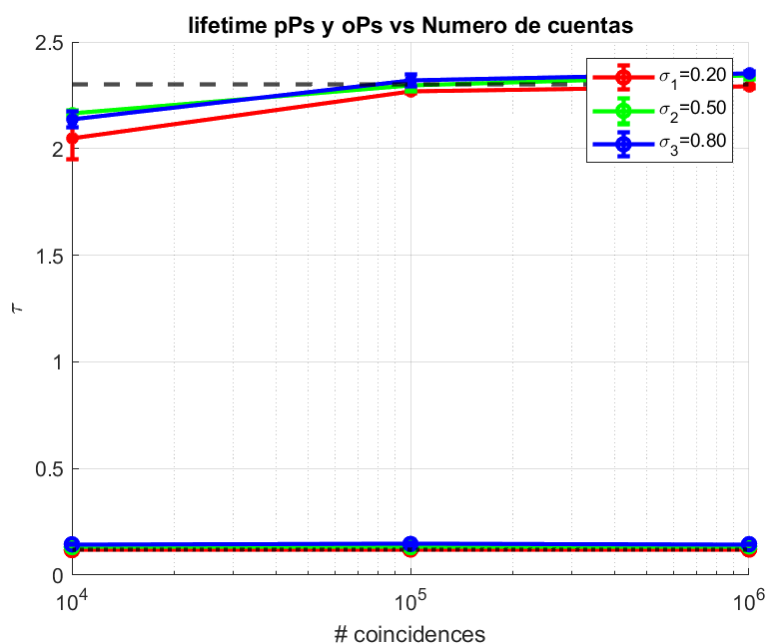


Ilustración 53. Valores de τ_1 y τ_3 en el estudio del cobre. La línea punteada larga '-'-' se sitúa en el valor de τ_3 real. La línea punteada corta '....' se sitúa en el valor de τ_1 real. Los puntos unidos por la línea son los valores promedio de 5 repeticiones con los valores de Numero de coincidencias y σ donde se sitúa el punto.

Podemos observar como para un número mayor de coincidencias se tiene un mejor resultado para el valor de vida media del o-Ps. Con una resolución menor se obtienen valores que se aproximan o se superponen incluso a la línea punteada que representa el valor real a encontrar, por lo que para un valor de resolución temporal acercándose a los pocos cientos de picosegundos tenemos un mejor resultado. Todos estos resultados

son los esperados ya que es evidente que mientras más datos se recaben y mejor sea la resolución del equipo, mejor se podrá realizar un ajuste al espectro ya que el ruido se vería minimizado.

Este mismo procedimiento se realizó para el agua, donde los valores ahora son la vida media del p-Ps en agua y vida media del o-Ps en agua, ambos valores se estudian de la misma manera que se hizo con cobre.

Tabla 16. Parámetros simulados del espectro de diferencia de tiempo para el agua

Agua		
Parámetro	Símbolo	Valores
Tiempo de vida media p-Ps en agua	τ_1	0.22 [ns]
Tiempo de vida media o-Ps en agua	τ_3	1.86 [ns]
Número de coincidencias	N	$(10^4, 10^5, 10^6)$
Resolución temporal	σ	(0.2, 0.5, 0.8) [ns]
Numero de repeticiones de ajuste	n	10

La figura que se muestra a continuación es el resultado promedio de varias simulaciones:

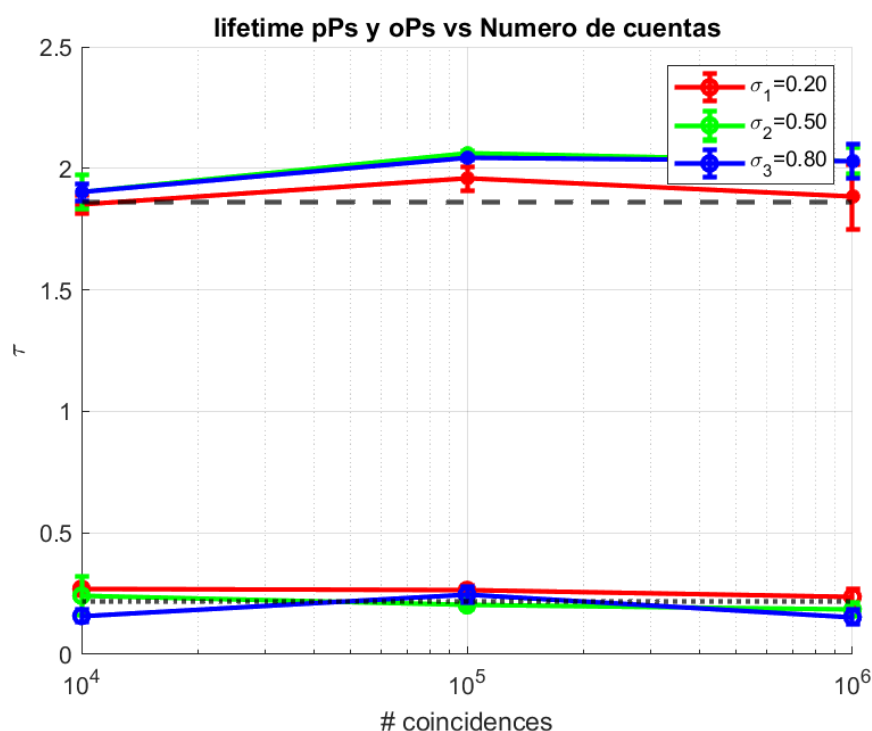


Ilustración 54. Valores de τ_1 y τ_3 en el estudio del agua. La línea punteada larga '-'-' se sitúa en el valor real de $\tau_3 = 1.86$ ns. La línea punteada corta '....' se sitúa en el valor real de $\tau_1 = 0.22$ ns. Los puntos unidos por la línea son los valores promedio de 5 repeticiones con los valores de Numero de coincidencias y σ donde se sitúa el punto.

Aquí se puede observar como la resolución igual a 0.20 nanosegundos es la más cercana al valor real, tanto para el valor del p-Ps como para el o-Ps, siendo más evidente para un número de cuentas de 1000000. Para un número de cuentas bajo y una resolución igual a 0.2 nanosegundos no se tiene mucha diferencia con el valor real, por lo que se estima que es mejor tener una buena resolución a tener un número de cuentas alto.

Capítulo 10

10. Resultados CRT

10.1. Resultados experimentales CRT

Los datos obtenidos al realizar las mediciones CRT se encuentran en la siguiente tabla, donde se usó la configuración de 180°, es decir, detectores enfrentados en modo coincidencias. Se tomaron 10^4 cuentas en cada medición con cada combinación de BIAS, threshold y rango de voltaje.

Tabla 17. Tabla de resultados obtenidos en el experimento CRT.

Threshold [mV]	BIAS = 30,2 [V]		BIAS = 31 [V]		BIAS = 32 [V]		
	Voltage range 0,5 [V]	Voltage range 1 [V]	Voltage range 0,5 [V]	Voltage range 1 [V]	Voltage range 0,5 [V]	Voltage range 1 [V]	Voltage range 2 [V]
	FWHM [ps]						
40	775,4	1103,58	609,34	877,38	503,46	644,55	740,98
50	932,51	1142,93	904,17	1282,73	660,84	804,68	847,06
60	938,38	1143,08	927,56	1427,49	654,75	938,92	1329,26
70	1044,96	785,34	891,6	958,96	766,83	1013,26	1373,87
80	1234,74	883,23	1007,8	1062,18	868,23	1139,44	1350,56
90	1118,06	926,509	1079,02	1067,58	849,76	1128,76	1574,05
100	1197,36	1163,04	1138,98	1154,24	1076,42	1067,37	1564,1

En la tabla se encuentran los valores obtenidos en la medición CRT para diferentes valores de voltaje BIAS, rango de voltaje y threshold. No se puso en la tabla los resultados del rango de voltaje 2 V para el BIAS de 30,2 y 31 V porque el ruido provocaba que la figura CRT que tiene la forma de una campana gaussiana tenga muchos picos que representan dicho ruido, provocando una malinterpretación de los valores FWHM.

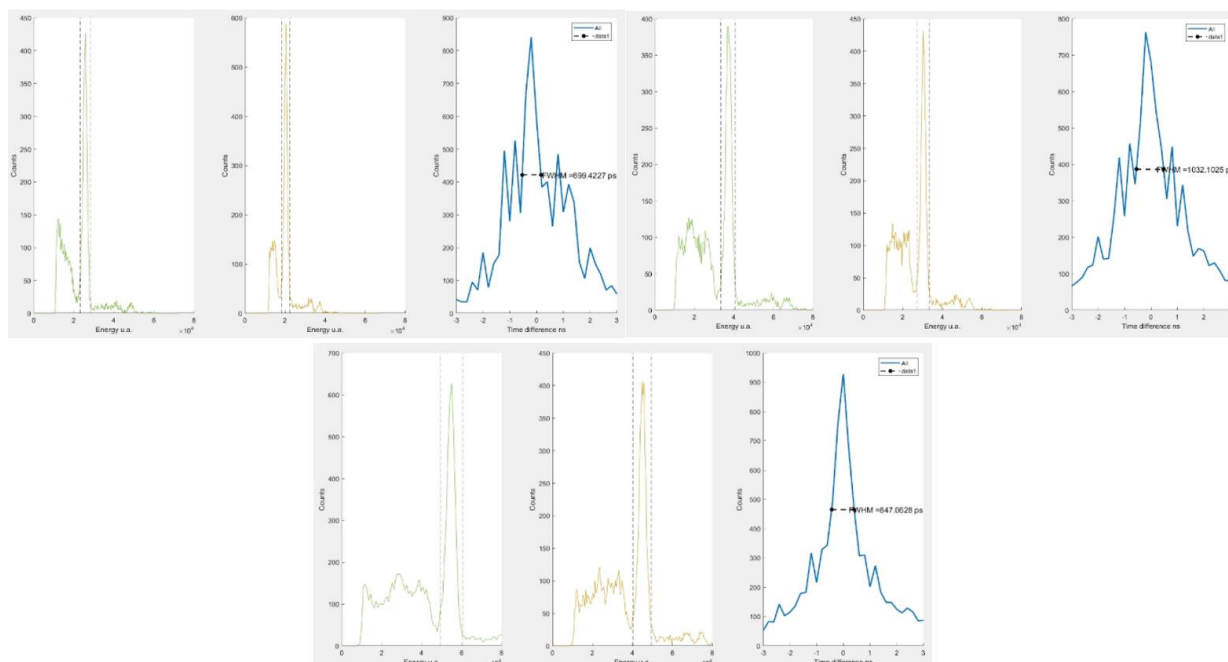


Ilustración 55. Ejemplos de espectros de tiempo CRT con ruido para rango de voltaje igual a 2V. Todos los espectros fueron medidos con un threshold de 50 mV. El primer espectro es para un BIAS=30,2V, segunda derecha BIAS=31V, tercero debajo BIAS=32V

En la tabla se ve que los valores mínimos de FWHM se encuentran en el BIAS igual a 32 V, y es donde se produjo menor ruido, esto se puede observar en las siguientes figuras que representan los valores mínimos para cada BIAS:

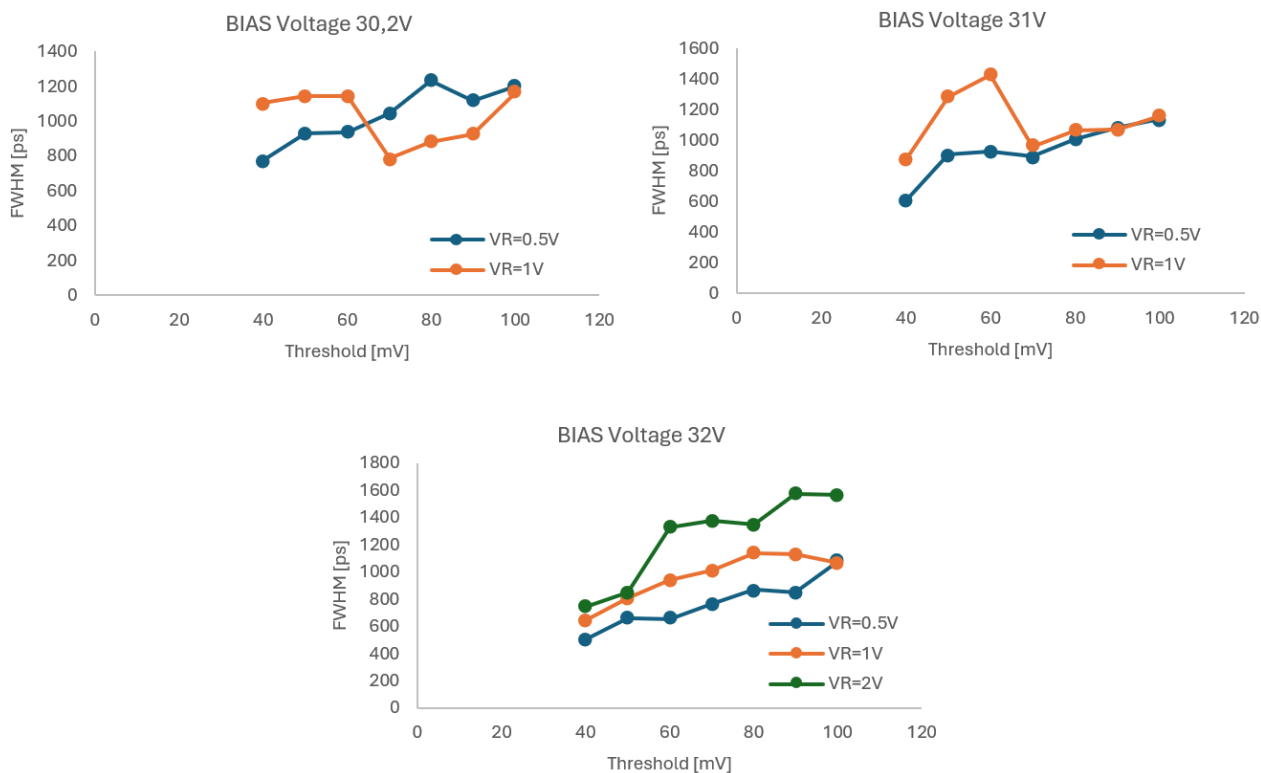


Ilustración 56. Resultados obtenidos en el experimento CRT para cada valor de BIAS

El valor mínimo de FWHM sin ruido se presenta en el voltaje BIAS igual a 32 V. Algo a destacar es el voltaje threshold igual a 70 mV, ya que los valores de FWHM tiene un valor bajo, cuando la tendencia claramente marca una subida con el aumento del threshold para un rango de voltaje igual a 1 V. No se tiene una explicación clara respecto al rompimiento de la tendencia. Esto solo ocurre para valores de BIAS igual a 30,2 y 31 V.

10.2. Espectros CRT obtenidos

En las siguientes figuras se observa espectros de diferencias de tiempo CRT para todos los BIAS, se presentan los gráficos del menor valor de threshold y el mayor a su lado, cada fila se corresponde al valor de rango de voltaje en orden ascendente, VR=0,5V, 1V y 2V:

10.2.1. BIAS 30,2V

En el siguiente conjunto de espectros se observa algunos resultados de las mediciones CRT. La primera fila se corresponde a rango de voltaje igual a 500 mV, la segunda fila se corresponde a 1 V y la tercera igual a 2 V. La primera columna de imágenes se corresponde al valor más bajo de threshold (40 mV) y la columna derecha se corresponde al valor más alto de threshold (100 mV)

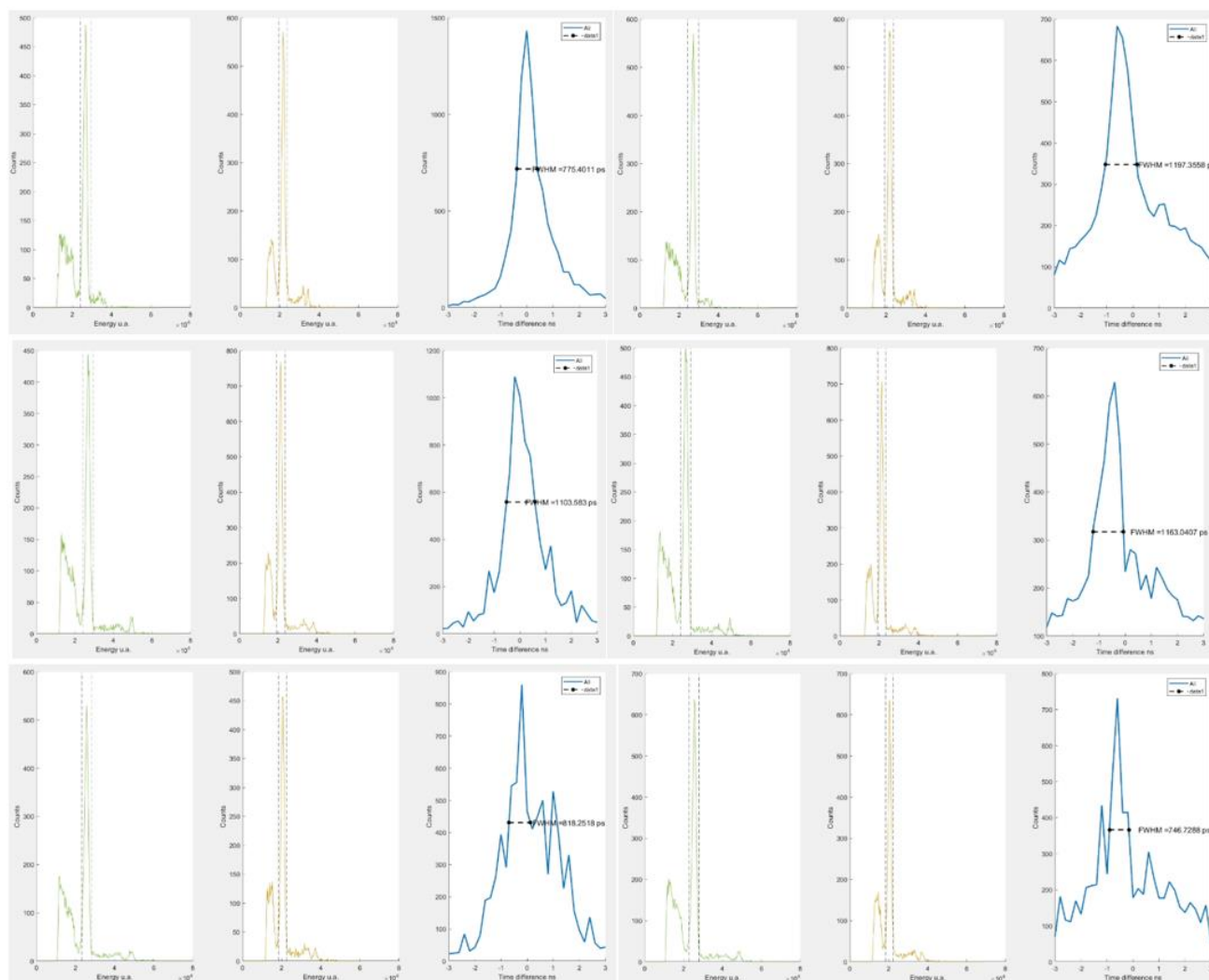


Ilustración 57. Ejemplos de espectros CRT para un BIAS de 30.2 V.

10.2.2. BIAS 31V

En el siguiente conjunto de espectros se observa algunos resultados de las mediciones CRT. La primera fila se corresponde a rango de voltaje igual a 500 mV, la segunda fila se corresponde a 1 V y la tercera igual a 2 V. La primera columna de imágenes se corresponde al valor más bajo de threshold (40 mV) y la columna derecha se corresponde al valor más alto de threshold (100 mV)

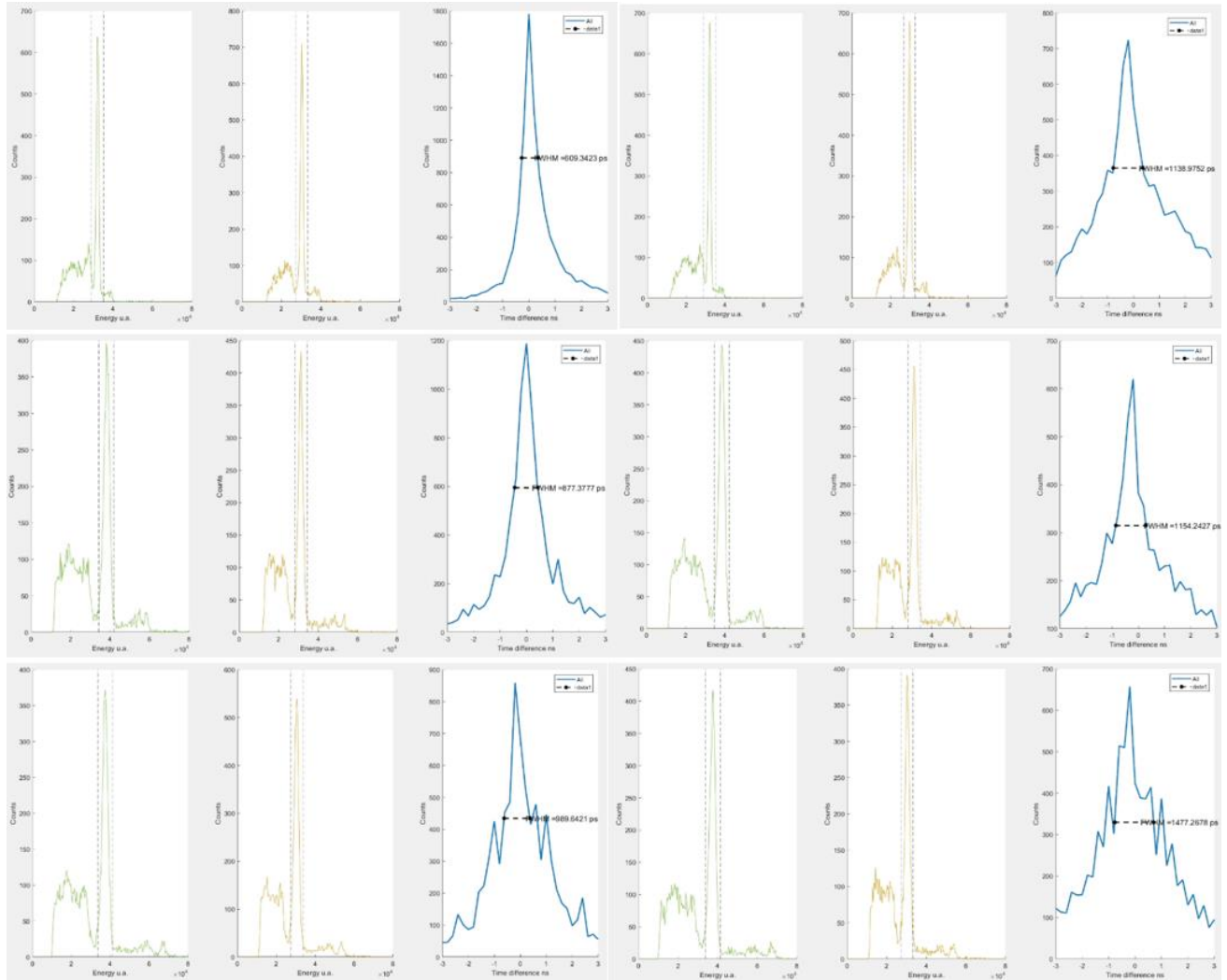


Ilustración 58. Ejemplos de espectros CRT para un BIAS de 31 V

10.2.3. BIAS 32 V

En el siguiente conjunto de espectros se observa algunos resultados de las mediciones CRT. La primera fila se corresponde a rango de voltaje igual a 500 mV, la segunda fila se corresponde a 1 V y la tercera igual a 2 V. La primera columna de imágenes se corresponde al valor más bajo de threshold (40 mV) y la columna derecha se corresponde al valor más alto de threshold (100 mV)

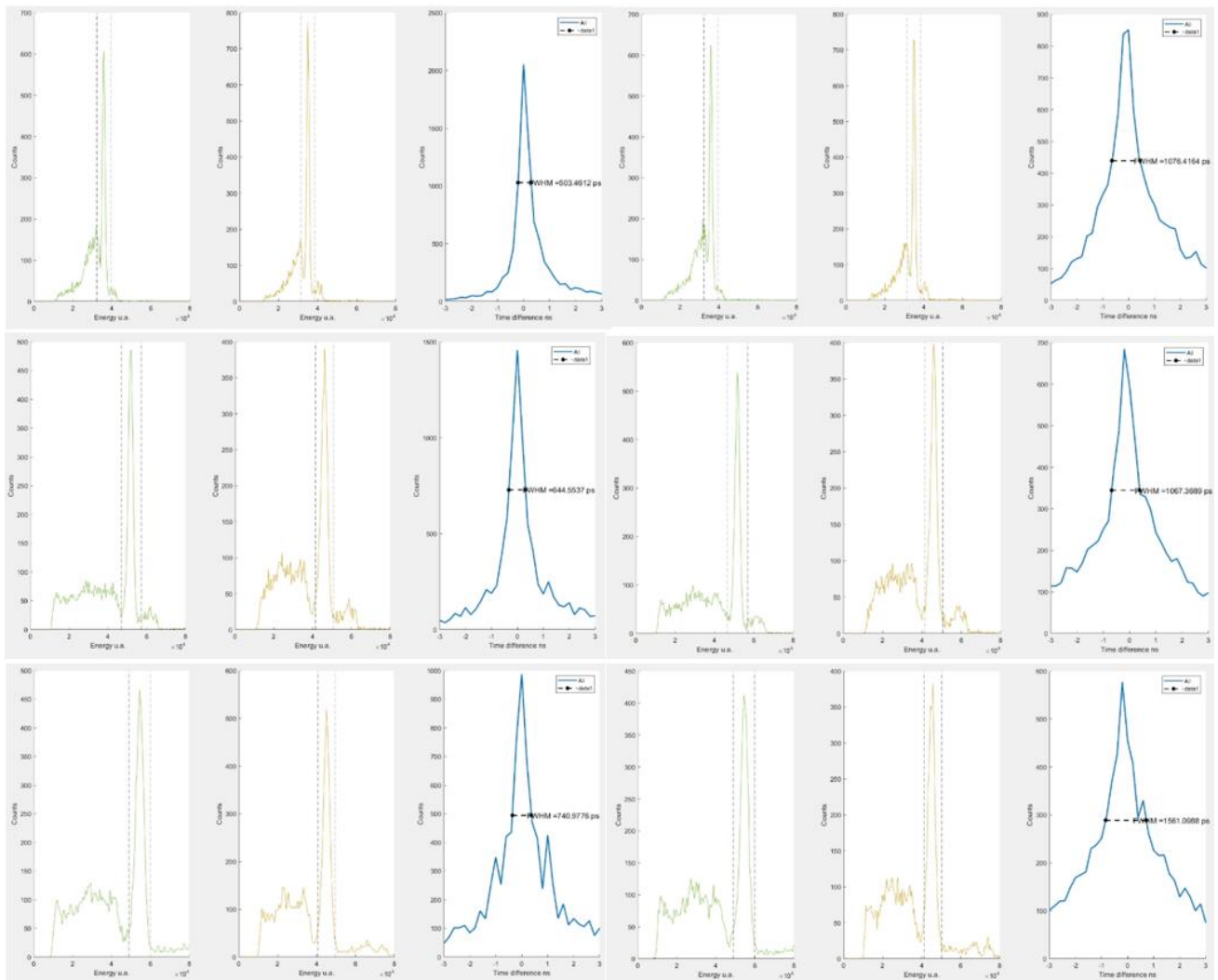


Ilustración 59. Ejemplos de espectros CRT para un BIAS de 32 V

Los valores de CRT con más ruido son los que tienen un voltaje range igual a 2 V

Capítulo 11

11. Resultados del análisis PALS sobre muestras con PicoScope series 6000

11.1. Resultados de calibración con cobre

11.1.1. Espectro de energía y de diferencia de tiempo

Se obtuvo el espectro al realizar la medición de cobre con un número de cuentas sin filtrar igual a 213490 y un número de cuentas filtradas igual a 44382. Se observaron 2 pendientes claras que forman el espectro como número mínimo de exponenciales de decaimiento:

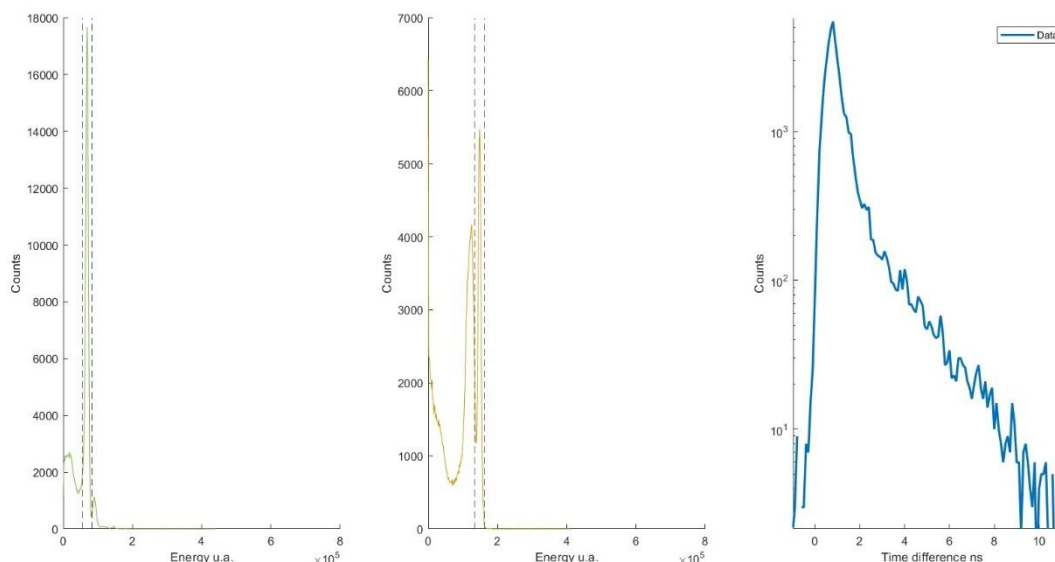


Ilustración 60. Espectro de energía y espectro de diferencia de tiempos obtenidos en el estudio de cobre

11.1.2. Ajuste de espectro de diferencia de tiempo

El espectro medido se ajustó a 3 exponenciales de decaimiento, replicando lo visto en la parte de simulaciones, donde una exponencial contiene la información de la vida media del positrón en el bulk de cobre y los 2 restantes se les atribuye a contribuciones de la fuente. Uno podría pensar que tal vez existe otra contribución que no sea de la fuente o del cobre que no se está tomando en cuenta ya que solamente se está considerando 3 exponenciales de decaimiento; esto se puede refutar haciendo el ajuste a 4 exponenciales.

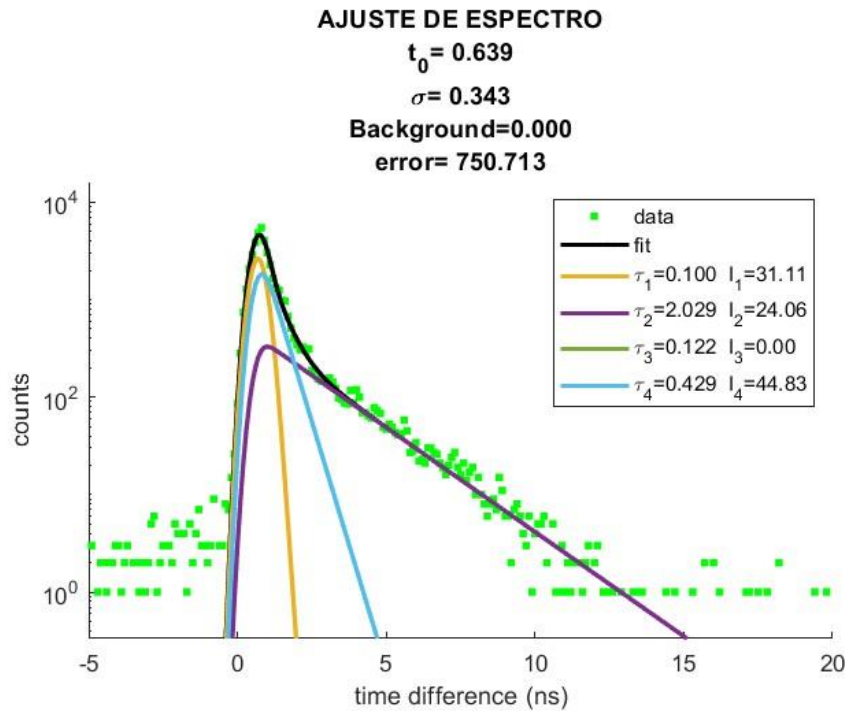


Ilustración 61. Espectro de diferencia de tiempos de cobre ajustado a 4 exponenciales.

Se puede observar 3 pendientes representadas con sus respectivas intensidades, siendo la 4ta exponencial de intensidad igual a cero, este se repitió 10 veces obteniendo el mismo resultado, por lo que el ajuste a 3 exponenciales es suficiente para extraer las vidas medias.

El espectro ajustado a 3 exponenciales se puede interpretar en base al modelo de gap de ore, donde establece que en metales como el cobre este gap se hace tan estrecho que prácticamente es nulo, por lo que la formación de positronio es improbable, y también se tiene el modelo trapping, donde se establece que la vida media presente en los espectros se corresponde a la vida media del positrón en el bulk o en los defectos del material. El resto de las vidas medias se corresponderían a la fuente y soporte de plástico que sostiene a la muestra de cobre y fuente, siendo esta la responsable de la aparición de la vida media más grande, correspondiente a la formación del positronio, en particular, a la formación de o-Ps. La vida media restante se correspondería a la aniquilación libre del positrón en la fuente.

Se procedió a realizar el primer ajuste sin parámetros fijos, y al igual que en el procedimiento de las simulaciones, se hizo 10 repeticiones de ajuste para el espectro. A continuación, se muestran algunos espectros obtenidos:

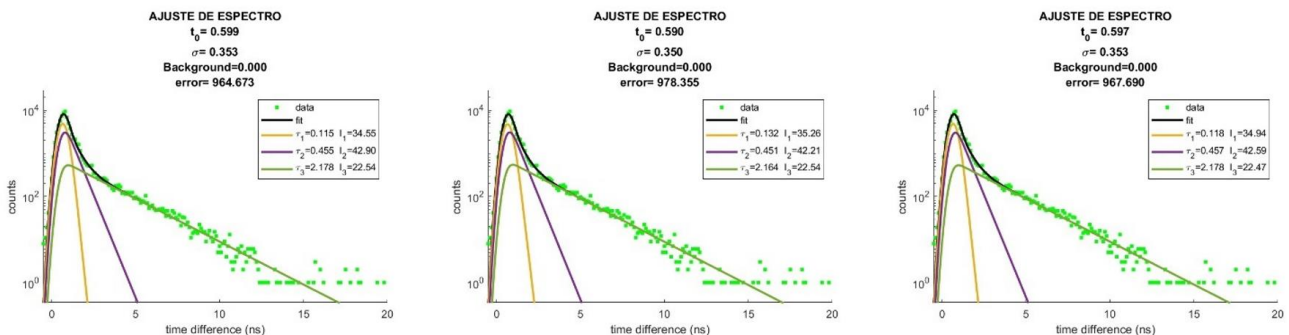


Ilustración 62. Tres ejemplos de repeticiones realizadas en el ajuste del espectro de cobre sin parámetros fijos

Los resultados del promedio de las 10 repeticiones se muestran a continuación en las siguientes figuras:

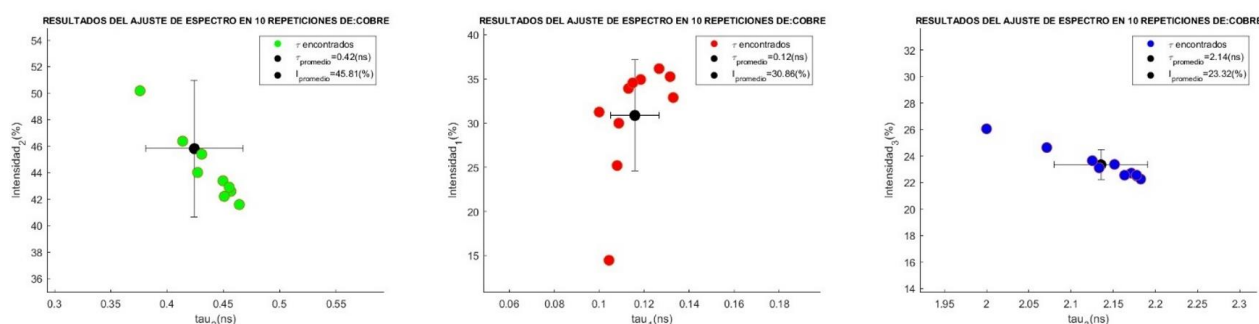


Ilustración 63. Valores de vida media del ajuste de espectro del cobre en 10 repeticiones sin parámetros fijos.

En las siguientes figuras se muestra los valores obtenidos de resolución y tiempo inicial y el valor promedio para estos 2 parámetros:

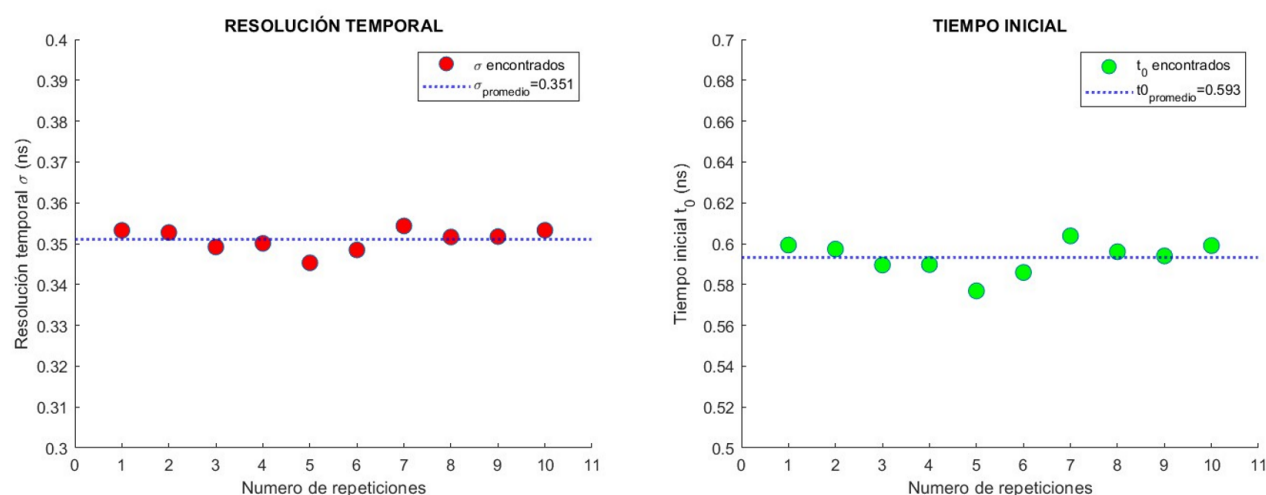


Ilustración 64. Valores de resolución y tiempo inicial en 10 repeticiones obtenidas en el ajuste del espectro de cobre

En la siguiente tabla vemos los resultados con la incertidumbre en las repeticiones:

Tabla 18. Resultados promedio del ajuste de espectro de cobre sin parámetros fijos

Cobre								
Ajustado	τ_1 [ns]	τ_2 [ns]	τ_3 [ns]	I_1 [%]	I_2 [%]	I_3 [%]	σ [ns]	t_0 [ns]
	0.12	0.42	2.14	30.9	45.8	23.3	0.351	0.593
	± 0.01	± 0.04	± 0.06	± 6.27	± 5.15	± 1.13	± 0.003	± 0.008

Con estos valores obtenemos una media de $t_0 = 0.593$ ns y $\sigma = 0.351$ ns. Estos valores encontrados se fijaron para la siguiente tanda de ejecución del script fit_simulacion2.

11.1.3. Ajuste del espectro de cobre con 3 parámetros fijos

Se procedió a realizar el ajuste con 3 parámetros fijos que son τ_1 , t_0 y σ , se observan algunos espectros de ejemplo obtenidos en el ajuste:

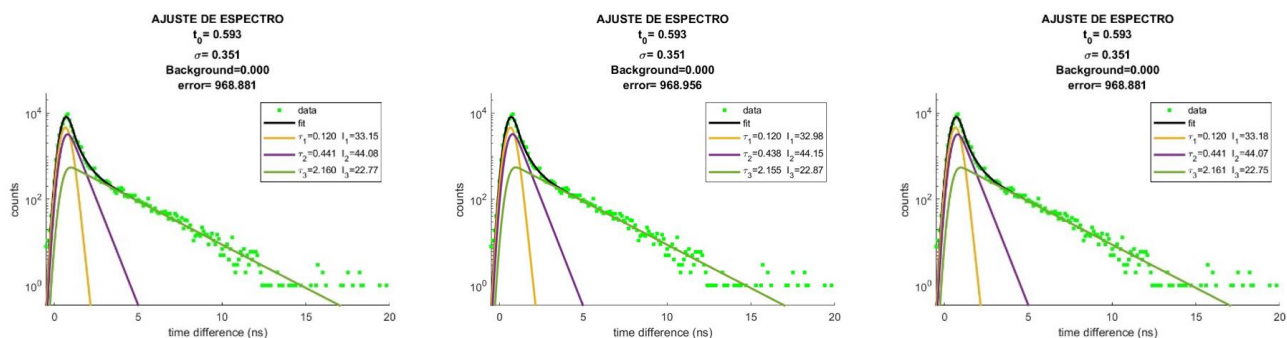


Ilustración 65. Tres ejemplos del ajuste del espectro de cobre con 3 parámetros fijos

Los resultados obtenidos se pueden visualizar en la siguiente figura, donde se observan valores próximos entre si:

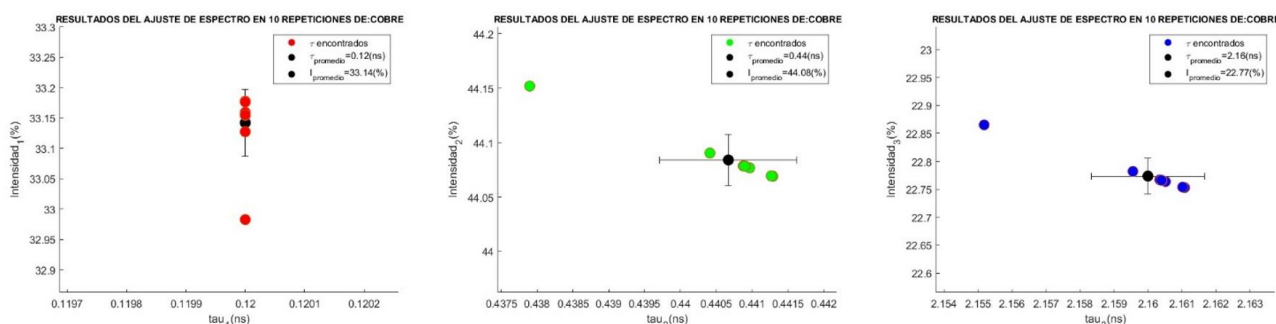


Ilustración 66. Valores de vida media obtenidas en el ajuste del espectro de cobre en 10 repeticiones con 3 parámetros fijos

Tabla 19. Resultados promedio del ajuste de espectro de cobre con 3 parámetros fijos (pintados en celeste)

Cobre								
	τ_1 [ns]	τ_2 [ns]	τ_3 [ns]	I_1 [%]	I_2 [%]	I_3 [%]	σ [ns]	t_0 [ns]
Ajustado	0.12	0.441 ± 0.001	2.160 ± 0.002	33.14 ± 0.06	44.08 ± 0.02	22.77 ± 0.02	0.351	0.593

Por lo que los valores de vida media que son contribuciones de la fuente o del soporte de la muestra τ_2 y τ_3 están cercanos a los valores obtenidos en la literatura. Se procedió a verificar si estos se encuentran dentro de los espectros medidos en agua y teflón.

11.2. Teflón

Este material al ser un polímero se puede explicar que se forma p-Ps y o-Ps, esto se puede observar en el espectro ya que se tiene más de una pendiente. El número de cuentas obtenido es de 184673, y las filtradas es igual a 26356 cuentas.

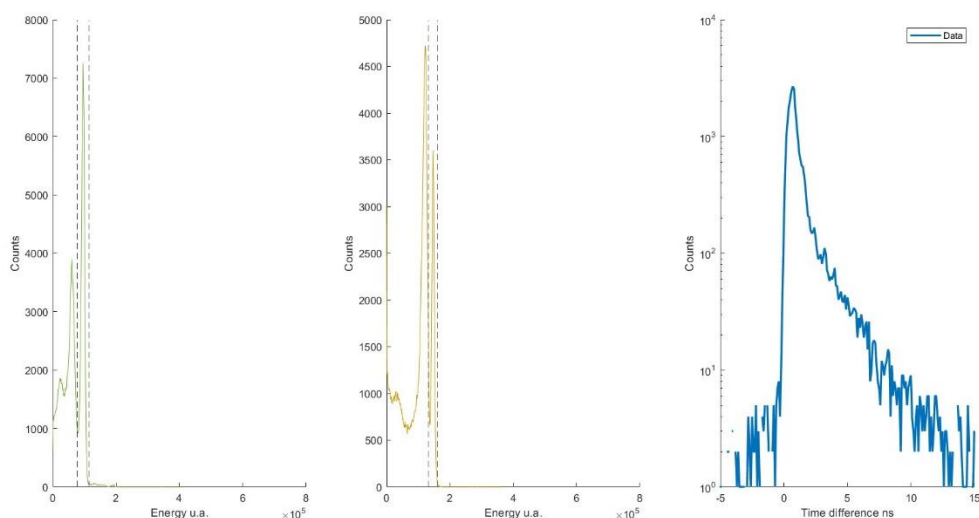


Ilustración 67. Espectro de energía y espectro de diferencia de tiempos obtenidos en el estudio de teflón

11.2.1. Ajuste de espectro de diferencia de tiempo

El ajuste se realizó a 4 exponenciales ya que el teflón al igual que los líquidos permite la formación de positronio, y este se puede aniquilar en los estados p-Ps, free annihilation y o-Ps. La resolución se fijó al valor determinado en la calibración, el resto de parámetros se dejaron libres, incluidos el tiempo inicial. Se consideraron los siguientes parámetros iniciales:

Tabla 20. Parámetros iniciales de ajuste del espectro de agua

Teflón										
	I_1/τ_1	I_2/τ_2	I_3/τ_3	I_4/τ_4	$1/\tau_1$	$1/\tau_2$	$1/\tau_3$	$1/\tau_4$	σ	t_0
Param_best	a(1)	a(1)	a(1)	a(1)	1/0.1	1/1	1/2	1/4	0.5	0.5
Param_low	0	0	0	0	1/1	1/1	1/2	1/4	0.351	0
Param_max	0	0	0	0	1/0.1	1/0.1	1/1	1/1	0.351	1
Param_range	a(1)	a(1)	a(1)	a(1)	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.5

Los límites del ajuste en el eje X y Y fueron:

Tabla 21. Límites del ajuste del espectro de teflón

	Eje X [ns]	Eje Y [cuentas]
Límite superior	12	10^5
Límite inferior	-0.5	10

Estos límites se escogieron con el fin de eliminar la mayor cantidad de ruido del espectro. Se procedió a realizar el ajuste sin parámetros fijos exceptuando a la resolución, también se hizo 10 repeticiones de ajuste para el espectro. A continuación, se muestran algunos espectros obtenidos:

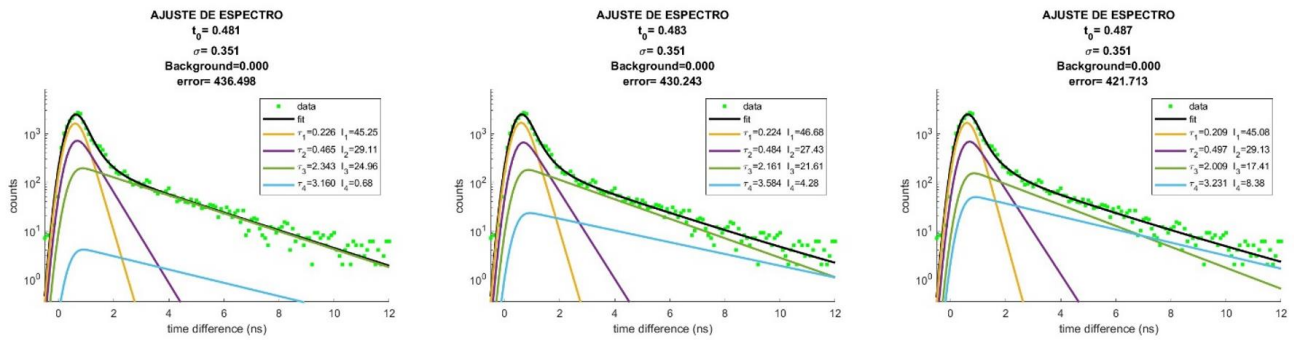


Ilustración 68. Tres ejemplos de ajuste de espectro de agua con 4 exponenciales de decaimiento y resolución fija

Los resultados se muestran en las siguientes gráficas:

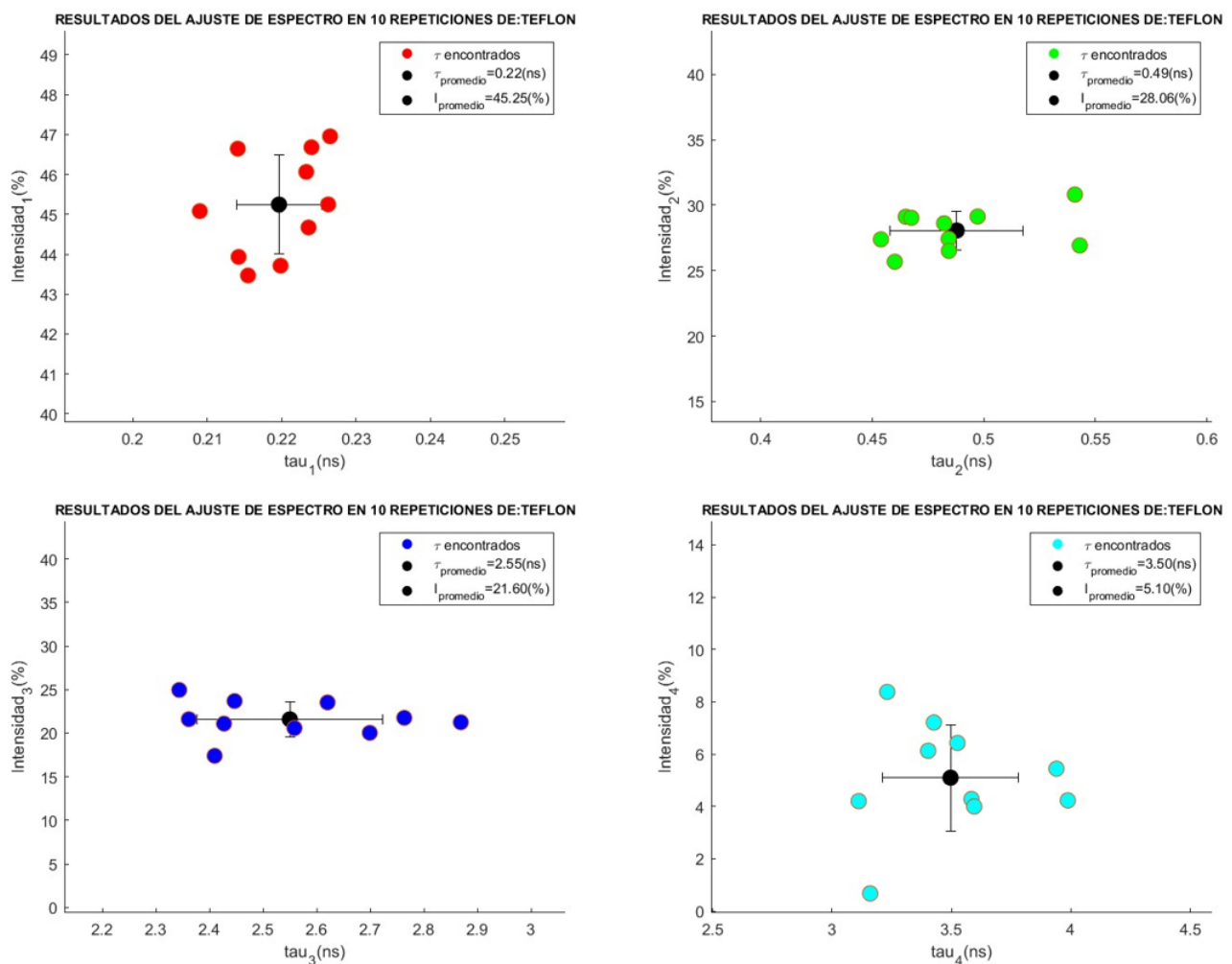


Ilustración 69. Valores de vida media obtenidas en el ajuste del espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija

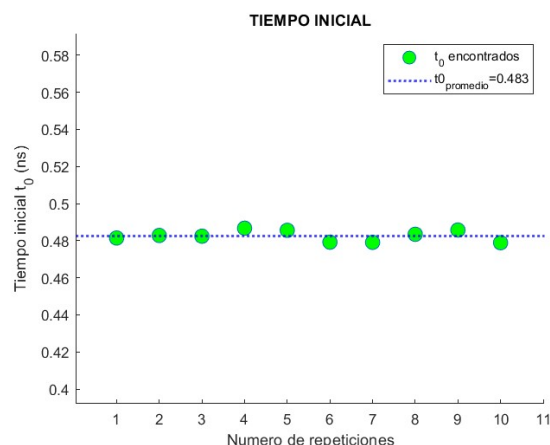


Ilustración 70. Valores de tiempo inicial obtenidas en el ajuste del espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija

Los resultados con sus respectivas incertidumbres en 10 repeticiones del ajuste del mismo espectro están reflejados en la siguiente tabla:

Tabla 22. Resultados promedio del ajuste de espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija

Teflón										
	$\tau_1[ns]$	$\tau_2[ns]$	$\tau_3[ns]$	$\tau_4[ns]$	$I_1[\%]$	$I_2[\%]$	$I_3[\%]$	$I_4[\%]$	$\sigma[ns]$	$t_0[ns]$
Ajustado	0.22 ± 0.01	0.49 ± 0.03	2.6 ± 0.2	3.5 ± 0.3	45.2 ± 1.2	28.1 ± 1.5	21.6 ± 2.0	5.1 ± 2.0	0.351	0.482 ± 0.003

11.3. Agua

11.3.1. Espectro de energía y de diferencia de tiempo

El espectro de energía y de diferencia de tiempos es la siguiente, donde el número de cuentas obtenidos sin filtrar fueron 981692 cuentas, y las filtradas fueron 150883 cuentas.

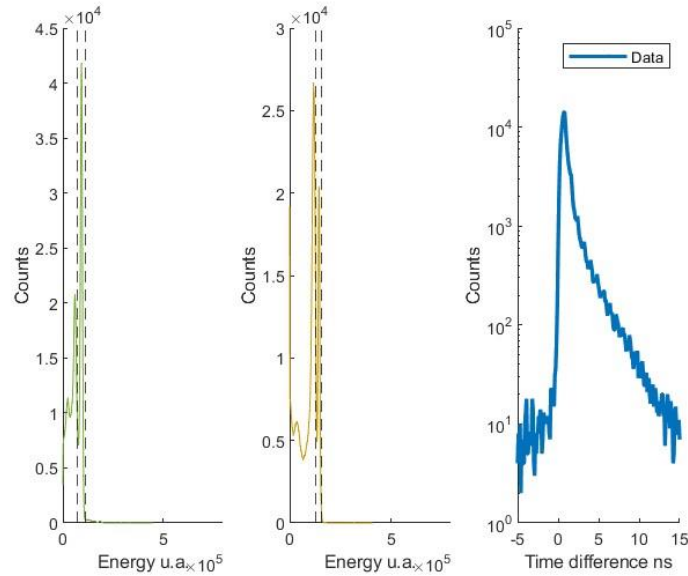


Ilustración 71. Espectro de energía y de diferencia de tiempo. Espectro verde tomado por el detector A y espectro amarillo tomado por el detector B. Se corresponden a los picos de 511 keV y 1275 keV respectivamente. Espectro azul de diferencia de tiempo de agua

En este medio se conoce el como se forma el positronio, donde la formación del para-positronio y del orto-positronio están aseguradas, esto se puede observar en el espectro donde se ve una curvatura a partir de 3 nanosegundos.

11.3.2. Ajuste de espectro de diferencia de tiempo

El ajuste se realizó a 4 exponenciales ya que en el agua el positronio puede aniquilarse en los estados p-Ps, free annihilation y o-Ps, por lo que se dejó el último parámetro de vida media para la contribución de la fuente. La resolución se fijó al valor determinado en la calibración, el resto de parámetros se dejaron libres, incluidos el tiempo inicial. Se consideraron los siguientes parámetros iniciales:

Tabla 23. Parámetros iniciales de ajuste del espectro de agua

Agua										
	I_1/τ_1	I_2/τ_2	I_3/τ_3	I_4/τ_4	$1/\tau_1$	$1/\tau_2$	$1/\tau_3$	$1/\tau_4$	σ	t_0
Param_best	a(1)	a(1)	a(1)	a(1)	1/0.1	1/1	1/2	1/4	0.5	0.5
Param_low	0	0	0	0	1/1	1/1	1/2	1/4	0.351	0
Param_max	0	0	0	0	1/0.1	1/0.1	1/1	1/1	0.351	1
Param_range	a(1)	a(1)	a(1)	a(1)	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.5

Los límites del ajuste en el eje X y Y fueron:

Tabla 24. Límites del ajuste del espectro de agua

	Eje X [ns]	Eje Y [cuentas]
Límite superior	15	10^5
Límite inferior	-0.5	10

Se procedió a realizar el ajuste sin parámetros fijos exceptuando a la resolución, también se hizo 10 repeticiones de ajuste para el espectro. A continuación, se muestran algunos espectros obtenidos:

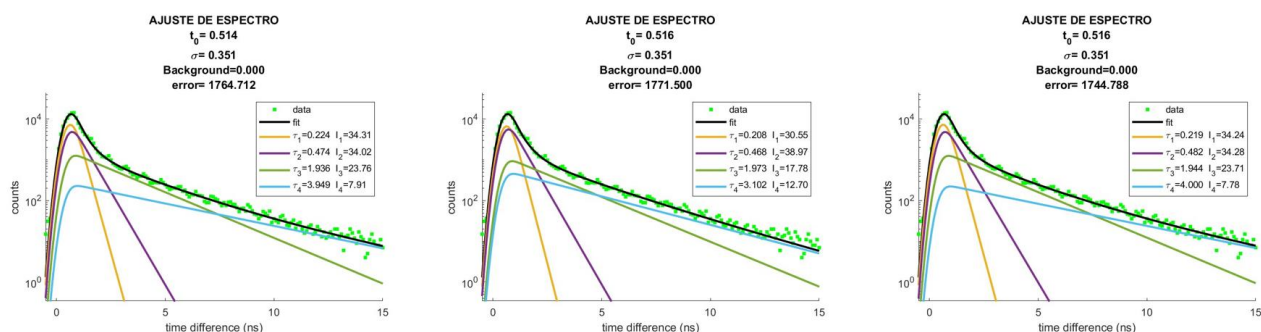


Ilustración 72. Tres ejemplos de ajuste de espectro de agua con 4 exponenciales de decaimiento y resolución fija

Los resultados se muestran en las siguientes gráficas:

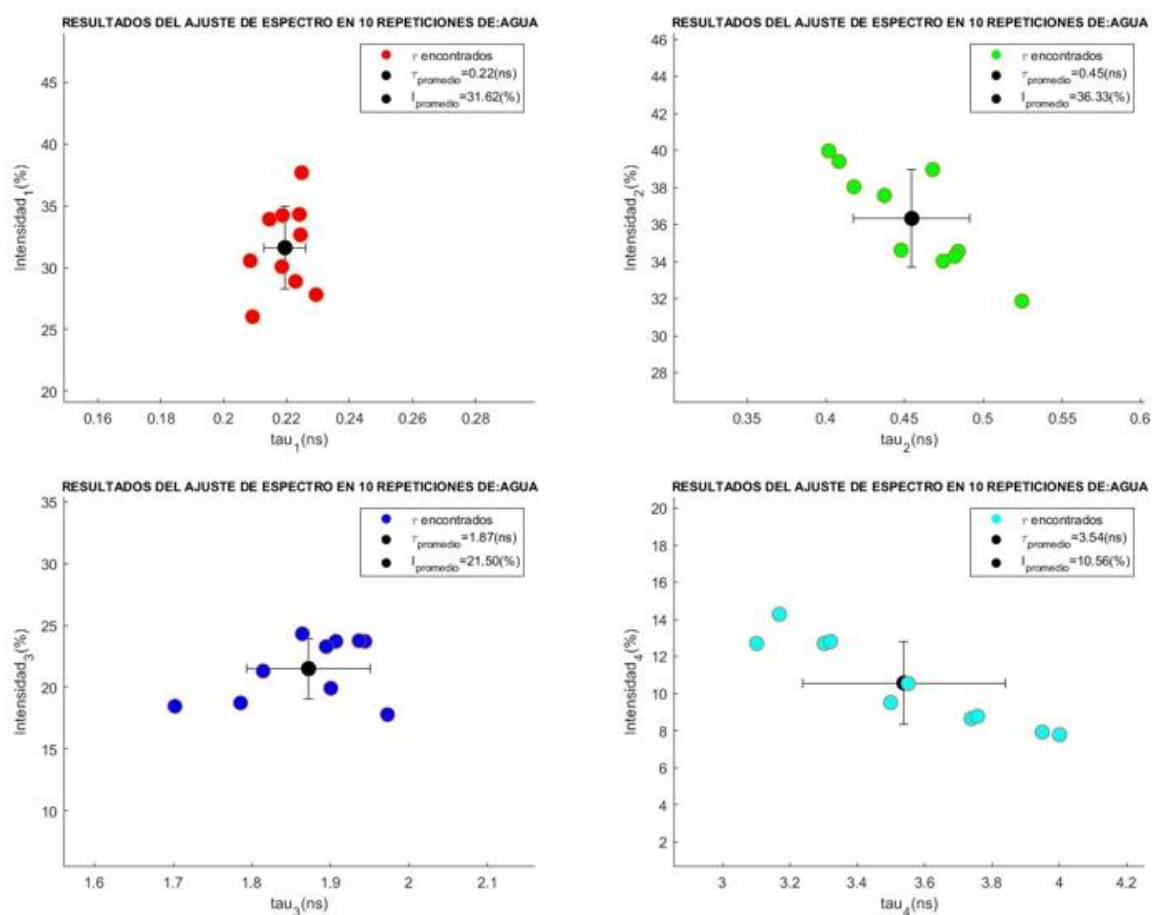


Ilustración 73. Valores de vida media obtenidas en el ajuste del espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija

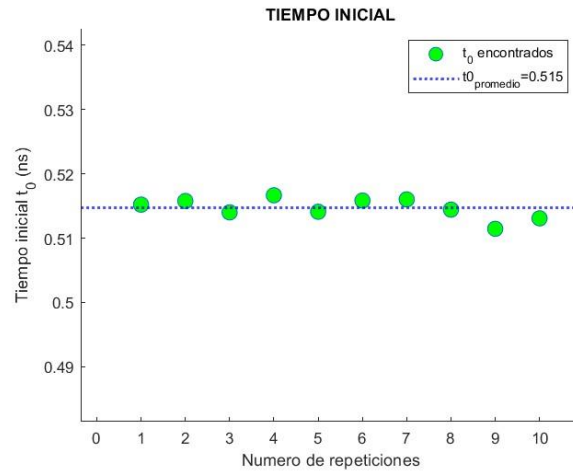


Ilustración 74. Valores de tiempo inicial obtenidas en el ajuste del espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija

Los resultados con sus respectivas incertidumbres en 10 repeticiones del ajuste del mismo espectro están reflejados en la siguiente tabla:

Tabla 25. Resultados promedio del ajuste de espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija

Agua										
	$\tau_1[ns]$	$\tau_2[ns]$	$\tau_3[ns]$	$\tau_4[ns]$	$I_1[\%]$	$I_2[\%]$	$I_3[\%]$	$I_4[\%]$	$\sigma[ns]$	$t_0[ns]$
Ajustado	0.22 ± 0.01	0.45 ± 0.04	1.87 ± 0.08	3.54 ± 0.30	31.6 ± 3.38	36.3 ± 2.64	21.5 ± 2.44	10.6 ± 2.25	0.351	0.515 ± 0.002

Capítulo 12

12. Resultados del análisis PALS sobre muestras con PicoScope series 2000

12.1. Resultados calibración monedas

12.1.1. Espectro de energía y de diferencia de tiempo

Se obtuvo el espectro al realizar la medición de un par de monedas de 20 céntimos, con un número de cuentas sin filtrar igual a 173655 y un numero de cuentas filtradas igual a 37099. Se observaron hasta 2 pendientes que forman el espectro como número mínimo de exponenciales de decaimiento:

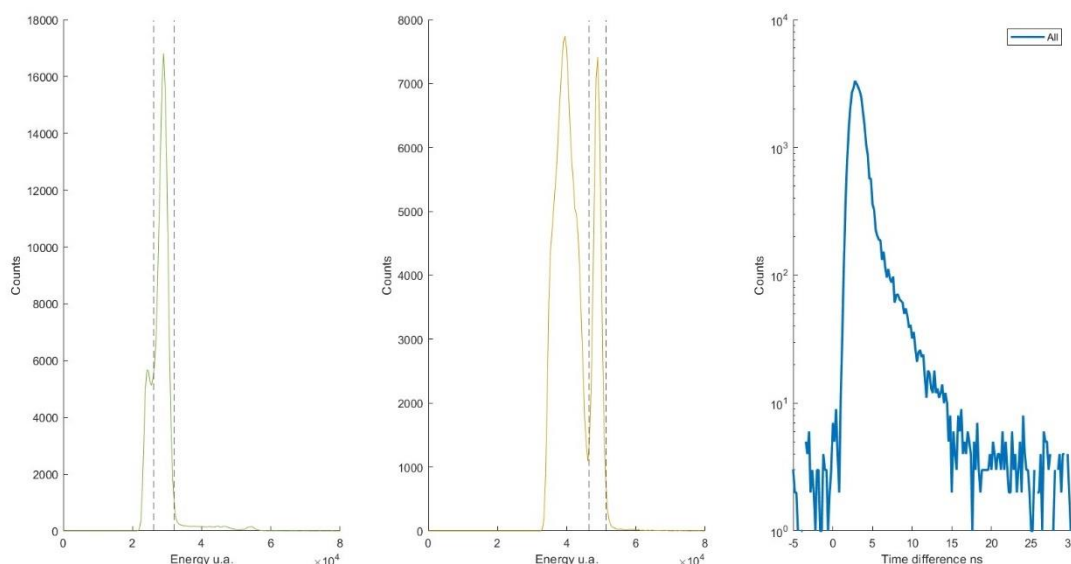


Ilustración 75. Espectro de energía y espectro de diferencia de tiempos obtenidos en el estudio de moneda de 20 céntimos

12.1.2. Ajuste de espectro de diferencia de tiempo

El espectro obtenido se ajustó a 3 exponenciales ya que 4 exponenciales son demasiados como vimos en el ajuste del cobre. Además, en este espectro consideramos el fondo que tiene un valor medio entre los límites del eje X entre 20 y 50 ns.

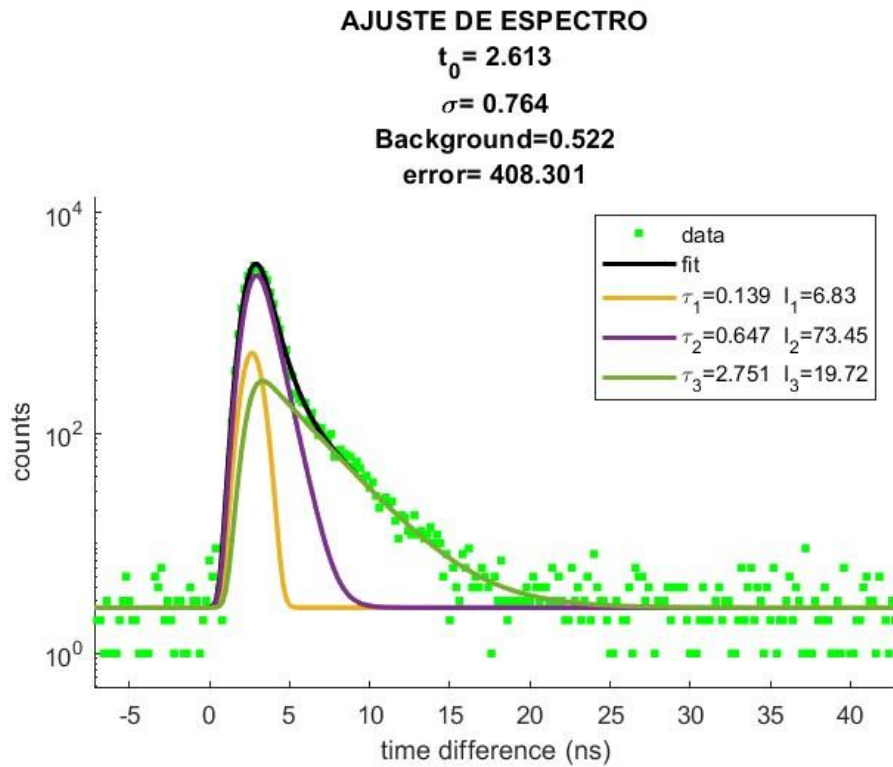


Ilustración 76. Espectro de diferencia de tiempos de monedas ajustado a 3 exponenciales.

Este espectro contiene información relevante, ya que se observa que el tiempo inicial es mucho mayor al espectro de cobre, lo mismo ocurre con la resolución ya que es el doble que el registrado en el estudio del cobre, esto es debido al osciloscopio usado. Se procedió a realizar el primer ajuste sin parámetros fijos, y al igual que en el procedimiento de las simulaciones, se hizo 10 repeticiones de ajuste para el espectro.

Los resultados del promedio de las 10 repeticiones se muestran a continuación en las siguientes figuras:

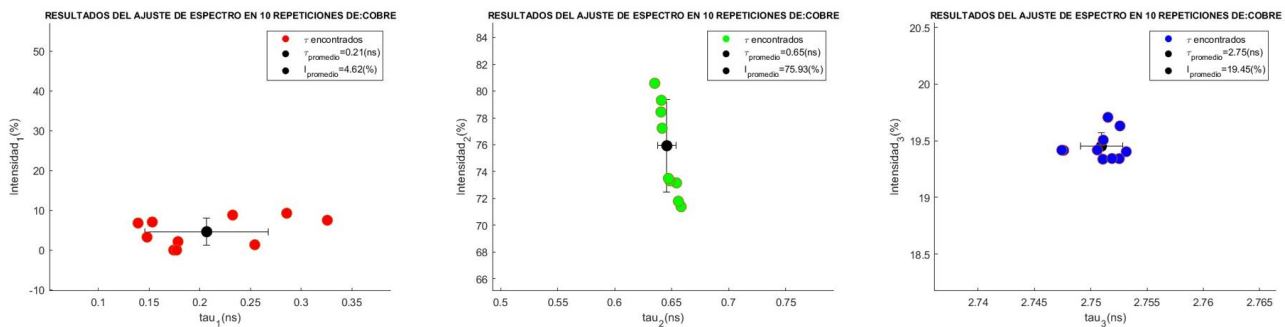


Ilustración 77. Valores de vida media del ajuste de espectro de las monedas en 10 repeticiones sin parámetros fijos.

En las siguientes figuras se muestra los valores obtenidos de resolución y tiempo inicial y el valor promedio para estos 2 parámetros:

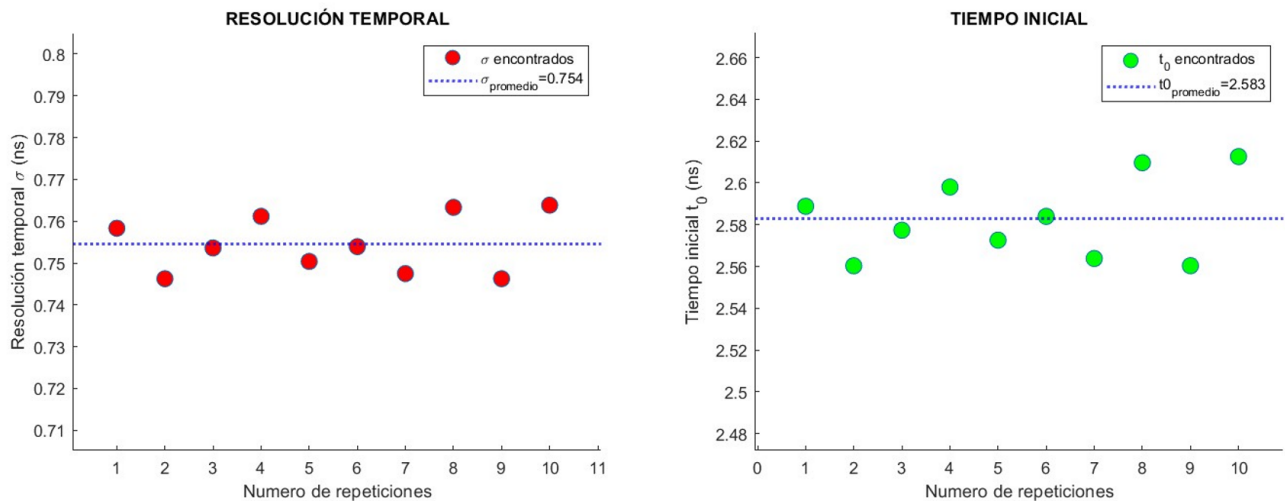


Ilustración 78. Valores de resolución y tiempo inicial en 10 repeticiones obtenidas en el ajuste del espectro de monedas

En la siguiente tabla vemos los resultados con la incertidumbre en las repeticiones:

Tabla 26. Resultados promedio del ajuste de espectro de monedas sin parámetros fijos

Monedas								
Ajustado	τ_1 [ns]	τ_2 [ns]	τ_3 [ns]	I_1 [%]	I_2 [%]	I_3 [%]	σ [ns]	t_0 [ns]
	0.21	0.65	2.751	$4.6 \pm$	$75.9 \pm$	$19.4 \pm$	0.75	2.58
	± 0.06	± 0.01	± 0.002	3.5	3.5	0.1	± 0.01	± 0.02

Con estos valores obtenemos una media de $t_0 = 2.58 \text{ ns}$ y $\sigma = 0.75 \text{ ns}$. Estos valores encontrados se fijaron para la siguiente tanda de ejecución del script fit_simulacion2.

12.1.3. Ajuste del espectro de monedas con 2 parámetros fijos

Se procedió a realizar el ajuste con 2 parámetros fijos que son t_0 y σ , esto se hizo debido a que la vida media más pequeña no es fiable, en varias medidas se obtiene una intensidad muy baja por lo que no se puede usar como parámetro fijo.

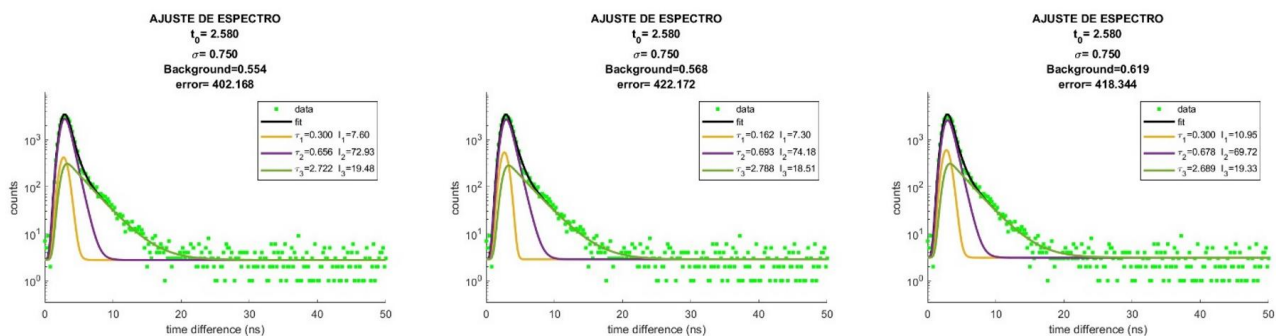


Ilustración 79. Tres ejemplos del ajuste del espectro de monedas con 2 parámetros fijos

Los resultados obtenidos se pueden visualizar en la siguiente figura, donde se observan valores próximos entre sí:

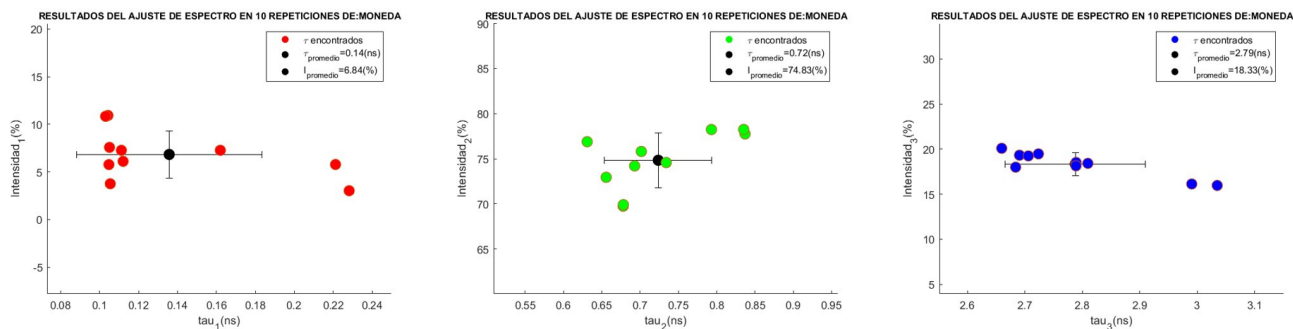


Ilustración 80. Valores de vida media obtenidas en el ajuste del espectro de monedas en 10 repeticiones con 2 parámetros fijos

Tabla 27. Resultados promedio del ajuste de espectro de monedas con 2 parámetros fijos (pintados en celeste)

Cobre								
	τ_1 [ns]	τ_2 [ns]	τ_3 [ns]	I_1 [%]	I_2 [%]	I_3 [%]	σ [ns]	t_0 [ns]
Ajustado	0.14 ± 0.05	0.72 ± 0.07	2.79 ± 0.12	6.8 ± 2.5	74.8 $\pm$ 3.0	18.3 $\pm$ 1.3	0.75	2.58

Por lo que los valores de vida media que son contribuciones de la fuente o del soporte de la muestra τ_2 y τ_3 están cercanos a los valores obtenidos en la literatura. Se procedió a verificar si estos se encuentran dentro de los espectros medidos en agua y teflón.

12.2. Agua

12.2.1. Espectro de energía y de diferencia de tiempo

El espectro de energía y de diferencia de tiempos es la siguiente, donde el número de cuentas obtenidos sin filtrar fueron 299898 cuentas, y las filtradas fueron 51322 cuentas.

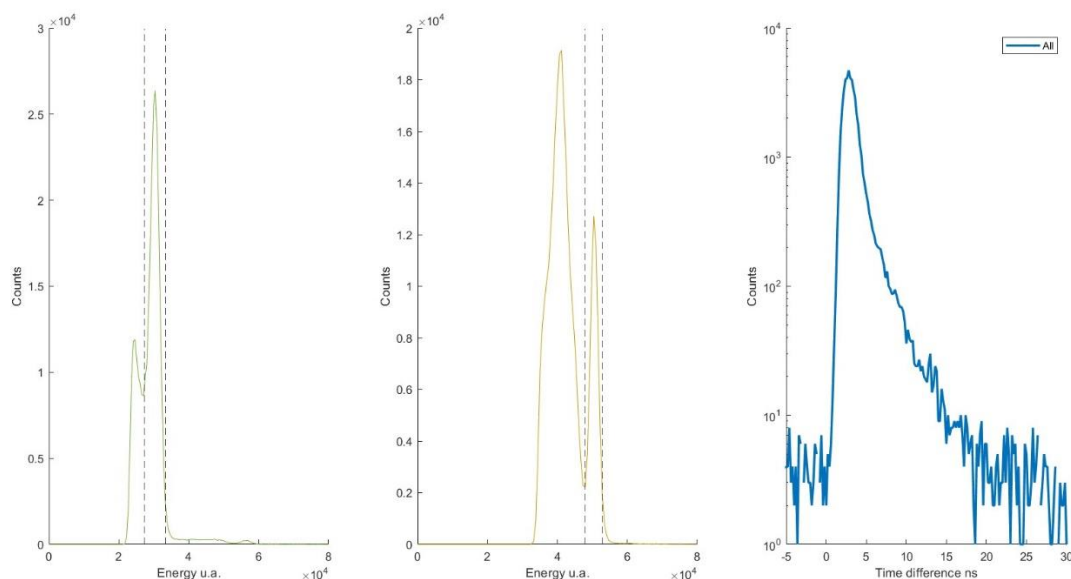


Ilustración 81. Espectro de energía y de diferencia de tiempo de muestra de agua. Espectro verde tomado por el detector A y espectro amarillo tomado por el detector B. Se corresponden a los picos de 511 keV y 1275 keV respectivamente. Espectro azul de diferencia de tiempo de agua

Vemos que con el osciloscopio series 2000 no se muestra claramente más de dos pendientes, por lo que realizar un ajuste es más dificultoso.

12.2.2. Ajuste de espectro de diferencia de tiempo

El ajuste se realizó a 4 exponenciales al igual que en los experimentos con el osciloscopio series 6000. En el espectro se debería observar las formas en las que se aniquila el Ps, es decir p-Ps, free annihilation y o-Ps,. La resolución se fijó al valor determinado en la calibración, el resto de los parámetros se dejaron libres, incluidos el tiempo inicial. Se consideraron los siguientes parámetros iniciales:

Tabla 28. Parámetros iniciales de ajuste del espectro de agua, con resolución fija (azul)

Agua										
	I_1/τ_1	I_2/τ_2	I_3/τ_3	I_4/τ_4	$1/\tau_1$	$1/\tau_2$	$1/\tau_3$	$1/\tau_4$	σ	t_0
Param_best	a(1)	a(1)	a(1)	a(1)	1/0.1	1/1	1/2	1/4	0.5	0.5
Param_low	0	0	0	0	1/1	1/1	1/2	1/4	0.75	0
Param_max	0	0	0	0	1/0.1	1/0.1	1/1	1/1	0.75	1
Param_range	a(1)	a(1)	a(1)	a(1)	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.5

Los límites del ajuste en el eje X y Y fueron:

Tabla 29. Límites del ajuste del espectro de agua

	Eje X [ns]	Eje Y [cuentas]
Límite superior	50	10^4
Límite inferior	0	1

Se procedió a realizar el ajuste sin parámetros fijos exceptuando a la resolución, también se hizo 10 repeticiones de ajuste para el espectro. A continuación, se muestran algunos espectros obtenidos:

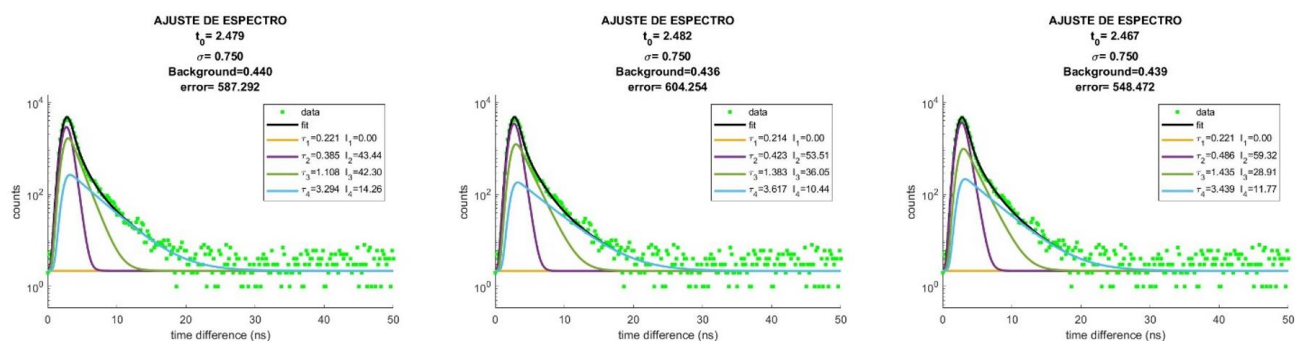


Ilustración 82. Tres ejemplos de ajuste de espectro de agua con 4 exponenciales de decaimiento y resolución fija

Los resultados se muestran en las siguientes gráficas:

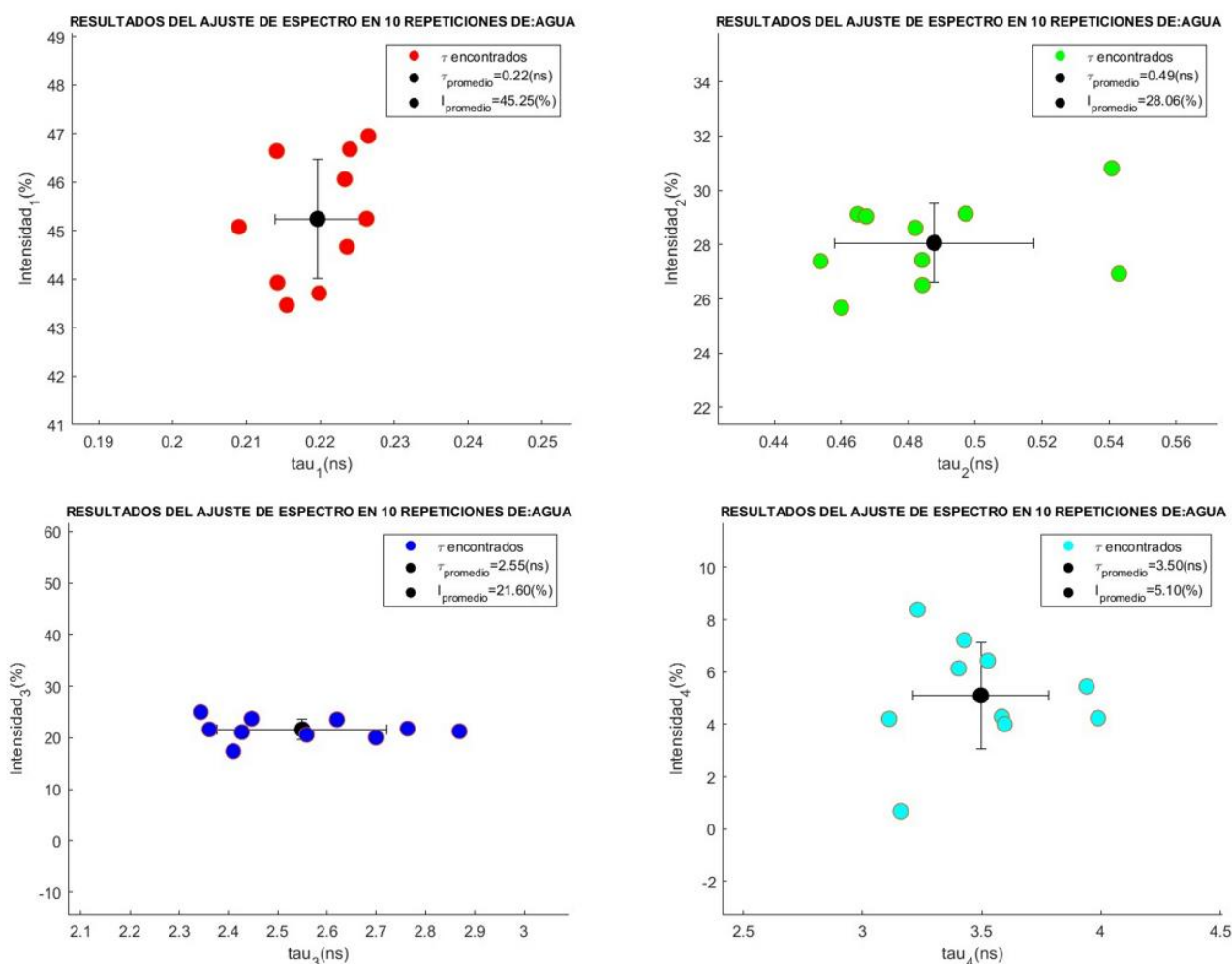


Ilustración 83. Valores de vida media obtenidas en el ajuste del espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija

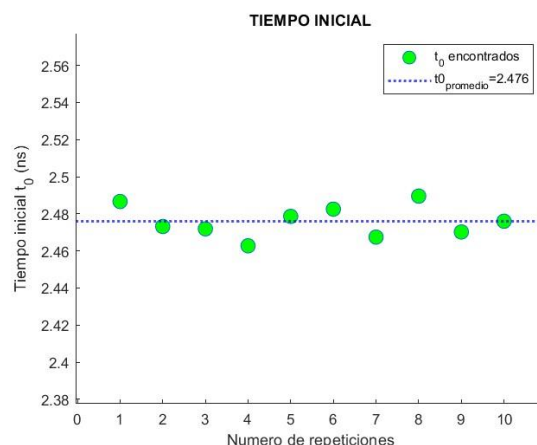


Ilustración 84. Valores de tiempo inicial obtenidas en el ajuste del espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija

Los resultados con sus respectivas incertidumbres en 10 repeticiones del ajuste del mismo espectro están reflejados en la siguiente tabla:

Tabla 30. Resultados promedio del ajuste de espectro de agua en 10 repeticiones con resolución fija

Agua										
	$\tau_1[ns]$	$\tau_2[ns]$	$\tau_3[ns]$	$\tau_4[ns]$	$I_1[\%]$	$I_2[\%]$	$I_3[\%]$	$I_4[\%]$	$\sigma[ns]$	$t_0[ns]$
Ajustado	0.22 ± 0.01	0.49 ± 0.03	2.5 ± 0.2	3.5 ± 0.3	45.2 ± 1.2	28.1 ± 1.5	21.6 ± 2.0	5.1 ± 2.0	0.75	2.48 ± 0.01

Estos resultados difieren mucho de los valores encontrados en la literatura, por lo que podemos decir que el osciloscopio PicoScope series 6000 es una mejor opción al momento de realizar estudios PALS en comparación al PicoScope series 2000.

Parte IV

Conclusión

Capítulo 13

13. Conclusiones

Este trabajo de fin de máster ha culminado con éxito, alcanzando todos los objetivos propuestos inicialmente y superando los desafíos técnicos y experimentales encontrados en el proceso. El resultado principal ha sido el desarrollo y optimización de un sistema experimental PALS (Espectroscopía de Aniquilación de Positrones por Tiempo de Vida) utilizando detectores LYSO-SiPM, demostrando su eficacia y fiabilidad en la caracterización de materiales.

La implementación del sistema PALS constituyó el primer hito crucial del trabajo. Se logró una configuración adecuada mediante las mediciones CRT y el cambio de los equipos experimentales como las fuentes y los osciloscopios, con esto se pudo distinguir la vida media del positronio en diversos materiales. A través de un proceso iterativo de ajustes y optimizaciones, se mejoró tanto la adquisición de datos como el análisis de los espectros temporales resultantes.

Las simulaciones realizadas en Matlab jugaron un papel fundamental en la validación de los scripts desarrollados para el análisis de los espectros PALS experimentales, garantizando así la fiabilidad de los resultados obtenidos. Se utilizó el cobre como material de referencia para la calibración del sistema, aprovechando su espectro de decaimiento exponencial único para determinar la resolución temporal del equipo y las contribuciones de la fuente de ^{22}Na .

El sistema desarrollado no solo cumple con los objetivos iniciales, sino que también está preparado para futuras aplicaciones en el estudio de defectos en materiales a nivel atómico y en investigaciones biomédicas. La combinación de detectores LYSO-SiPM optimizados y scripts de Matlab de fácil uso hace que este sistema sea una herramienta accesible y versátil para estudiantes e investigadores.

Para el futuro, se propone mejorar aún más el sistema mediante la implementación de técnicas avanzadas de adquisición y análisis de datos. Esto podría incluir la incorporación de detectores de mayor resolución o la optimización de las rutinas de simulación para aumentar la precisión en la caracterización de materiales complejos.

Apéndice A

A. Scripts de Matlab

A.1. Script SIMULACIONPs

En este script se generan todos los espectros para diferentes materiales en base a unos parámetros de entrada que pueden ser modificados.

```
pall=zeros(1,1,10,14); %(N_values,s_values,nrep,param_best)
N_values = [5e4];
s_values = [0.3]; % s = FWHM/(2*sqrt(ln(2)))
ns=0;
for s=s_values
ns=ns+1;
nN=0;

    for N=N_values
        nN=nN+1;

        for k = 1:1
            t_max = 50; % Valor máximo de t
            t_step=0.1;
            t = [-t_max:t_step:t_max];
            tg = [-10:t_step:10];

            Titulo_material = {'COBRE', 'AGUA', 'TEFLON'};

            SAMPLE = ["COBRE" "AGUA" "TEFLON"];

            I = [40, 40, 20, 0;... %COBRE[BULK, DEFECT, SOURCE, SOURCE]
                30, 20, 30, 20;... %AGUA[pPs, SOURCE, oPs, SOURCE]
                30, 40, 20, 0]; %TEFLON[pPs, SOURCE, SOURCE, oPs]
            I0=I;

            tau = [0.12, 0.48, 2.28, 2.28;... %COBRE[BULK, DEFECT, SOURCE,
SOURCE]0.18
                0.22, 0.48, 1.86, 2.28;... %AGUA[pPs, SOURCE, oPs, SOURCE]
                0.23, 0.39, 2.28, 4.33]; %TEFLON[pPs, SOURCE, SOURCE, oPs]
            tau0=tau;

            a = [I(1,:)./tau(1,:);...
                I(2,:)./tau(2,:);...
                I(3,:)./tau(3,:)];

            b = [1./tau(1,:);...
                1./tau(2,:);...
                1./tau(3,:)];

            background = 0;
```

```

t0 = 0; % desfase de las exponenciales
tg0 = 0.6; % centro de la gaussiana
exponenciales=3;

base_output_dir = 'C:\Users\Usuario\Dropbox\PICO\SIMULACION
MEJORADA\RESULTADOS DEFINITIVOS';
CARPETA_MATERIAL = strcat(base_output_dir, '\', Titulo_material{k});

% Inicializar la suma de las exponenciales
y_sum = zeros(size(t));

% Iterar sobre las tres exponenciales

for i = 1:exponenciales
    y_sum = y_sum + a(k,i) * exp(-b(k,i) * (t - t0)) .* (t >= t0);
end

gg = exp(-(tg-tg0).^2 / (s^2))/(s*sqrt(pi));

h = conv(y_sum, gg, 'same'); % con convolucion

% Normalizar
val = sum(h);
h = h * N / val;

h = h + background;

% ruido Poisson a valores menores que 10
ruido_poisson = h < 10;
y_ruidosa(ruido_poisson) = poissrnd(h(ruido_poisson));
y_ruidosa(y_ruidosa < 1) = 0;

% ruido gaussiano a valores mayores o iguales a 10
ruido_gaussian = h >= 10;
sigma = sqrt(h(ruido_gaussian));
y_ruidosa(ruido_gaussian) = normrnd(h(ruido_gaussian), sigma);
y_ruidosa(y_ruidosa < 1) = 0;

% Graficar función original y con ruido
figure(1+k); clf; hold on;
plot(t, y_ruidosa, 'g.', 'MarkerSize', 10); hold on;
plot(t, h, 'k', 'LineWidth', 2);
%I(exponenciales+1:end)=0;

for j=1:exponenciales
    f= a(k,j) * exp(-b(k,j)*(t-t0)).* (t >= t0);
    gg = ((1/(s*sqrt(pi))) * exp(-(tg-tg0).^2 / (s^2)));
    h_i = conv(f, gg, 'same');
    h_i = h_i * N / val;
    h_i = h_i + background;
    plot(t,h_i,'linewidth',2)
end

```

```

xlim([-5 20]);
ylim([1 max(y_ruidosa)*3])
title({strcat('SIMULACION DE ESPECTRO PALS DE ', Titulo_material{k} , '
CON RUIDO'), ['t_0= ' num2str(tg0)], ['\sigma= ' num2str(s)],
['Background= ' num2str(background)], ...
['Numero de cuentas= ' num2str(N) ]});

legend('Función con ruido', 'Funcion convolucionada', ...
    strcat(strcat('\tau_1= ', num2str(tau(k,1), '%4.2f'), ' (ns)'), strcat('
I_1= ', num2str(I(k,1)*100/sum(I(k,:)), '%4.2f'), ' (%)')), ...
    strcat(strcat('\tau_2= ', num2str(tau(k,2), '%4.2f'), ' (ns)'), strcat('
I_2= ', num2str(I(k,2)*100/sum(I(k,:)), '%4.2f'), ' (%)')), ...
    strcat(strcat('\tau_3= ', num2str(tau(k,3), '%4.2f'), ' (ns)'), strcat('
I_3= ', num2str(I(k,3)*100/sum(I(k,:)), '%4.2f'), ' (%)')), ...
    strcat(strcat('\tau_4= ', num2str(tau(k,4), '%4.2f'), ' (ns)'), strcat('
I_4= ', num2str(I(k,4)*100/sum(I(k,:)), '%4.2f'), ' (%)')));
xlabel('t(ns)');
ylabel('Cuentas');
set(gca, 'YScale', 'log');
save('tdiff.mat', 't', 'y_ruidosa'); % con ruido

PLOT_ESPECTRO = sprintf('%s\\_SIMULADO.jpg', CARPETA_MATERIAL);
saveas(gcf, PLOT_ESPECTRO);

for nrep=1:10

    fit_simulacion2

    params = reshape(param_best(1:12), 3, 4); % Reorganizar
    tau_values = params(2, :); % Extraer las taus
    [~, order] = sort(tau_values, 'descend');
    params_sorted = params(:, order);
    param_best(1:12) = reshape(params_sorted, 1, 12);

    pall(nN, ns, nrep, :) = param_best;

end

PLOT_RESULTADOS_SIMULACIONES

end
end
end

```

A.2. Script READANDFIT2

En este script se cargan los datos obtenidos experimentalmente para convertirlos en un espectro de diferencia de tiempos, procesa los datos en base a las ventanas de energía puestas. este script es exclusivo para la toma de datos con el osciloscopio PicoScope series 6000

```
pall2=zeros(10,14);
```

```

acqfolder='C:\Users\Usuario\OneDrive\Documentos\ADQUISICIONESTFM\OFICIAL\';

%plomo
%foldername='20240607_122215_L1-L2-Na22-NoCentered-Pb-Bcm-PAdvsc-44V_VR_100
mV_100 mV_5 V_5 V_TL_25_25_1500_3000_4e+05_5e+05_7e+05_8e+05';

%aire
%foldername='20240606_163029_L1-L2-Na22-NoCentered-Bcm-P.Advsc-44V_VR_100 mV_100
mV_5 V_5 V_TL_25_25_1500_3000_4e+05_5e+05_7e+05_8e+05';

%aire
%foldername='20240806_075448_AIRE_VR_100 mV_100 mV_2 V_2
V_TL_30_30_300_600_8e+04_1e+05_1e+05_2e+05';

%teflon
foldername='20240805_085933_TEFLON';

%cobre
%foldername='20240806_162320_COBRE';

%agua
%foldername='20240802_174406_AGUA';

foldername=strcat(acqfolder, foldername, '\');

data=load(strcat(foldername, 'output.txt'));
%data=data(abs(data(:,3))>1e-6,:);
data=data(data(:,3)>0,:);

data_all=data(1:end,:);

chunk=size(data_all,1);
%chunk=1000000;
nchunks=floor(size(data_all,1)/chunk);
EwinC=0.2;
EwinD=0.1;

LETC=0.5e5; %3.0e5;
UETC=1.2e5; %5e5;
LETD=1.3e5; %6.5e5;
UETD=1.6e5; %8.4e5;

figure(2);clf;
hold on

for nchunk=1:nchunks
    data=data_all((nchunk-1)*chunk+1:nchunk*chunk,:);
    ndt=5; % leading edge discriminator
    %ndt=7; % constant fraction discriminator
    htdiffv=[-50:0.1:50]; %ns
    htdiff=hist(data(:,ndt),htdiffv);

```

```

nbins=300;
maxC=1.2*max(data(:,3));
binC=maxC/nbins;
hEnCv=[0:binC:maxC];
hEnC=hist(data(:,3),hEnCv);

maxD=(1.2*max((data(:,4))));
binD=maxD/nbins;
hEnDv=[0:binD:maxD];
hEnD=hist(abs(data(:,4)),hEnDv);

[maxv C511] = max(hEnC(hEnCv>LETC&hEnCv<UETC));
a=hEnCv(hEnCv>LETC&hEnCv<UETC);
LETC=a(C511)*(1-EwinC);
UETC=a(C511)*(1+EwinC);
[maxv D511] = max(hEnD(hEnDv>LETD&hEnDv<UETD));
a=hEnDv(hEnDv>LETD&hEnDv<UETD);
LETD=a(D511)*(1-EwinD);
UETD=a(D511)*(1+EwinD);

data_filt=data(data(:,3)>LETC&data(:,4)>LETD&data(:,3)<UETC&data(:,4)<UETD,:);
htdiff_filt=hist(data_filt(:,ndt),htdiffv);

subplot(1,3,1);hold on;
plot(hEnCv,hEnC,'Color',[0.4660 0.6740 0.1880]);
xlabel('Energy u.a.')
ylabel('Counts')
drawnow;
xline(LETC, 'k--');xline(UETC, 'k--');
xlim([0 8e5]);
subplot(1,3,2);hold on;
plot(hEnDv,hEnD,'Color',[0.8, 0.6, 0]);
xlabel('Energy u.a.')
ylabel('Counts')
drawnow;
xline(LETD, 'k--');xline(UETD, 'k--');
xlim([0 8e5]);
drawnow;

subplot(1,3,3);hold on;
plot(htdiffv,htdiff_filt,'LineWidth',2);
xlabel('Time difference ns')
ylabel('Counts')
legend('Data');
set(gca, 'YScale', 'log');
xlim([-5 15])
save('tdiff.mat','htdiffv','htdiff_filt');

getCRT

Titulo_material = {'COBRE', 'AGUA', 'TEFLON'};
k=3;

```

```

base_output_dir = 'C:\Users\Usuario\Dropbox\PICO\RESULTADOS EXPERIMENTALES
OFICIAL';
CARPETA_MATERIAL = strcat(base_output_dir, '\', Titulo_material{k});

end

for nrep2=1:10

fit_simulacion2

params = reshape(param_best(1:12), 3, 4);
tau_values = params(2, :);
[~, order] = sort(tau_values, 'descend')
params_sorted = params(:, order)
param_best(1:12) = reshape(params_sorted, 1, 12);
pall2(nrep2,:)=param_best;

end

PLOT_RESULTADOS_EXP

```

A.3. Script fit_simulacion2

En este script se realiza los ajustes de los espectros de diferencia de tiempos a una función exponencial convolucionada con la función de resolución (gaussiana), y luego los muestra en una grafica para cada iteración.

```

load('tdiff.mat');

xlim1=-0.5;
xlim2=20;
xlim3=0.5;

nexp=exponenciales;

xv=[];
ev=[];

% x=htdiffv;
% xg=x(x>-10 & x<10);
% yData=htdiff_filt;

x=t;
xg=tg;
%yData=y_ruidosa;
yData=h;
a=yData(x>xlim3);
rango=10;

c0=mean(yData(x>20&x<30));

```

```

%folder_name = 'C:\Users\Usuario\Dropbox\PICO\SIMULACION MEJORADA\RESULTADOS
DEFINITIVOS\COBRE\10 ESPECTROS AJUSTADOS';

%[I1/tau1 1/tau1 background I2/tau2 1/tau2 0 I3/tau3
1/tau3 0 I4/tau4 1/tau4 0 resolution t0 ]
param_best= [a(1) 1/0.5 c0 a(1) 1/1 0 a(1) 1/3
0 a(1) 1/3 0 0.5 xlim3];
param_low= [0 1/0.5 0 0 1/1 0 0 1/3
0 0 1/3 0 0 0 ];
param_max= [0 1/0.1 0 0 1/0.1 0 0 1/2
0 0 1/0.1 0 0.5 1 ];
param_range=[a(1) rango c0/10 a(1) rango 100 a(1) rango
100 a(1) rango 100 0.1 xlim3];

emin=1e100;
tol=1;

figure(1);clf;plot(x,yData);
legend('tdiff')
set(gca, 'YScale', 'log')
xlim([xlim1 xlim2])
bv=[];
ev=[];
%tg0f=tg0;

for i=1:10000000
    tol=tol*0.99999;
    %%
    f=zeros(size(x));
    param=zeros(14,1);
    %t0=0.6;
    t0=max(param_best(14)+(rand-0.5)*param_range(14)*tol,param_low(14));
    param(14)=t0;
    for j=0:nexp-1
        a=max(param_best(1+j*3)+(rand-
0.5)*param_range(1+j*3)*tol,param_low(1+j*3));
        b=max(param_best(2+j*3)+(rand-
0.5)*param_range(2+j*3)*tol,param_low(2+j*3));
        b=min(b,param_max(2+j*3));
        if j==0
            c=0;%max(param_best(3+j*3)+(rand
0.5)*param_range(3+j*3)*tol,param_low(3+j*3));
        else
            c=0;
        end
        f=f+a*exp(-b*(x)).*(x >= 0) + c;
        param(1+j*3:3+j*3)=[a b c];
    end

    %d=0.3;
    d=max(param_best(13)+(rand-0.5)*param_range(13)*tol,param_low(13));
    param(13)=d;

```

```

g=exp(-(xg - t0).^2/(d^2))/(d*sqrt(pi));
h=conv(f,g,'same');

error=(yData-h).^2./yData;
error2=sum(error(x>xlim1&x<xlim2 & yData>0));

if (error2<emin)
    emin=error2;
    param_best=param;
    hbest=h;
    tol
end
if (mod(i,10000)==0)
    figure(1);clf;
    hold on;
    %plot(x,yData,'linewidth',2);
    plot(x,yData,'g.','MarkerSize',10);
    plot(x,hbest,'k','linewidth',2);
    ylim([1 max(yData)*3])
    %ylim([min(yData(yData>0)/3) max(yData)*3])
    set(gca,'YScale','log')
    xlim([xlim1 xlim2])
    xlabel('time difference (ns)');
    ylabel('counts');

    tau=1./param_best([2 5 8 11]);
    tau(nexp+1:end)=0;
    I=param_best([1 4 7 10]).*tau;
    I=I*100/sum(I);
    I(nexp+1:end)=0;
    t0=param_best(14);

    for j=0:nexp-1
        a=param_best(1+j*3);
        b=param_best(2+j*3);
        c=param_best(3);
        d=param_best(13);
        f_exp=a*exp(-b*(x)).*(x >= 0) + c;
        g=exp(-(xg - t0).^2/(d^2))/(d*sqrt(pi));
        h_exp=conv(f_exp,g,'same');
        plot(x,h_exp,'linewidth',2)
    end

    title({'AJUSTE DE ESPECTRO SIMULADO CON RUIDO',[ 't_0= ' num2str(t0)],
['\sigma= ' num2str(d)], ['Background= ' num2str(c)], ...
        ['Numero de cuentas= ' num2str(N)], ['error= '
num2str(error2,'%4.2f')]));
    legend('data','fit',...
        strcat(strcat('\tau_1= ',num2str(tau(1),'%4.3f'),' (ns)'), strcat('
I_1= ',num2str(I(1),'%4.2f'),' (%)')),...
        strcat(strcat('\tau_2= ',num2str(tau(2),'%4.3f'),' (ns)'), strcat('
I_2= ',num2str(I(2),'%4.2f'),' (%)')),...

```

```

        strcat(strcat('\tau_3= ', num2str(tau(3), '%4.3f'), ' (ns)'), strcat('
I_3= ', num2str(I(3), '%4.2f'), ' (%)')), ...
        strcat(strcat('\tau_4= ', num2str(tau(4), '%4.3f'), ' (ns)'), strcat('
I_4= ', num2str(I(4), '%4.2f'), ' (%)'))

    end
    if (tol<0.0000001)
        break
    end
end

fit = sprintf('%s\\_nrep_%d.jpg', CARPETA_MATERIAL, nrep);
saveas(gcf, fit);

```

A.4. Script getCRT

Este script es usado para obtener el FWHM en las mediciones CRT:

```

xng = htdiffv;           % Asigna el eje x de los datos a xng
yng = htdiff_filt;       % Asigna el eje y de los datos filtrados a yng
[maxgv, idg] = max(yng); % Encuentra el valor máximo de yng y su índice
idng = idg;              % Asigna el índice del máximo a idng
profg = yng;             % Asigna los datos y a profg

% Asegurarse de que los índices no están fuera de rango
if idng > 1 && idng < length(xng)
    xfitg = xng(idng-1:idng+1); % Valores x alrededor del máximo
    yfitg = yng(idng-1:idng+1); % Valores y alrededor del máximo
else
    % Si el máximo está en el borde, usar solo los índices válidos
    if idng == 1
        xfitg = xng(idng:idng+2);
        yfitg = yng(idng:idng+2);
    elseif idng == length(xng)
        xfitg = xng(idng-2:idng);
        yfitg = yng(idng-2:idng);
    end
end

png = polyfit(xfitg, yfitg, 2); % Ajuste cuadrático a los puntos seleccionados
xmaxg = -png(2) / (2 * png(1)); % Calcula la x del vértice de la parábola
ymaxg = polyval(png, xmaxg);    % Calcula la y del vértice de la parábola

% Cálculo del FWHM a la Derecha del Máximo
for j = idg:idg+30
    if j > length(profg)
        break;
    end
    if profg(j) < ymaxg * 0.5
        fwhm2g = interp1(profg(j-1:j), xng(j-1:j), ymaxg * 0.5);
        break
    end
end

```

```

end

% Cálculo del FWHM a la Izquierda del Máximo
for j = idg:-1:idg-30
    if j < 1
        break;
    end
    if profg(j) < ymaxx * 0.5
        fwhmlg = interp1(profg(j:j+1), xng(j:j+1), ymaxx * 0.5);
        break
    end
end

tdiff_fwhmg = (fwhm2g - fwhmlg) * 1e3; % Calcula el FWHM en picosegundos

hold on;
plot([fwhmlg fwhm2g], [ymaxx * 0.5 ymaxx * 0.5], 'k--*', 'LineWidth', 2); %
Dibuja la línea del FWHM
text(0.2, ymaxx * 0.5, strcat('FWHM = ', num2str(tdiff_fwhmg), ' ps'),
'FontSize', 12) % Añade texto del FWHM
xlim([-10 10]) % Establece los límites del eje x
saveas(gcf, strcat(outfolder, '/fit.jpg')) % Guarda la gráfica como una imagen

```

A.5. Script runpicoucm1_loop

En este script se tomaban los datos experimentales en base a los parámetros del interfaz PicoScopeUCM, esto en loop para la toma de datos CRT.

```

CRTv=zeros(3,6)
nvr=0;
for value_vr=7:7
    nvr=nvr+1;
    nt=0;
    for value=200:50:200
        nt=nt+1;

        LETC=app.LETCeditField.Value;
        UETC=app.UETCeditField.Value;
        LETD=app.LETDeditField.Value;
        UETD=app.UETDeditField.Value;

        if loadfile==0;
            delete('output.txt')

            info=app.InfoEditField.Value;
            datestring=datestr(now, 'yyyymmdd_HHMMSS');
            % outfolder=strcat('acqs/', datestring, '_', strrep(info, ' ', ''), '/');
            % mkdir(outfolder);

            nevents=app.EventsEditField.Value;
            fid=fopen('conf/nevents.txt', 'w');
            fprintf(fid, '%d', nevents);
            fclose(fid);

```

```

VR_list={'20 mV','50 mV','100 mV','200 mV','500 mV','1 V','2 V','5 V','10 V'};

voltageRangeA=app.VolRangeChADropDown.Value;
VRIA=strfind(VR_list,voltageRangeA); VRIA=find(not(cellfun('isempty',VRIA)));
voltageRangeB=app.VolRangeChBDropDown.Value;
VRIB=strfind(VR_list,voltageRangeB); VRIB=find(not(cellfun('isempty',VRIB)));
voltageRangeC=app.VolRangeChCDropDown.Value;
VRIC=strfind(VR_list,voltageRangeC); VRIC=find(not(cellfun('isempty',VRIC)));
voltageRangeD=app.VolRangeChDDropDown.Value;
VRID=strfind(VR_list,voltageRangeD); VRID=find(not(cellfun('isempty',VRID)));

VRIA=value_vr;
VRIB=value_vr;

fid=fopen('conf/voltage_level.txt','w');
fprintf(fid,'%d\n',VRIA);
fprintf(fid,'%d\n',VRIB);
fprintf(fid,'%d\n',VRIC);
fprintf(fid,'%d\n',VRID);
fclose(fid);

trigger_levelA=app.ThresholdAmVEditField.Value;
trigger_levelB=app.ThresholdBmVEditField.Value;
trigger_levelC=app.ThresholdCmVEditField.Value;
trigger_levelD=app.ThresholdDmVEditField.Value;

trigger_levelA=value;
trigger_levelB=value;

fid=fopen('conf/trigger_level2.txt','w');
fprintf(fid,'%d\n',trigger_levelA);
fclose(fid);
fid=fopen('conf/trigger_level3.txt','w');
fprintf(fid,'%d\n',trigger_levelB);
fclose(fid);
fid=fopen('conf/trigger.txt','w');
fprintf(fid,'%d\n',trigger_levelC);
fprintf(fid,'%d\n',trigger_levelD);
fclose(fid);

outfolder = strcat('C:\Users\SEPUCM\Documents\Positronio\acqs_picoUCM\',
datestring, '_', strrep(info, '_',
'_'), '_VR', num2str(value_vr), '_T', num2str(value)); %, ...
%     '_VR', num2str(voltageRangeA), '_', num2str(voltageRangeB), ...
%     '_', num2str(voltageRangeC), '_', num2str(voltageRangeD), ...
%     '_TL', num2str(trigger_levelA), '_', num2str(trigger_levelB), ...
%     '_', num2str(trigger_levelC), '_', num2str(trigger_levelD), ...
%     '_', sprintf('%.1g', LETC), '_', sprintf('%.1g', UETC), ...
%     '_', sprintf('%.1g', LETD), '_', sprintf('%.1g', UETD), '/');

mkdir(outfolder);

```

```

%data=load('Z:\Claudia_FB\PicoUCM\acqs\20230728_113103_/output.txt');
save(strcat(outfolder,'/conf.mat'),'info','nevents','voltageA','voltageB',
'voltageC',...

'voltageD','trigger_levelA','trigger_levelB','trigger_levelC','trigger_level
D','LETC','UETC','LETD','UETD');
system('C:\Users\SEPUCM\Dropbox\share\picoscope\picosdk-c-examples-master-
positronioPET\ps2000a\x64\Debug\ps2000aCon.exe &');
tic
end

%%
on=1;
while on==1
    fileok=0;
    if loadfile==0
        pause(5);
    end

    while fileok==0
        try
            data=load(strcat(foldername,'/output.txt'));
            %data=load('output.txt');
            data_all=data;
            if loadfile==0

writematrix(data,strcat(outfolder,'/output.txt'),'Delimiter','tab')
            end

            % Quitar para singles
            % data=data(abs(data(:,5))<2.99,:);

            data=data(abs(data(:,3))>1e-6,:);
            %data=data(data(:,4)>0,:);
            %datacf=data(data(:,8)==2,:); % CFD
            %datacf2=data(data(:,8)==2&data(:,6)==1,:); % CFD2

            % Quitar para singles
            % data=data(data(:,6)==1,:);

            events_all = size(data_all,1);
            %n_events_ok = size(data_all(data_all(:,6)==1,:),1);
            %p_events_final = size(data,1)*100/events_all;
            %p_events_ok = n_events_ok*100/events_all;
            %events_intwin =
size(data_all(abs(data_all(:,5))<2.99,:),1)*100/events_all;
            %events_posEnC =
size(data_all(data_all(:,3)>0,:),1)*100/events_all;
            %events_posEnD =
size(data_all(data_all(:,4)>0,:),1)*100/events_all;

            %time_m=toc/60;
            %tasa_ok=n_events_ok/toc;
            %tasa_total=events_all/toc;

```

```

%           disp(['eOK_p eFinal_p eIntWin_p e_PosEnC e_PosEnD eFinalRate
eokRate eventsok time(min)']);
%           fprintf('%.4f %.4f %.4f %.0f %.0f %.4f %.4f %.0f %.2f\n',
events_ok, events_final, events_intwin, events_posEnC, events_posEnD, tasa_total,
tasa_ok, n_events_ok, time_m);
%           fileok=1;

%           %disp(['eOK_p eFinal_p eIntWin_p e_PosEnC e_PosEnD eFinalRate
eokRate eventsok time(min)']);
%           %fprintf('%.4f %.4f %.4f %.0f %.0f %.4f %.4f %.0f %.2f\n',
p_events_ok, p_events_final, events_intwin, events_posEnC, events_posEnD,
tasa_total, tasa_ok, n_events_ok, time_m);
%           fileok=1;
%           on=0;

%       catch
%           disp('error loading data file')
%
%           fid=fopen('run.txt','r');
%           on=fscanf(fid,'%d');
%           fclose(fid);
%
%           if loadfile==1
%               break;
%           end
%
%           pause(1)
%           fileok=0;
%           % continue; % Skip to bottom of for loop but continue
interating.

end

end

% if toc/60 >= 10
%     break
% end

% if size(data,1)<5
%     continue
% end
ndt=3; % leading edge discriminator
%ndt=7; % constant fraction discriminator
htdiffv=[-100:0.2:100]; %ns
htdiff=hist(data(:,ndt),htdiffv);
% htdiffcfd=hist(datacfd(:,7),htdiffv);
% htdiffcfd2=hist(datacfd2(:,9),htdiffv);
data_filt=data(data(:,1)>LETC&data(:,2)>LETD&data(:,1)<UETC&data(:,2)<UETD,:);
htdiff_filt=hist(data_filt(:,ndt),htdiffv);
%htdiffcfd_filt=hist(data_filt(:,7),htdiffv);

```

```

nbins=300;
maxC=1.2*max(data(:,1));
binC=maxC/nbins;
hEnCv=[0:binC:maxC];
hEnC=hist(data(:,1),hEnCv);

maxD=(1.2*max((data(:,2)))));
binD=maxD/nbins;
hEnDv=[0:binD:maxD];
hEnD=hist(abs(data(:,2)),hEnDv);

%figure(1);clf;

cla(app.UIAxes);
hold(app.UIAxes, 'on' )
cla(app.UIAxes3);
hold(app.UIAxes3, 'on' )

cla(app.UIAxes2);
hold(app.UIAxes2, 'on' )
%subplot(1,2,1)
plot(app.UIAxes,hEnCv,hEnC,'Color',[0.4660 0.6740 0.1880]);
drawnow;
xline(app.UIAxes,LETC, 'k--');xline(app.UIAxes,UETC, 'k--');
plot(app.UIAxes3,hEnDv,hEnD,'Color',[0.8, 0.6, 0]);
drawnow;
xline(app.UIAxes3,LETD, 'k--');xline(app.UIAxes3,UETD, 'k--');
drawnow;
plot(app.UIAxes2,htdiffv,htdiff_filt);
legend(app.UIAxes2,'All','Filtered');
set(app.UIAxes2, 'YScale', 'log');
figure(20);clf;
plot(htdiffv,htdiff_filt);
xlim([-3 3])

save('tdiff.mat','htdiffv','htdiff_filt');

length(data_all)
length(data_filt)

getCRT;

if loadfile==0
save(strcat(outfolder,'/output.mat'),'hEnCv','hEnC','hEnDv','hEnD','htdiffv','htdiff',
'filt','htdiff_filt');

fid=fopen('run.txt','r');
on=fscanf(fid,'%d');
fclose(fid);

end

if loadfile==1

```

```

%      data=load(strcat(foldername,'/conf.mat'))
%      app.InfoEditField.Value=data.info
      break;
end
end

if loadfile==0
    system('Taskkill/IM cmd.exe');
end

% CRTv(nvr,nt)=tdiff_fwhmg;
% figure(20);clf;hold on;plot(CRTv','LineWidth',2)
% xlabel('Threshold')
% ylabel('FWHM')
% legend({'VR = 500mV','VR = 1V','VR = 2V'},'Location','southeast')
end
end
return

%%
system('C:\Users\laboshare\Dropbox\share\picoscope\picosdk-c-examples-
master\ps6000\x64\Debug\ps6000Con.exe &');
a=load('block.txt');
figure(1);clf;
plot(a(:,1)/0.8,a(:,2:5));
legend('A','B','C','D');

```

A.6. readandfit

En este script se procesan los datos para mostrar el espectro de diferencia de tiempos de los experimentos, este script es exclusivo para la toma de datos con el osciloscopio PicoScope series 2000.

```

acqfolder='C:\Users\Usuario\OneDrive\Documentos\ADQUISICIONESTFM\OFICIAL\';

%foldername='20240606_144944_31V_MONEDA_VR7_T200';
%foldername='20240718_163840_TEFOLON31V300-600_VR7_T200';
foldername='20240610_164802_31V_AGUA_VR7_T200';

%foldername='./';

foldername=strcat(acqfolder,foldername,'\');

data=load(strcat(foldername,'output.txt'));
data=data(abs(data(:,3))>1e-6,:);

data_all=data(1:end,:);
%%
chunk=size(data_all,1);
%chunk=1000000;
nchunks=floor(size(data_all,1)/chunk);
EwinC=0.1;
EwinD=0.05;

LETC=2.6e4;%Limites para la 20240508_093059_MONEDASTHRESHOLD200-250
UETC=3.4e4;%Tambien sirven para 20240507_125152_AGUATHRESHOLD200-250
LETD=4.6e4; %1.9e4

```

```

UETD=5.4e4; %2.3e4;

figure(2);clf;
hold on

for nchunk=1:nchunks
    data=data_all((nchunk-1)*chunk+1:nchunk*chunk,:);
    ndt=3; % leading edge discriminator
    %ndt=7; % constant fraction discriminator
    htdiffv=[-100:0.2:100]; %ns
    htdiff=hist(data(:,ndt),htdiffv);
    % htdiffcfd=hist(datacfd(:,7),htdiffv);
    % htdiffcfd2=hist(datacfd2(:,9),htdiffv);
    %htdiffcfd_filt=hist(data_filt(:,7),htdiffv);

    nbins=300;
    maxC=1.2*max(data(:,1));
    binC=maxC/nbins;
    hEnCv=[0:binC:maxC];
    hEnC=hist(data(:,1),hEnCv);

    maxD=(1.2*max((data(:,2)))));
    binD=maxD/nbins;
    hEnDv=[0:binD:maxD];
    hEnD=hist(abs(data(:,2)),hEnDv);

    [maxv C511] = max(hEnC(hEnCv>LETC&hEnCv<UETC));
    a=hEnCv(hEnCv>LETC&hEnCv<UETC);
    LETC=a(C511)*(1-EwinC);
    UETC=a(C511)*(1+EwinC);
    [maxv D511] = max(hEnD(hEnDv>LETD&hEnDv<UETD));
    a=hEnDv(hEnDv>LETD&hEnDv<UETD);
    LETD=a(D511)*(1-EwinD);
    UETD=a(D511)*(1+EwinD);

    data_filt=data(data(:,1)>LETC&data(:,2)>LETD&data(:,1)<UETC&data(:,2)<UETD,:);
    htdiff_filt=hist(data_filt(:,ndt),htdiffv);

    subplot(1,3,1);hold on;
    plot(hEnCv,hEnC,'Color',[0.4660 0.6740 0.1880]);
    xlabel('Energy u.a.')
    ylabel('Counts')
    drawnow;
    xline(LETC,'k--');xline(UETC,'k--');
    xlim([0 8e4]);
    subplot(1,3,2);hold on;
    plot(hEnDv,hEnD,'Color',[0.8, 0.6, 0]);
    xlabel('Energy u.a.')
    ylabel('Counts')
    drawnow;
    xline(LETD,'k--');xline(UETD,'k--');
    xlim([0 8e4]);
    %legend(app.UIAxes,'ChC','ChD');

```

```

%
%
plot(app.UIAxes2,htdiffv,htdiff,htdiffv,htdiff_filt,htdiffv,htdiffcfd,htdiffv,htdiffcfd_filt,htdiffv,htdiffcfd2);
% legend(app.UIAxes2,'All','Filtered','CFD','CFD_filt','CFD2');
%plot(app.UIAxes2,htdiffv,htdiff,htdiffv,htdiff_filt);
drawnow;

subplot(1,3,3);hold on;
plot(htdiffv,htdiff_filt,'LineWidth',2);
xlabel('Time difference ns')
ylabel('Counts')
legend('All','Filtered');
set(gca, 'YScale', 'log');
xlim([-5 30])
%xlim([-10 10])
save('tdiff.mat','htdiffv','htdiff_filt');

%getCRT
fit_positronium_app
%fit_simulacion3
%fit_experiment

Titulo_material = {'MONEDA', 'AGUA', 'TEFLON'};
k=2;
base_output_dir = 'C:\Users\Usuario\Dropbox\PICO\RESULTADOS EXPERIMENTALES OFICIAL';
CARPETA_MATERIAL = strcat(base_output_dir,'\ ',Titulo_material{k});

end

for nrep2=1:10

fit_positronium_app

params = reshape(param_best(1:12), 3, 4); % Reorganiza los primeros 12 elementos
en una matriz de 3 filas y 4 columnas
tau_values = params(2, :); % Extraer las taus (segunda fila de la
matriz)

% Ordenar las taus de mayor a menor y reorganizar las columnas correspondientes
[~, order] = sort(tau_values, 'descend'); % Obtener el orden para taus
descendente
params_sorted = params(:, order); % Reorganizar toda la matriz de
acuerdo al orden de las taus

% Reconstruir param_best con los valores ordenados
param_best(1:12) = reshape(params_sorted, 1, 12); % Colocar los valores
ordenados en param_best

pall2(nrep2,:)=param_best;

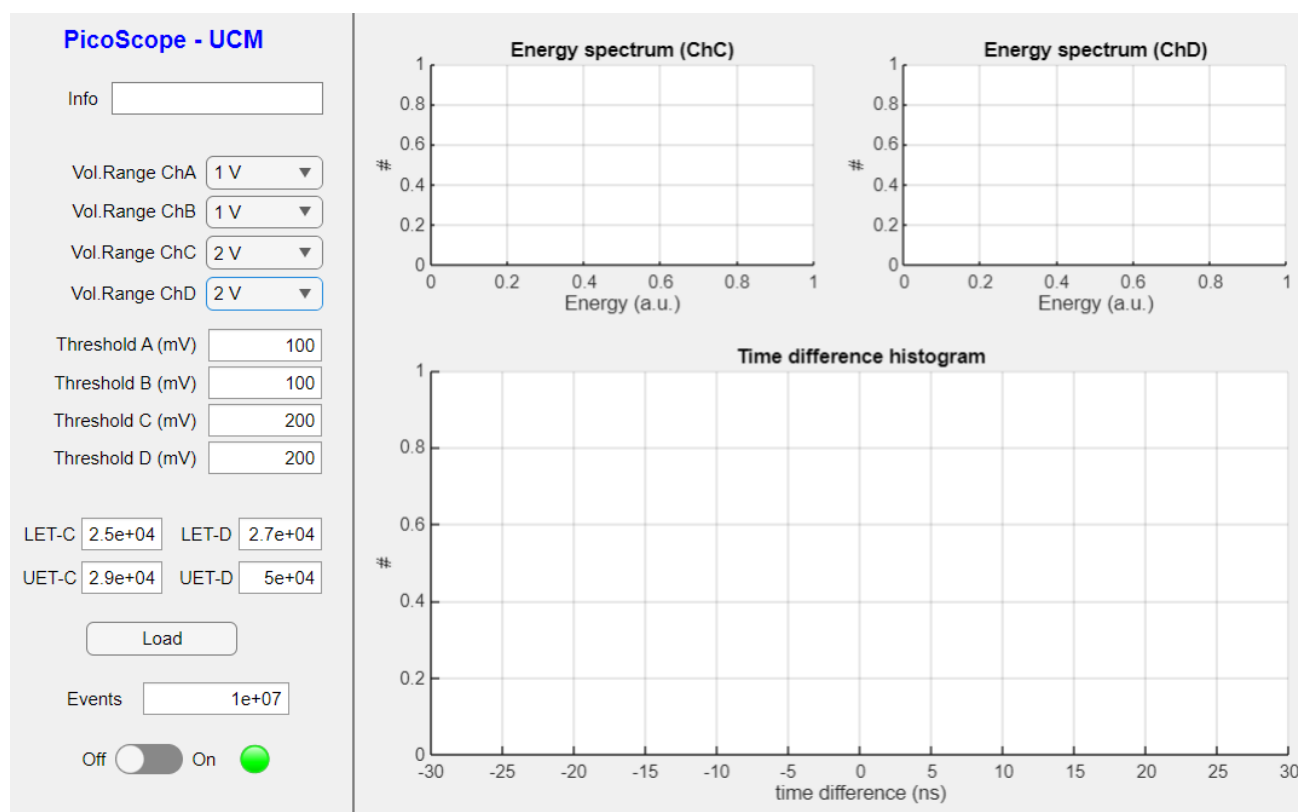
end

PLOT_RESULTADOS_EXP

```

A.7. Interfaz PicoScopeUCM.app

Mediante esta app de MATLAB se tomaban los datos experimentales y se registraban cada periodo de tiempo, mostrándose a tiempo real los espectros de energía y de tiempo generados por los datos tomados. En el se puede modificar el rango de voltaje, los threshold de energía para que cada detector solo tome un cierto pico del espectro, o los thresholds de tiempo que se mostraron en la parte CRT. También tiene un botón para iniciar la toma de datos o para finalizarla. En events se puede escribir la cantidad de cuentas a las que el programa deja de tomar datos.



Bibliografía

- [1] Richard B. Firestone, S. Y. Frank Chu, and Coral M. Baglin, “Table of Isotopes.” Accessed: Oct. 21, 2024. [Online]. Available: <https://application.wiley-vch.de/books/info/0-471-35633-6/toi99/toi.htm>
- [2] S. Mohorovi2, “ASTRONOMISCHE NACHRICHTEN. Möglichkeit neuer Elemente und ihre Bedeutung für die Astr0physik.l).”
- [3] A. E. Ruark, “Positronium,” *Physical Review*, vol. 68, no. 11–12, pp. 278–278, Dec. 1945, doi: 10.1103/PhysRev.68.278.
- [4] A. J. Wheeler, “POLYELECTRONS,” *Ann N Y Acad Sci*, vol. XLVIII, pp. 219–238, 1946, doi: 10.1111/j.1749-6632.1946.tb31764.x.
- [5] Himanshu Mishra, “Plutus Ias,” Laser cooling of positronium by CERN. Accessed: Oct. 21, 2024. [Online]. Available: <https://plutusias.com/laser-cooling-of-positronium-by-cern/>
- [6] P. J. Schultz and J. L. Campbell, “Cross-section ratio for K-shell ionization of copper by low energy electrons and positrons,” *Phys Lett A*, vol. 112, no. 6–7, pp. 316–318, Nov. 1985, doi: 10.1016/0375-9601(85)90349-4.
- [7] J. Oliva, “Inelastic positron scattering in an electron gas,” *Phys Rev B*, vol. 21, no. 11, pp. 4909–4917, Jun. 1980, doi: 10.1103/PhysRevB.21.4909.
- [8] A. Perkins and J. P. Carbotte, “Effect of the Positron-Phonon Interaction on Positron Motion,” *Phys Rev B*, vol. 1, no. 1, pp. 101–107, Jan. 1970, doi: 10.1103/PhysRevB.1.101.
- [9] B. Nielsen, K. G. Lynn, and Y.-C. Chen, “Study of Solids by Use of Nonthermalized Positrons,” *Phys Rev Lett*, vol. 57, no. 14, pp. 1789–1792, Oct. 1986, doi: 10.1103/PhysRevLett.57.1789.
- [10] sterne Brandt and R. Paulin, “Positron implantation-profile effects in solids* 1 MARCH 1977.”
- [11] L. Yu. Dubov, Yu. A. Akmalova, S. V. Stepanov, Yu. V. Shtotsky, and Yu. V. Shtotsky, “Evaluation of Positron Implantation Profiles in Various Materials for ^{22}Na Source,” *Acta Phys Pol A*, vol. 132, no. 5, pp. 1482–1486, Nov. 2017, doi: 10.12693/APhysPolA.132.1482.
- [12] C. H. Hodges, “Trapping of Positrons at Vacancies in Metals,” *Phys Rev Lett*, vol. 25, no. 5, pp. 284–287, Aug. 1970, doi: 10.1103/PhysRevLett.25.284.
- [13] A. Czarnecki, “Positronium properties,” Nov. 1999.
- [14] A. H. Al-Ramadhan and D. W. Gidley, “New precision measurement of the decay rate of singlet positronium,” *Phys Rev Lett*, vol. 72, no. 11, pp. 1632–1635, Mar. 1994, doi: 10.1103/PhysRevLett.72.1632.
- [15] A. Ore and J. L. Powell, “Three-Photon Annihilation of an Electron-Positron Pair,” *Physical Review*, vol. 75, no. 11, pp. 1696–1699, Jun. 1949, doi: 10.1103/PhysRev.75.1696.
- [16] M. Deutsch, “Three-Quantum Decay of Positronium,” *Physical Review*, vol. 83, no. 4, pp. 866–867, Aug. 1951, doi: 10.1103/PhysRev.83.866.
- [17] G. S. Adkins, R. N. Fell, and J. Sapirstein, “Order Corrections to the Decay Rate of Orthopositronium,” *Phys Rev Lett*, vol. 84, no. 22, pp. 5086–5089, May 2000, doi: 10.1103/PhysRevLett.84.5086.

- [18] D. W. Gidley, K. A. Marko, and A. Rich, “Precision Measurement of the Decay Rate of Orthopositronium in Si Powders,” *Phys Rev Lett*, vol. 36, no. 8, pp. 395–398, Feb. 1976, doi: 10.1103/PhysRevLett.36.395.
- [19] D. W. Gidley, P. W. Zitzewitz, K. A. Marko, and A. Rich, “Measurement of the Vacuum Decay Rate of Orthopositronium,” *Phys Rev Lett*, vol. 37, no. 12, pp. 729–732, Sep. 1976, doi: 10.1103/PhysRevLett.37.729.
- [20] R. Krause Rehberg, *Positron annihilation in semiconductors*.
- [21] O. E. Mogensen, “Spur reaction model of positronium formation,” *J Chem Phys*, vol. 60, no. 3, pp. 998–1004, 1974, doi: 10.1063/1.1681180.
- [22] J. Dryzek, *Positron Profilometry*. in SpringerBriefs in Materials. Cham: Springer Nature Switzerland, 2023. doi: 10.1007/978-3-031-41093-2.
- [23] A. P. Mills, “THERMAL ACTIVATION MEASUREMENT OF POSITRON BINDING ENERGIES AT SURFACES.”
- [24] E. L. ; 'l Paul, R. L. Graham, ; J Wackerle, and R. Stump, “Long Lifetime of Positronium in Liquid Helium*,” 1957.
- [25] S. V. Stepanov, V. M. Byakov, D. S. Zvezhinskiy, G. Duplâtre, R. R. Nurmukhametov, and P. S. Stepanov, “Positronium in a liquid phase: Formation, bubble state and chemical reactions,” *Advances in Physical Chemistry*, vol. 2012, 2012, doi: 10.1155/2012/431962.
- [26] “ORTEC ® Experiment 19 Gamma-Ray Decay Scheme and Angular Correlation for.” [Online]. Available: www.ortec-online.com/Service-Support/Library/Experiments-
- [27] F. Tuomisto, V. Ranki, K. Saarinen, and D. C. Look, “Evidence of the Zn Vacancy Acting as the Dominant Acceptor in n -Type ZnO,” *Phys Rev Lett*, vol. 91, no. 20, p. 205502, Nov. 2003, doi: 10.1103/PhysRevLett.91.205502.
- [28] “Experiment 27 Positron Annihilation Lifetime Spectrometry.” [Online]. Available: www.ortec-online.com.
- [29] J. Dryzek, “Remarks on a source contribution in positron lifetime measurements,” *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 521, pp. 1–6, Jun. 2022, doi: 10.1016/j.nimb.2022.04.001.
- [30] G. F. . Knoll, *Radiation detection and measurement*. Wiley, 2000.
- [31] W. W. Moses and S. E. Derenzo, “Prospects for Time-of-Flight PET using LSO Scintillator*,” 1999.
- [32] S. Surti, J. S. Karp, and P. S. Raby, “Investigation of Lanthanum Scintillators for 3-D PET.”
- [33] S. Vandenberghe, E. Mikhaylova, E. D’Hoe, P. Mollet, and J. S. Karp, “Recent developments in time-of-flight PET,” Dec. 01, 2016, *Springer International Publishing*. doi: 10.1186/s40658-016-0138-3.
- [34] “PhysicsOpenLab,” SIPM Preamplifier. Accessed: Oct. 22, 2024. [Online]. Available: <https://physicsopenlab.org/2016/03/29/sipm-preamplifier/>
- [35] Y. H. Li *et al.*, “Record high time resolution of positron annihilation lifetime spectrometer achieved by double-stop setup and geometry optimization of scintillators,” *Nucl Instrum Methods Phys Res A*, vol. 1058, Jan. 2024, doi: 10.1016/j.nima.2023.168772.
- [36] M. Eldrup, O. Mogensen, and G. Trumpy, “Positron lifetimes in pure and doped ice and in water,” *J Chem Phys*, vol. 57, no. 1, pp. 495–504, 1972, doi: 10.1063/1.1677990.

- [37] J. M. Campillo Robles, E. Ogando, and F. Plazaola, "Positron lifetime calculation for the elements of the periodic table," *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 19, no. 17, Apr. 2007, doi: 10.1088/0953-8984/19/17/176222.
- [38] Banco de España, "Monedas en euros," 2019. Accessed: Oct. 22, 2024. [Online]. Available: https://www.bde.es/f/webbe/EFE/BilletesYMonedas/relacionados/19-11-06_Monedas_en_euros.pdf
- [39] D. P. Kerr, "Positron Annihilation in Teflon and Polyethylene1." [Online]. Available: www.nrcresearchpress.com
- [40] K. SHvegh, rtes L. Wojnfirovits M, M. L. Liszkai xx, and Z. Kajcsos xx, "POSITRON LIFETIME STUDY OFELECTRON-IRRADIATED EPOXY RESINS."
- [41] H. B. Wang *et al.*, "A new SiPM-based positron annihilation lifetime spectrometer using LYSO and LFS-3 scintillators," *Nucl Instrum Methods Phys Res A*, vol. 960, Apr. 2020, doi: 10.1016/j.nima.2020.163662.
- [42] G. Llosa *et al.*, "Energy and Timing Resolution Studies With Silicon Photomultipliers (SiPMs) and 4-Pixel SiPM Matrices for PET," *IEEE Trans Nucl Sci*, vol. 56, no. 3, pp. 543–548, Jun. 2009, doi: 10.1109/TNS.2009.2015877.
- [43] M. D. Harpen, "Positronium: Review of symmetry, conserved quantities and decay for the radiological physicist," 2004, *John Wiley and Sons Ltd*. doi: 10.1118/1.1630494.
- [44] G. S. Kanda and D. J. Keeble, "Positron annihilation lifetime spectroscopy source correction determination: A simulation study," *Nucl Instrum Methods Phys Res A*, vol. 808, pp. 54–59, Feb. 2016, doi: 10.1016/j.nima.2015.11.052.