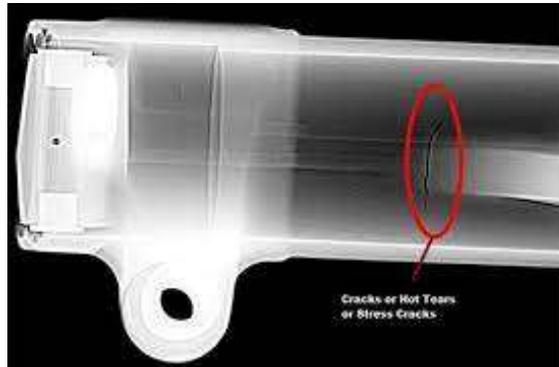


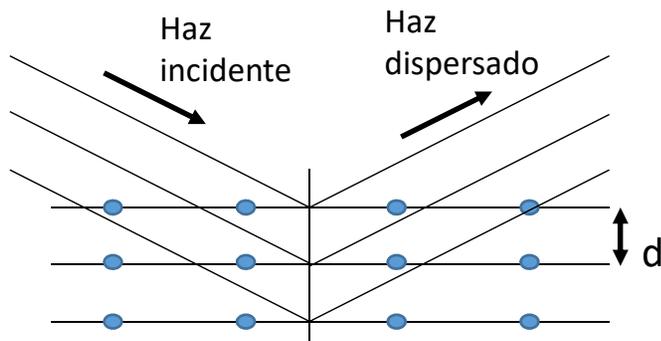
Propiedades y Producción de Rayos-X

Los Rayos-X fueron descubiertos en 1895 por Roentgen. rápidamente comenzaron a ser utilizados para realizar radiografías de cuerpos opacos, en particular para la observación de quebraduras y fallas en soldaduras.



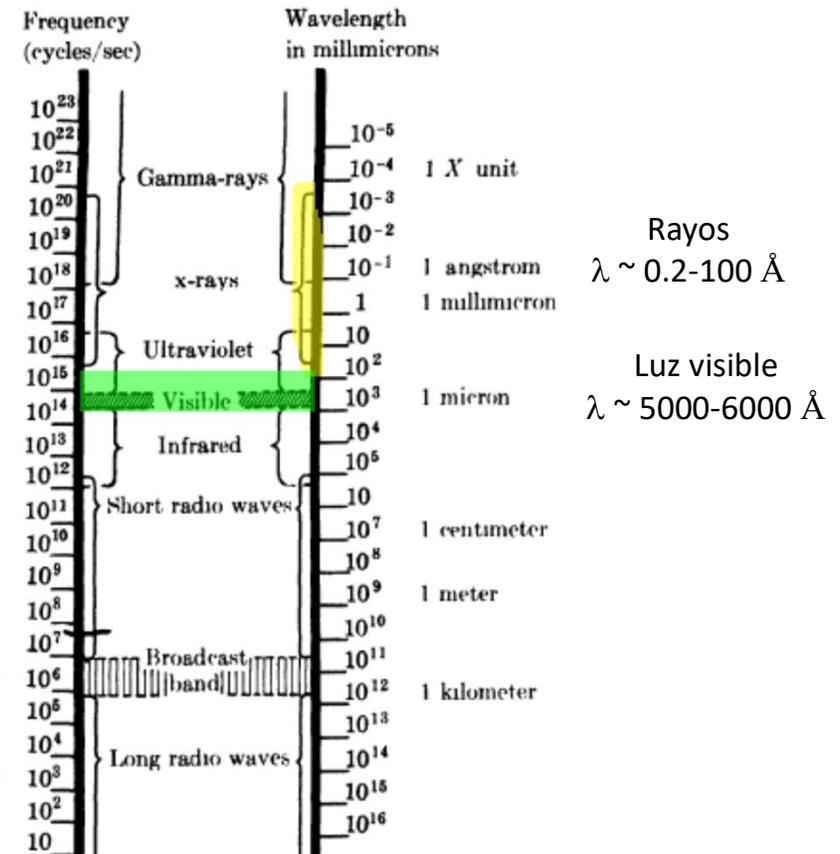
Pero es en 1912, con el descubrimiento del fenómeno de difracción de rayos-X es que se establece la naturaleza ondulatoria de los Rayos-X y se abre un campo gigantesco en su utilización para el estudio de la estructura de la materia.

Obs: Una radiografía permite resolver una dimensión de 0.1 cm, mediante el fenómeno de difracción se revelan detalles de la estructura de la materia del orden de 10^{-8} cm \sim 1 Å.



Radiación electromagnética

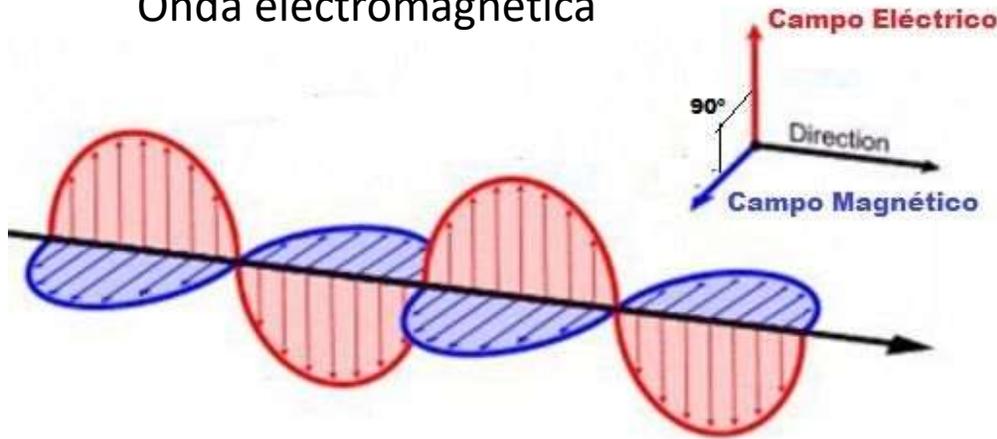
Actualmente se sabe que los Rayos-X es una radiación electromagnética, al igual que la luz visible pero de longitud de onda más pequeña.



Recordemos que una onda electromagnética está constituida por un campo eléctrico E y un campo magnético B. Ambos campos se comportan como una onda que se propaga en una dirección dada, supongamos el eje x, mientras que la amplitud del campo oscila perpendicular a la dirección de propagación.

Propiedades y Producción de Rayos-X

Onda electromagnética



El campo eléctrico \vec{E} de esta onda electromagnética se escribe,

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \cos(k \cdot x - \omega t) \vec{e}_y$$

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \cos\left(2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - vt\right)\right) \vec{e}_y$$

Donde,

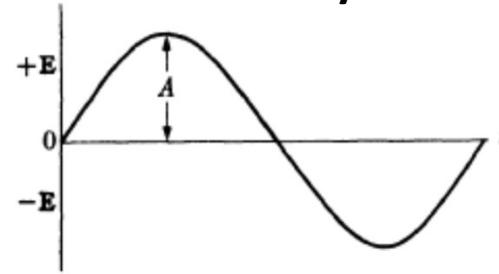
$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \omega = 2\pi v$$

Y la relación entre λ y v resulta,

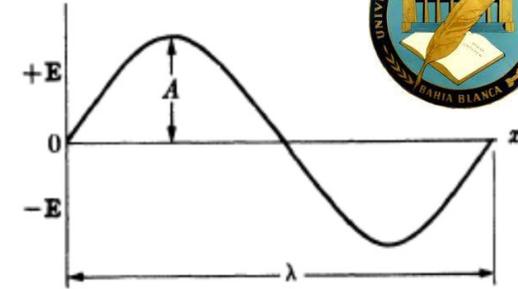
$$\lambda = \frac{c}{v} \quad \Rightarrow \quad v = \frac{c}{\lambda}$$

Siendo c la velocidad de la luz.

El comportamiento del campo eléctrico \vec{E} tanto con el tiempo como en el espacio resulta una función oscilante periódica. En la figura se ve la variación de \vec{E} en el tiempo a un x fijo y también la variación de \vec{E} en x a un tiempo fijo.



(a)



(b)

Otra característica de la onda electromagnética es que transporta energía, y esta energía por unidad de área y de tiempo es la intensidad I , que es proporcional a E_0^2 .

Hasta aquí hemos considerado la visión clásica de la radiación al analizarla como una onda, sin embargo la mecánica cuántica indica que la radiación electromagnética también puede ser considerada como un haz de partículas denominados fotones con energía,

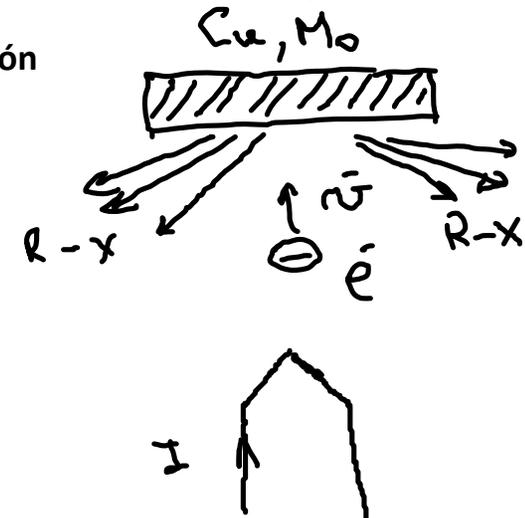
$$E = h \nu = hc/\lambda$$

donde h es la constante de Planck $h = 6.62 \cdot 10^{-27}$ erg/s.

Es decir que la radiación tiene el carácter dual onda-partícula.

Espectro continuo de radiación

La generación de Rayos-X se produce durante la aceleración (desaceleración) de una partícula cargada eléctricamente, por ejemplo el electrón. En el caso de la generación de Rayos-X en el laboratorio, funciona de acuerdo con la figura.



Propiedades y Producción de Rayos-X

El e⁻ emitido por un filamento es acelerado por un potencial eléctrico V, luego impacta en un blanco de un metal, típicamente Cu o Mo. En el momento del impacto la energía cinética del electrón es,

$$K = eV = \frac{1}{2} m v^2$$

De toda la energía cinética del electrón en el momento del impacto solo el 1% se convierte en Rayos-X.

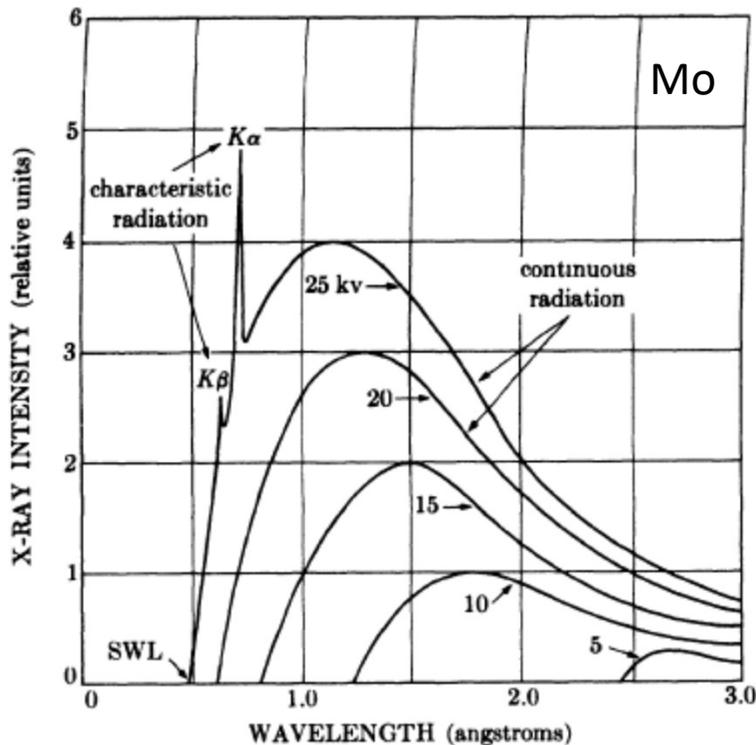
Si analizamos la intensidad de los Rayos-X luego del impacto de los electrones en el metal, se obtiene lo que se denomina el espectro continuo.

- El espectro continuo depende del potencial eléctrico de aceleración.
- - Existe un valor umbral de λ a partir del cual existe emisión de Rayos-X.
- La emisión de Rayos-X crece primero en intensidad y luego decrece
- Para las curvas obtenidas con mayor potencial de aceleración se observan picos bien definidos denominados radiación característica.

El espectro continuo se debe a la emisión de Rayos-X por parte del electrón que se desacelera en el material debido a la interacción con los átomos. La menor longitud de emisión (máxima energía) corresponde a la energía cinética del electrón es decir,

$$eV = h\nu_{max} = \frac{hc}{\lambda_{min}}$$

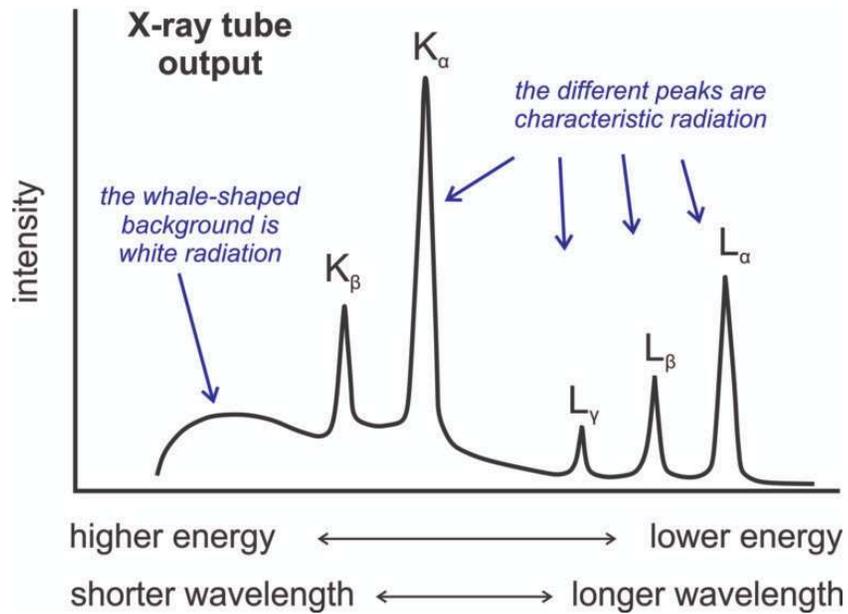
$$\lambda_{min} = \frac{hc}{eV} \approx \frac{12400}{V}$$



Propiedades y Producción de Rayos-X

Espectro característico

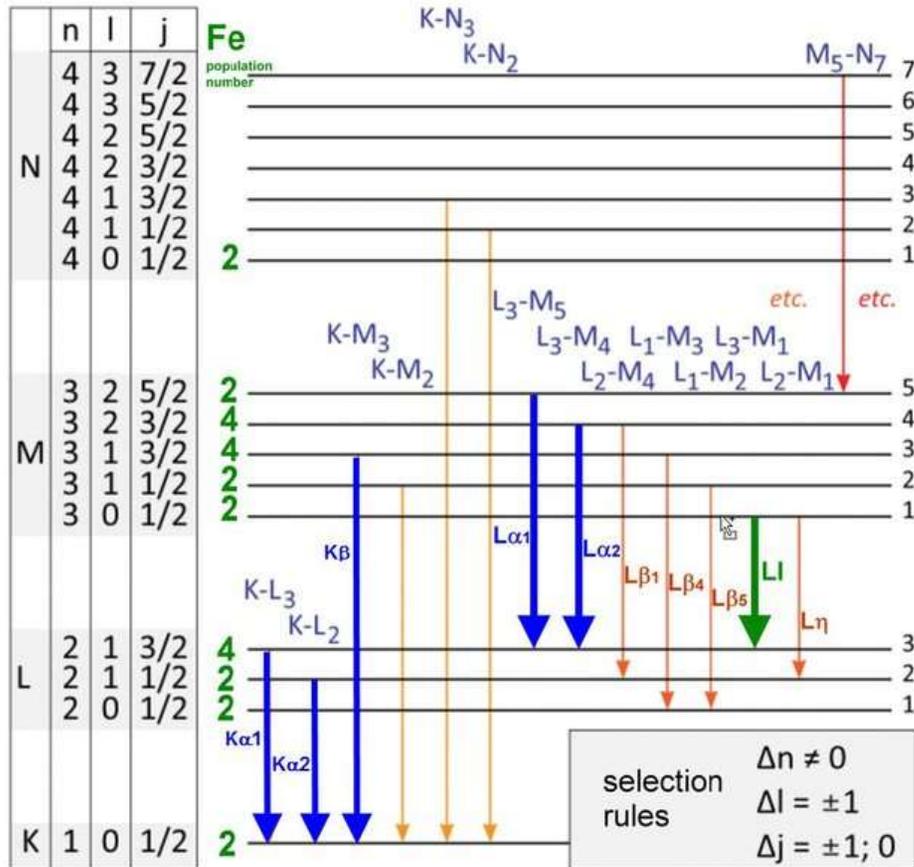
En la Figura anterior puede verse que cuando el voltaje aumenta por encima de cierto valor se observan picos de gran intensidad para determinadas longitudes de onda. Estos picos no cambian con el potencial y son característicos del blanco. Estas líneas se separan en grupos K, L, M etc, siendo las líneas K las más intensas





Propiedades y Producción de Rayos-X

Para entender el origen de las líneas características necesitamos revisar la estructura electrónica del átomo, es decir los distintos niveles de energía que ocupan los electrones, que se agrupan según las capas K, L y M.



. Inmediatamente un electrón de otros niveles de energía (L, M, N, ..) ocupará ese lugar vacante, emitiendo radiación (fotones) de energía correspondiente a la diferencia de energía entre los dos niveles, para nuevamente colocar el átomo en su estado normal. Esta radiación tienen un λ bien definido resultando en un pico bien angosto e intenso.

Esta característica vuelve los experimentos de difracción muy útiles dado que en muchos experimentos es necesario radiación monocromática.

Es evidente la necesidad de que los e- sean acelerados con un potencial eléctrico suficiente para excitar la capa K. Los valores para los distintos blancos se detallan en la Tabla.

Table 2-3. X-ray Wavelengths Most Useful in Diffraction Studies^a

Element	$K\alpha_1$ (Å)	$K\alpha_2$ (Å)	Un-resolved ^b $K\alpha$ (Å)	$K\beta_1$ (Å)	K Absorption Edge (Å)	Excitation Potential (kV)
Ag	0.55941	0.56380	0.56084	0.49707	0.4859	25.52
Mo	0.70930	0.71359	0.71073	0.63229	0.6198	20.00
Cu	1.54056	1.54439	1.54184	1.39222	1.3806	8.98
Ni	1.65791	1.66175	1.65919	1.50014	1.4881	8.33
Co	1.78897	1.79285	1.79026	1.62079	1.6082	7.71
Fe	1.93604	1.93998	1.93735	1.75661	1.7435	7.11
Cr	2.28970	2.29361	2.29100	2.08487	2.0702	5.99

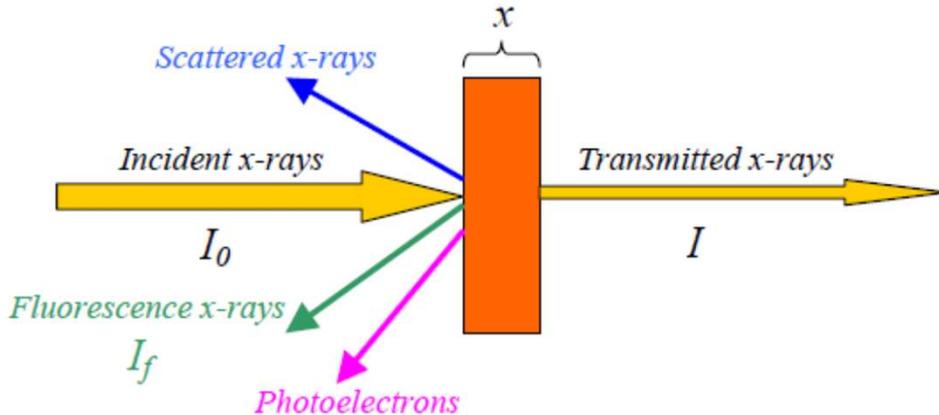
Si la energía del electrón es lo suficientemente elevada para eyectar un electrón del nivel K, el átomo pasa a estar en un estado excitado.

Obs.: La intensidad de la línea $K\alpha_1$ es el doble de $K\alpha_2$ debido a que la población de electrones en el nivel L_3 ($4e^-$) es el doble de la población de electrones en el nivel L_2 ($2e^-$)

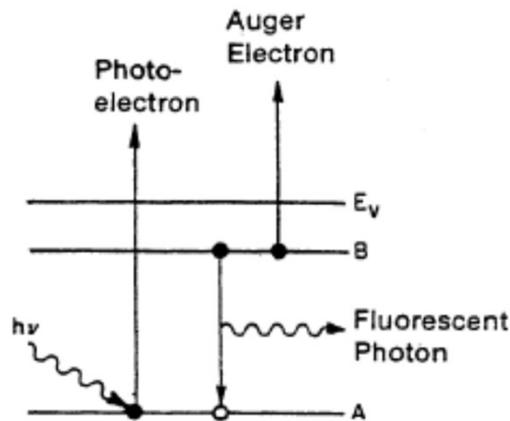
Obs.: La relación entre la intensidad de la línea $K\alpha$ respecto de la $K\beta$ es 5:1.

Absorción de Rayos-X

Así como para la producción de Rayos-X es necesario analizar la interacción de los e⁻ con el blanco, luego resulta necesario considerar las interacciones de la radiación (Rayos-X) con la muestra .



Como resultado de la interacción de los Rayos-X con la materia se activan diversos procesos, como son la generación de fotoelectrones, fluorescencia, e⁻ Auger, etc, además parte del haz es dispersado y el resto es transmitido.



La absorción de la radiación por parte del material es cuantificada comparando el haz transmitido respecto del incidente.

Experimentos muestran que la intensidad de los Rayos-X decrece a medida que atraviesa un material homogéneo según la ecuación diferencial,

$$-\frac{dI}{I} = \mu dx$$

Si integramos esta ecuación,

$$I(x) = I_0 e^{-\mu x}$$

Es decir a medida que la radiación atraviesa el material, la intensidad decae exponencialmente. En este caso μ se denomina coeficiente de absorción lineal, I_0 es la intensidad del haz incidente e $I(x)$ es la intensidad del haz transmitido luego de atravesar un espesor x .

Como μ es proporcional a la densidad ρ , resulta que μ/ρ es una constante del material e independiente de su estado (sólido, líquido, gas) y lo denominamos coeficiente de absorción másico,

$$I(x) = I_0 e^{-\left(\frac{\mu}{\rho}\right)\rho x}$$

Si la sustancia contiene más de un elemento químico, resulta,

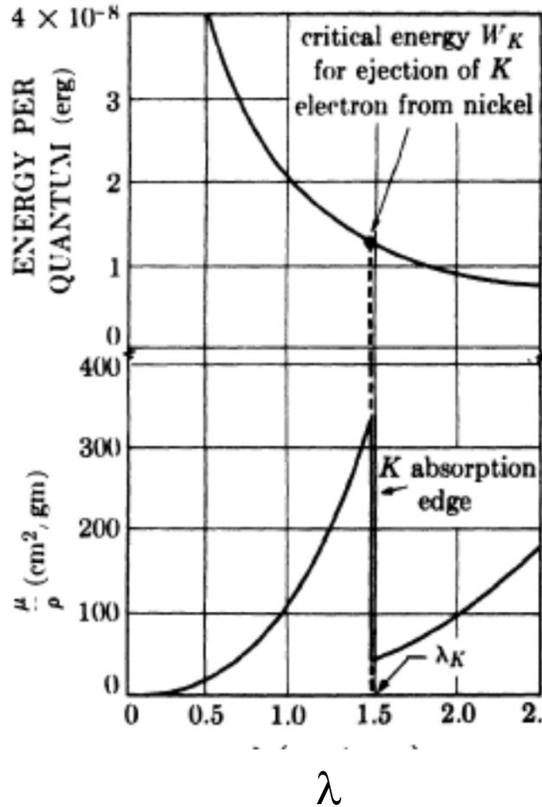
$$\frac{\mu}{\rho} = \omega_1 \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_1 + \omega_2 \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_2 + \dots$$

Donde ω_i es la fracción en peso del elemento i -ésimo.



Absorción de Rayos-X

El coeficiente de absorción μ es función de la energía de la radiación incidente. Si variamos la energía de los fotones y medimos la absorción se obtiene una curva como se muestra en la figura,



A una dada energía W_K , se observa una discontinuidad que indica un aumento de la absorción abrupta que tiene que ver con la excitación de un e^- en el nivel K (en este caso del Nickel) y la creación de fotoelectrones.

Observar que a medida que aumenta E , μ tiende a disminuir y por lo tanto la penetración de los Rayos-X es mayor.

Ejemplo. Los elementos de Z grande son buenos absorbentes de Rayos-X. Esto explica porque se usa Pb para fabricar pantallas protectoras de radiación de Rayos-X. Veamos porque,

Calcular la fracción de radiación de Mo-K α ($\lambda = 0.71 \text{\AA}$) transmitido por una pantalla de Pb de 1 mm de espesor si $\mu/\rho = 141 \text{ cm}^2/\text{gr}$ y $\rho = 11.34 \text{ gr/cm}^3$ y $Z_{\text{Pb}} = 82$.

$$\text{Como } I = I_0 e^{-(\frac{\mu}{\rho}) \rho x}$$

$$\frac{I}{I_0} = e^{-(\frac{\mu}{\rho}) \rho x}$$

$$\therefore \frac{\mu}{\rho} \rho x = 141 \frac{\text{cm}^2}{\text{gr}} \cdot 11.34 \frac{\text{gr}}{\text{cm}^3} \cdot 0.1 \text{ cm} = 160$$

$$\Rightarrow \frac{I}{I_0} = e^{-160} = 3.25 \cdot 10^{-70}$$

Si en lugar de Mo-K α usamos Cu-K α
 $\lambda = 1.542 \text{\AA}$ y $(\mu/\rho) = 241$

$$\therefore \frac{\mu}{\rho} \rho x = 273 \Rightarrow \frac{I}{I_0} = e^{-273} \sim 0$$

Ahora vamos a calcular a que distancia el haz decae $I/I_0 = 1/e \sim 0.36$

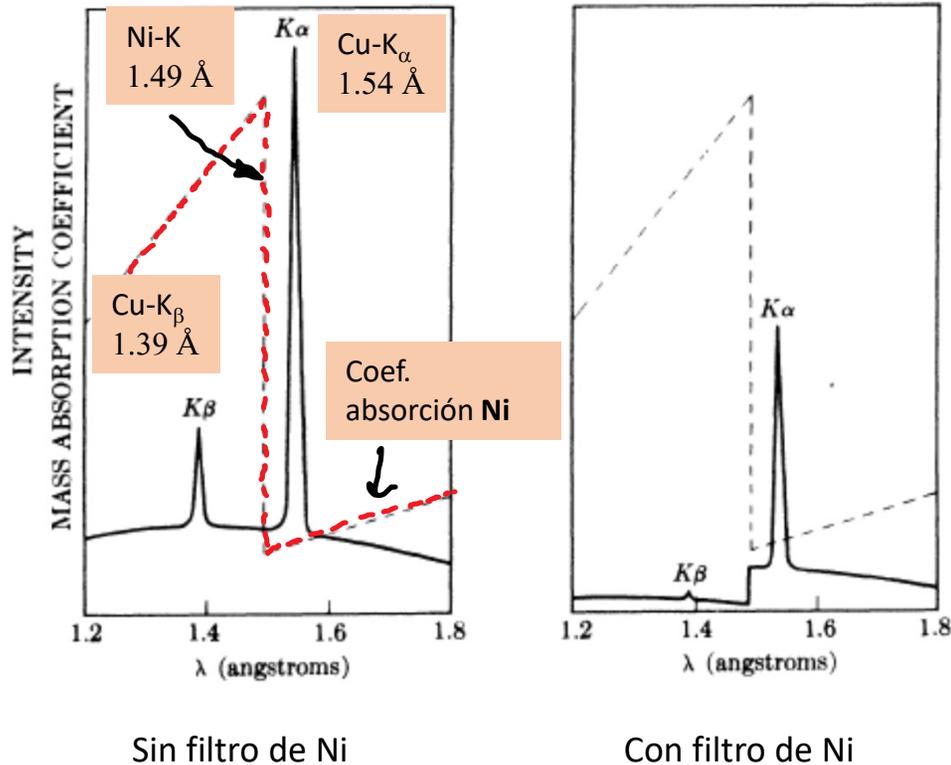
$$\frac{I}{I_0} = \frac{1}{e} = 0.36 = e^{-\frac{\mu}{\rho} \rho x} \Rightarrow$$

$$x = - \frac{\ln 0.36}{(\frac{\mu}{\rho}) \rho} = 7.73 \cdot 10^{-4} \text{ cm} \sim 4 \mu\text{m}$$

Absorción de Rayos-X

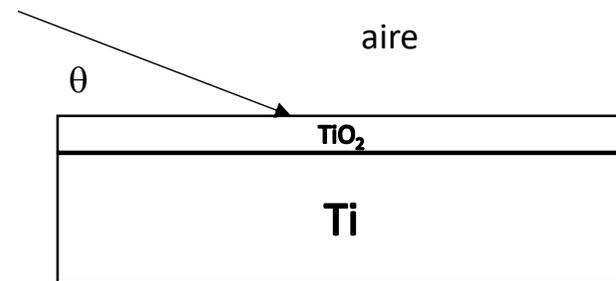
Filtros

El absorción de Rayos-X por parte de la materia y la existencia de discontinuidades y aumentos abruptos de la absorción en determinados valores de energía permite el diseño de filtros de Rayos-X, con el objetivo de lograr radiación lo más monocromática que sea posible.



Tube anode material	Beta-filter material	Thickness [μm]	Kβ intensity reduction [%]	Kα intensity reduction [%]
Mo	Zr	75	97	54
Cu	Ni	20	99	58
Co	Fe	16	99	51
Cr	V	13	98	45

Problema propuesto 1. Considerar una película de TiO_2 de espesor $d = 1 \mu\text{m}$ sobre un sustrato de Ti metálico, sobre la cual incide un haz de Rayos-X $\text{Cu-K}\alpha$ de longitud de onda 1.542 Å formando un ángulo θ . Considerando que el $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_0 = 12.7 \frac{\text{cm}^2}{\text{gr}}$ y $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{\text{Ti}} = 204 \frac{\text{cm}^2}{\text{gr}}$, $P_{\text{MO}} = 16 \text{ gr}$, $P_{\text{MTi}} = 79.87 \text{ gr}$ y la densidad del TiO_2 es $\rho_{\text{TiO}_2} = 4.23 \text{ gr/cm}^3$, determinar el ángulo de incidencia para que la intensidad del haz de Rayos-X en la interface TiO_2/Ti sea un 30 % de la inicial.



Los valores para el coeficiente de absorción relativo para distintas longitudes de onda características se encuentran tabulados, ver por ejemplo: Elements of X-Ray diffraction. B. D. Cullity

→ Difractómetro de Laboratorio

Fuentes de Rayos-X

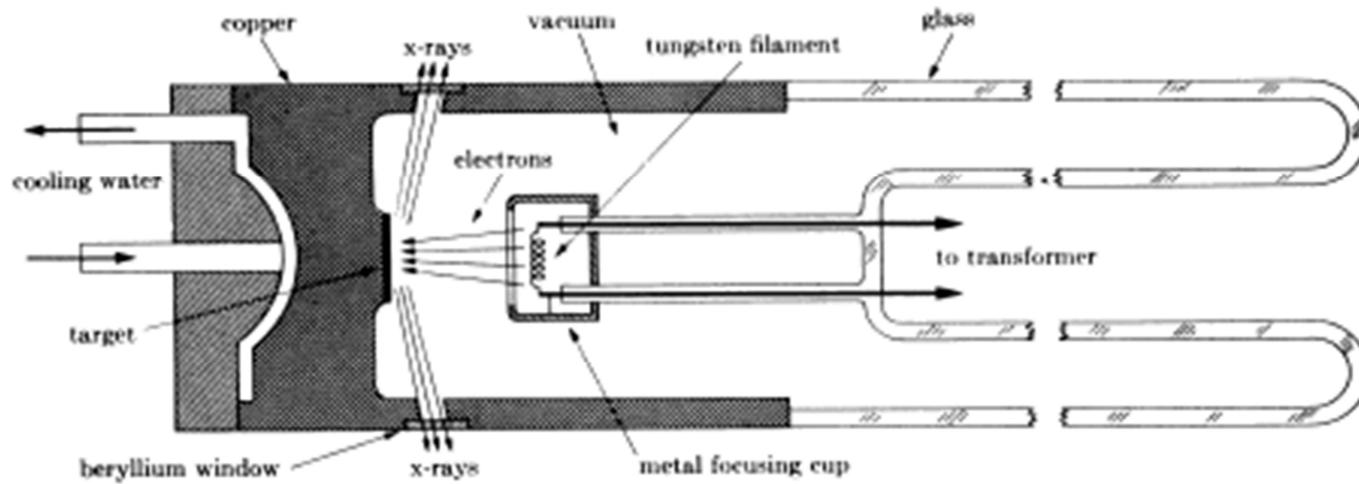
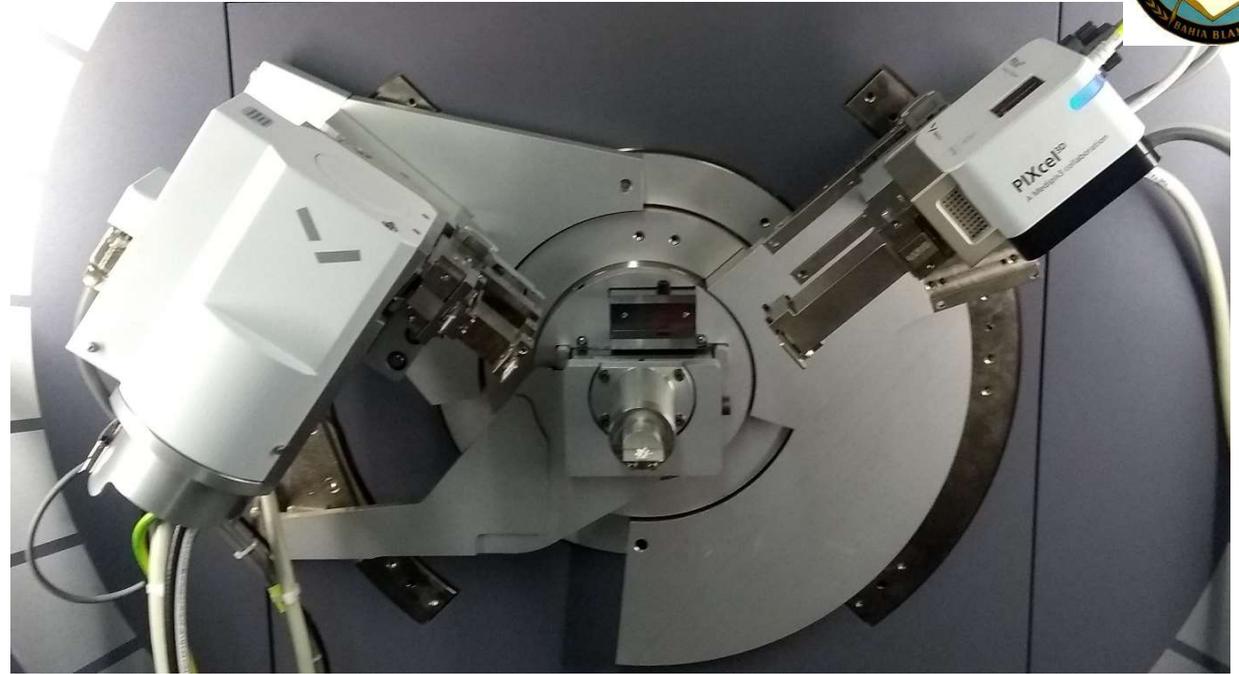
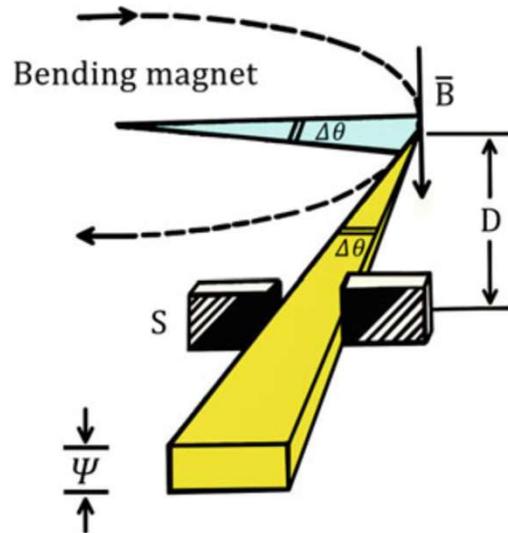
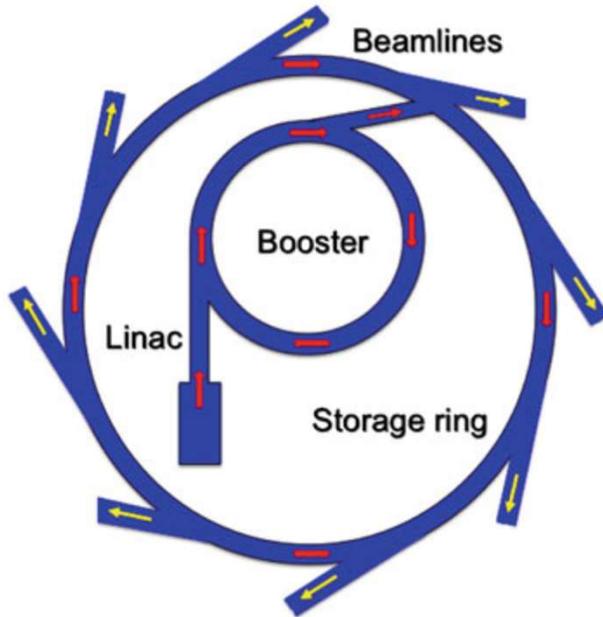


FIG. 1-13. Cross section of sealed-off filament x-ray tube (schematic).

Otra fuente de Rayos-X: Sincrotrón



$$\text{si } v \sim c$$

$$\Psi \sim \gamma^{-1} = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

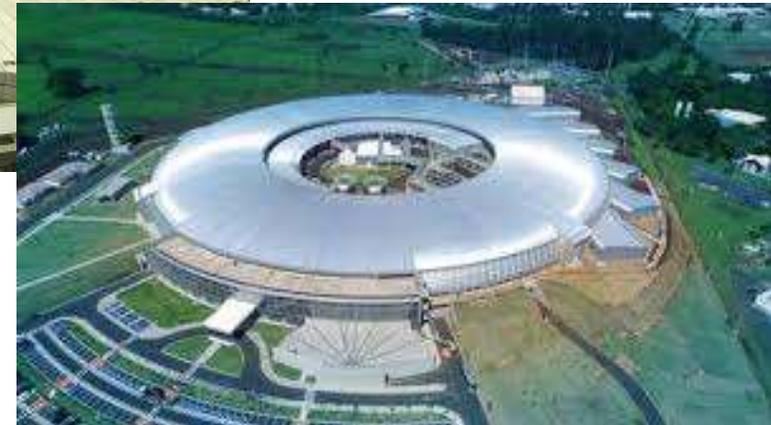
$$\Psi \sim 0$$

Principales propiedades de la radiación sincrotrón:

1. Elevada intensidad
2. Rango espectral amplio y continuo desde infrarrojo hasta la region de Hard X-ray;
3. Colimación angular estrecha;
4. Elevado grado de polarización;



Sirius – Campinas-Brasil



LNLS – Campinas-Brasil