

Rayos X

Andrés Felipe Arias* and María Margarita Ruiz**

Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia.

(Dated: 25 de octubre de 2024)

La práctica tuvo como objetivo estudiar la generación de rayos X para diferentes materiales, realizando medidas para los espectros característico y continuo del cobre, así como la absorción de los rayos. Medimos las líneas de emisión k_α y k_β con posiciones de $1,546 \pm 0,004 \text{ \AA}$ y $1,398 \pm 0,004 \text{ \AA}$ y energías $E_\alpha = 8,02 \pm 0,03$ y $E_\beta = 8,87 \pm 0,03$, valores a una desviación de $\approx 1\sigma$ del valor de la literatura y una precisión de $\approx 35\%$. Así mismo, se midió la constante de proporcionalidad de la intensidad de emisión para ambos picos $b_\alpha = 66,3 \pm 0,9$ y $b_\beta = 16,6 \pm 0,2$ como un promedio de los valores calculados por tres ajustes diferentes a diferentes series de datos. Adicionalmente, se calcularon los coeficientes de absorción promedio de Aluminio y Zinc, de $4,8 \text{ mm}^{-1} \pm 1,23$ y $28,1 \text{ mm}^{-1} \pm 7,22$, respectivamente. Con el espectro continuo se calculó la constante de Planck, que se obtuvo equivalente a $4,123 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s} \pm 0,07$, que se encuentra a $2,14\sigma$ del valor real.

I. INTRODUCCIÓN

Los rayos X son radiación electromagnética de alta energía, generada usualmente por partículas cargadas que, al tener alta velocidad, se desaceleran en frente de un material metálico. Cuando los electrones toman un electrón de un orbital interior de los átomos que constituyen el material, se genera la transición de un electrón superior al vacío dejado por el electrón que se fue, lo que causa un espectro de radiación discreto. Adicionalmente, la radiación generada por el frenado de los electrones dentro del material crea un espectro continuo.

En la figura 1 se observa una curva de intensidad de rayos X para el cobre, donde se distingue que, debajo de una longitud de onda mínima, la intensidad es cero. La longitud de onda está descrita por la ley de Duane-Hunt, definiendo que para una diferencia de potencial UA se tiene que la longitud de onda mínima es equivalente a $12,40/U_A$.

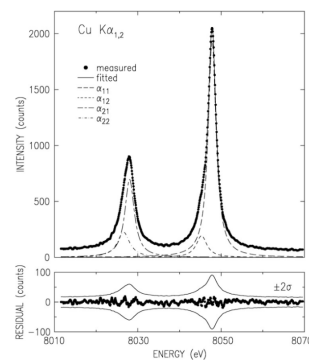


Figura 1. *Espectro característico del cobre.* Se observa una gráfica de intensidad respecto a energía donde se distinguen los picos del espectro característico del cobre, k_α y k_β . Imagen tomada de [1].

También en la curva de intensidad 1 se observan picos definidos correspondientes a la radiación característica del material, que en este caso es cobre. Estos picos se denotan k_α y k_β , con longitudes de onda $1,54056 \text{ \AA}$ y $1,54439 \text{ \AA}$, respectivamente. En el momento de frenado de los rayos X, hay una interacción por medio de los efectos fotoeléctrico y Compton, por lo que la intensidad decae de forma exponencial:

$$I = I_0 \exp\{-\mu(\lambda, Z)d\} \quad (1)$$

En la ecuación previa μ es el coeficiente de absorción lineal, que depende de la longitud de onda y el número atómico. Adicionalmente, I_0 es la intensidad del rayo que incide, I la intensidad del rayo luego de atravesar una distancia d del material. Con esto, $\mu/\rho = k\lambda^3 Z^3$. Finalmente, a partir de la ley de Bragg se conoce la relación entre la distancia interplanar d , el ángulo de incidencia θ y la longitud de onda λ : $2d\sin\theta = n\lambda$, teniendo n como los números naturales.

Así, esta práctica tiene como objetivo el estudio de la producción de rayos X para distintos materiales y

* Correo institucional: a.ariasv@uniandes.edu.co

** Correo institucional: mm.ruiz31@uniandes.edu.co

condiciones, teniendo como propósito medir los espectros característico y continuo del cobre, con lo que se obtendrán la constante de Planck, los coeficientes de absorción, el cambio de longitud de onda y de intensidad.

II. MONTAJE EXPERIMENTAL

A. Montaje

El montaje proveído por la universidad consiste en un módulo de rayos X fabricado por Phywe [2] y un PC con un software para coordinar la toma de datos y extraerlos para su análisis.

El montaje funciona de manera que, al tener electrones que golpean el tubo de cobre de rayos X (ánodo metálico), se genera una distribución continua de energía en forma de rayos X.

En la figura se observan los componentes internos del montaje del experimento, donde el tubo contador Geiger-Müller (GM) mide la intensidad de la radiación que es generada por el tubo de cobre de rayos X, que a su vez se selecciona con un monocristal en función del ángulo de incidencia 3.

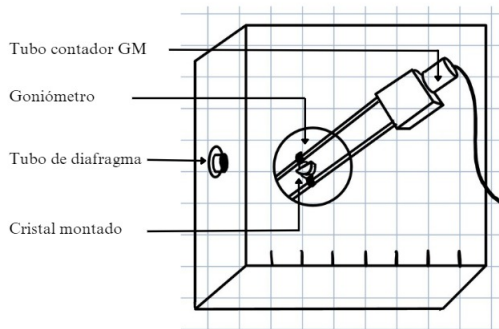


Figura 2. *Diagrama de funcionamiento mecánico del módulo de rayos X.* En el diagrama se ilustra el funcionamiento del módulo que incluye: contador GM, goniómetro, tubo de diafragma y cristal montado.



Figura 3. *Montaje completo del módulo de rayos X.* El módulo incluye la unidad del experimento, un tubo insterable de cobre de rayos X, un goniómetro, un set de diafragmas y colimadores, y un PC. Imagen tomada de [2].

Al iniciar la práctica se debe conectar el PC mediante un cable USB e inicializar el software de medición

B. Procedimiento experimental

1. Calibración del equipo de rayos X

Insertando el tubo de cobre, el diafragma de mayor ancho del montaje, el cristal LiF, se establece tensión de 35kV y corriente de 1mA. Revisando que la relación entre el ángulo del detector y del cristal se mantenga de 2:1, giramos la rueda del ángulo de incidencia para buscar el valor máximo de intensidad para la combinación del cristal y el tubo de cobre. Se calcula entonces la desviación entre el valor máximo esperado, 22.6° , y el obtenido, el cual será usado para ajustar manualmente el cero de las posteriores mediciones de ángulos..

2. Rayos característicos del cobre

Se usó el diafragma mas grande (2mm) en la salida del tubo de rayos X y el cristal de LiF. Realizamos un barrido de 3° y 49° (Mediciones directamente del montaje, sin considerar desplazamiento encontrado en la calibración) a una tensión constante de 35Kv y 1mA y tomando un paso de 0.1° con un tiempo de integración de 3s. Se midió la intensidad incidente en función del ángulo, e aplicamos la debida desviación angular.

3. Absorción de rayos X

En esta actividad se tomó la absorción de los rayos X en función del material y su grosor, usando en este caso Zinc (Zn) y Aluminio (Al). Instalando el tubo de rayos X y el diafragma más grande disponible en el montaje,

se tomó el espectro a tensión constante de 30kV, tiempo de integración de 50s, corriente de emisión de 1 mA, y ángulo variable entre 6° y 16°. De manera adicional se tomó la absorción sin material.

4. Dependencia de intensidad de voltaje y corriente del ánodo

Medimos el espectro característico del cobre para diferentes valores de voltaje y corriente. Para ello, se realizó un barrido en la región de interés entre 17° y 21°. Se tomaron dos series de datos. La primera consistió en mantener el voltaje a 35Kv y variar la corriente en pasos de 0,1mA – 1mA en pasos de 0,1mA. Así mismo, se tomó una serie a corriente constante de 1mA variando la tensión entre 11kV – 35kV con pasos de 2kV.

5. Ley de Duane-Hunt

Usando el diafragma/colimador de 2mm, el cristal LiF y el tubo de cobre, con tiempo de exposición de 2s, corriente de 1mA, y paso angular de 0.1°, se realizó un barrido de voltaje entre 13kV y 35kV con pasos de 2kV y un barrido de ángulos entre 10° y 21°.

III. RESULTADOS Y ANÁLISIS

1. Calibración del equipo de rayos X

Como mencionado anteriormente, se encontró el ángulo para el valor máximo de intensidad para la combinación del tubo de cobre y el cristal. Tomando el valor máximo esperado, se obtuvo que:

Sesión	Ángulo máximo θ_{max}	Incertidumbre $\Delta\theta$
1	20,8	1,8
2	20,1	2,5

Cuadro I. Calibración del ángulo de intensidad máxima. Para ambas sesiones se realizó el proceso de calibración para ajustar las tomas de datos para los ángulos.

2. Rayos característicos del cobre

Observamos 4 picos bien definidos en el espectro del cobre, correspondientes a los primeros y segundos ordenes de difracción de las líneas de emisión k_α y k_β . Los datos experimentales se muestran en la figura 4, en la que se usó la ley de BraggI con $n = 1$ para convertir el ángulo de incidencia en longitud de onda. También

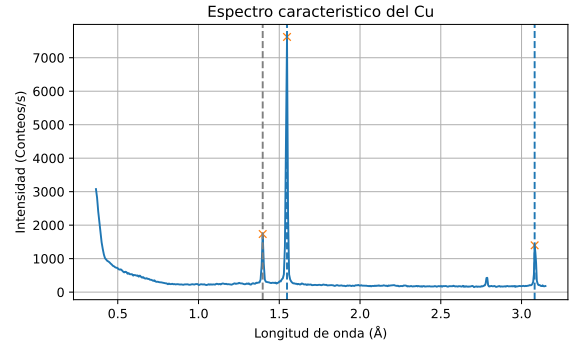


Figura 4. Mediciones del espectro característico del cobre. Se usó la ley de Bragg a primer orden para calcular la longitud de onda. Se observan 4 picos bien definidos correspondientes a los primeros dos ordenes de difracción de las líneas k_α y k_β .

se puede ver que a longitudes de onda pequeña se observa también un crecimiento de la intensidad el cual se debe a que el detector se encuentra directamente al frente de la fuente de rayos X, por lo que puede recibir radiación que no ha sido difractada por el cristal. Por ello, es conveniente remover estos datos, ya que no contribuyen ninguna información relevante para el análisis. Así mismo, nos centramos en la región de interés que contiene los primeros dos picos, donde es válido usar la ley de Bragg a primer orden de difracción. Estos datos se muestran en la figura 5.

Así mismo, se ajustaron dos perfiles diferentes a los picos del espectro, con el fin de hallar la longitud de onda de la línea de emisión. Se ajustó un perfil Lorentziano de la forma:

$$L = \frac{A_{max}}{1 + \left(\frac{x-x_0}{w/2}\right)^2} + D \quad (2)$$

Con FWHM:

$$FWHM = 2w \quad (3)$$

y un perfil de Voigt, donde $G(x, \sigma)$ es un perfil gaussiano:

$$V(x; \sigma, w) = G(x, \sigma, x_0) * L(x, w, x_0) + D \quad (4)$$

Con FWHM que se puede aproximar como [3]:

$$FWHM \approx w + \sqrt{w^2 + 8\sigma^2 \ln(2)} \quad (5)$$

Los ajustes con sus respectivos residuales se muestran en la figura 5.

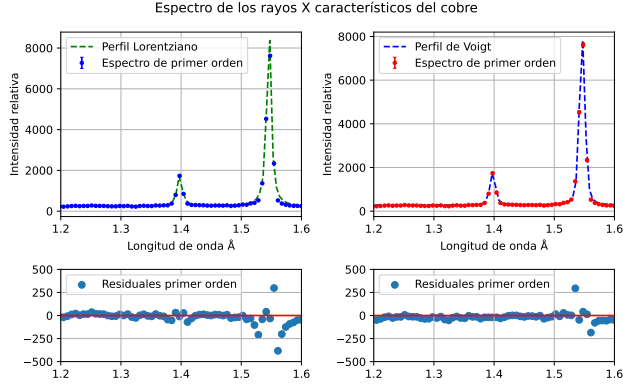


Figura 5. Perfiles del espectro característico para la región de interés. Se ajustó un perfil Lorentziano y un perfil de Voigt que reproducen adecuadamente los picos de primer orden. La incertidumbre de los valores experimentales se tomó como \sqrt{N} , ya que estos deberían seguir una distribución de Poisson. Encontramos las posiciones $k_\alpha = 1,546 \pm 0,004\text{\AA}$ y $k_\beta = 1,398 \pm 0,004\text{\AA}$.

De los coeficientes de los ajustes podemos obtener la posición de los picos, tomando su longitud de onda como el parámetro x_0 y su incertidumbre como $\sigma_\lambda = FWHM/2$, ya que se asume que el ancho de los picos medidos es el mínimo detalle que puede resolver el espectroscopio. Los resultados se muestran en la siguiente tabla (Cuadro II), comparados con su valor teórico [4].

	$\lambda_{teo}(\text{\AA})$	$\lambda_L(\text{\AA})$	$\lambda_V(\text{\AA})$	$E_{teo}(keV)$	$E_{exp}(keV)$
k_β	1,39222	$1,398 \pm 0,005$	$1,398 \pm 0,004$	8,906	$8,87 \pm 0,03$
k_α	1,54184	$1,546 \pm 0,004$	$1,546 \pm 0,008$	8,042	$8,02 \pm 0,03$

Cuadro II. Longitudes de onda de los picos para los diferentes perfiles. Los valores son consistentes entre los diferentes perfiles, con valores cercanos a la longitud de onda reportada en la literatura [4]. También se reporta la energía de los picos calculada con la relación de Planck $E = \frac{hc}{\lambda}$.

3. Absorción de rayos X

Se realizó un barrido de ángulos de 6° a 12° y tomando series para diferentes grosores de Zinc y Aluminio. Con esto se obtuvo las siguientes gráficas:

Adicionalmente, para obtener el coeficiente de absorción de cada material a partir de la ecuación $I = I_0 e^{-\mu d}$, se linealiza la relación y se grafica $\ln(I/I_0)$ respecto al grosor.

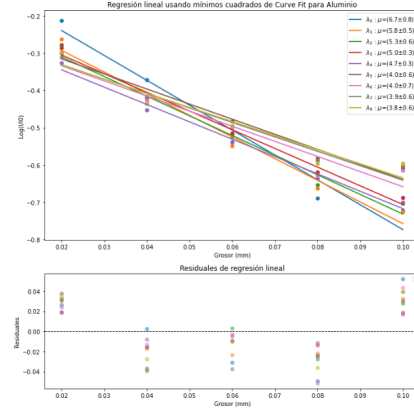


Figura 6. $\ln(I/I_0)$ respecto al grosor del Aluminio. Se graficó la relación lineal entre la intensidad normalizada y el grosor para obtener el coeficiente de absorción del Aluminio. Se hizo un ajuste de mínimos cuadrados con Curve Fit de Scipy.

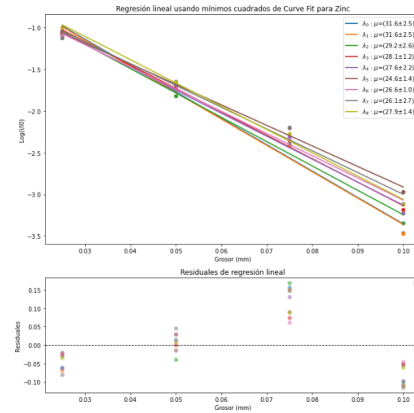


Figura 7. $\ln(I/I_0)$ respecto al grosor del Zinc. Se graficó la relación lineal entre la intensidad normalizada y el grosor para obtener el coeficiente de absorción del Zinc. Se hizo un ajuste de mínimos cuadrados con Curve Fit de Scipy.

A partir del ajuste lineal realizado con mínimos cuadrados de Curve Fit de Scipy se obtuvo el coeficiente de absorción para cada longitud de onda del material correspondiente.

Longitud de onda (Å)	$\mu(mm^{-1})$ de Al	$\mu(mm^{-1})$ de Zn
0,42	$6,7 \pm 0,8$	$31,6 \pm 2,5$
0,46	$5,8 \pm 0,5$	$31,6 \pm 2,5$
0,49	$5,3 \pm 0,6$	$29,2 \pm 2,6$
0,53	$5,0 \pm 0,3$	$28,1 \pm 1,2$
0,56	$4,7 \pm 0,3$	$27,6 \pm 2,2$
0,59	$4,0 \pm 0,6$	$24,6 \pm 1,4$
0,63	$4,0 \pm 0,7$	$26,6 \pm 1,0$
0,66	$3,9 \pm 0,6$	$26,1 \pm 2,7$
0,70	$3,8 \pm 0,6$	$27,9 \pm 1,4$

Cuadro III. Coeficientes de absorción de Aluminio y Zinc para cada longitud de onda.

A partir de los datos, III, se obtiene que para el Aluminio el coeficiente de absorción promedio es $4,8mm^{-1} \pm 1,23$, mientras que para el Zinc es $28,1mm^{-1} \pm 7,22$. Con estos datos III, se obtiene una gráfica para μ/ρ respecto al cubo de la longitud de onda, que representa la atenuación del material. Se realizó un ajuste cúbico de la forma $ax^3 + bx^2 + cx + d$ usando Curve Fit de Scipy. Se observa que los datos no son muy precisos al tener altas incertidumbres respecto al valor promedio.

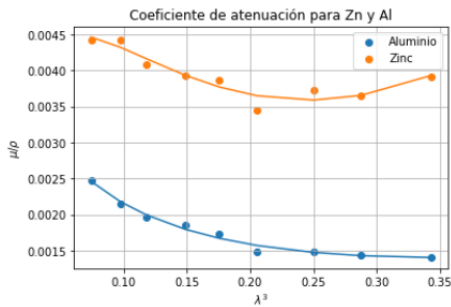


Figura 8. Atenuación de Aluminio y Zinc

Se observa que, al tener un mayor número atómico para el Zinc y consecuentemente mayor densidad, se tiene un mayor coeficiente de atenuación ante los rayos X que el Zinc. Esto se justifica por la forma de las tendencias para ambos materiales en la figura 8, dado que al ser mayor la razón entre el coeficiente de absorción y la densidad del material implica que su atenuación, a su vez, aumenta.

4. Dependencia de intensidad de voltaje y corriente del ánodo

Inicialmente, graficamos ambas series de datos para observar de manera empírica cual es la dependencia de la intensidad del espectro característico del cobre, al

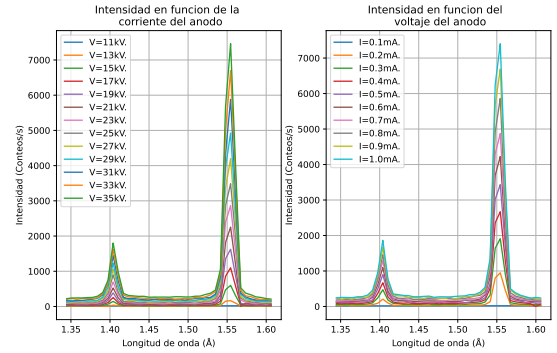


Figura 9. Intensidad del espectro característico para diferentes valores de tensión y corriente. Se muestran dos series de datos: una con corriente de 1mA (Izquierda) y otra con voltaje de 35kV.

variar la corriente y la tensión del ánodo del emisor de rayos X (figura 9). Como es de esperarse, la amplitud crece tanto con el aumento de la tensión como de la corriente, y los picos se mantienen en la misma posición.

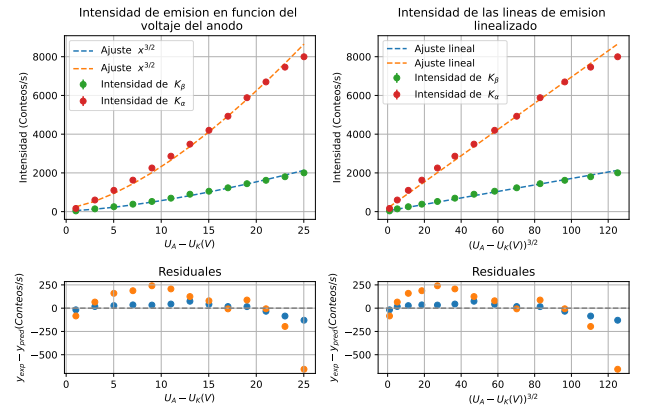


Figura 10. Intensidad de las líneas de emisión en función de la diferencia de potencial del ánodo. U_K corresponde a el potencial de ionización del orbital K del Cu. Se realiza un ajuste polinómico a los datos originales y un ajuste lineal a los datos linealizados.

Podemos observar mas explícitamente la dependencia de la intensidad si se grafican las intensidades de los picos en función de las variables de interés. Esto se muestra en las figuras 10 y 11, para las series donde se varia voltaje y corriente respectivamente. Nótese que en la figura 10, el eje x corresponde a la diferencia de potencial que sienten los electrones excitados de la muestra de cobre $U_A - U_K$, donde $U_K = 9,979keV$ es el potencial de ionización del orbital K. El modelo teórico de la intensidad de la emisión tiene la forma $I = bI_A(U_A - U_K)^{3/2}$ [5], por lo que se realizaron los ajustes correspondientes

para las figuras 11 y la 10.

Para la serie de datos en función de la diferencia del potencial del ánodo (figura 10) se ajustó un modelo polinómico proporcional a $(U_A - U_K)^{3/2}$, así como un modelo lineal a la serie de datos linealizada. De los residuales, podemos ver que ambos ajustes son aproximadamente igual de válidos.

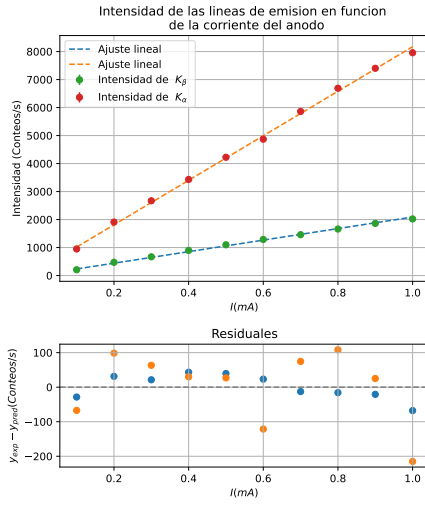


Figura 11. Intensidad de las líneas de emisión en función de la corriente del ánodo. Se realiza un ajuste lineal.

Similarmente, se realizó un ajuste lineal para los datos en función de la corriente (figura 11). Ya que conocemos los valores constantes podemos calcular el valor de la constante b del modelo teórico. Los resultados para cada línea espectral, para los diferentes ajustes se muestran en el cuadro IV

Línea	$b_{lin}^{V_{cte}}$	$b_{lin}^{I_{cte}}$	$b_{poly}^{I_{cte}}$	b_{prom}
k_α	$63,5 \pm 0,9$	$67,7 \pm 1,6$	$67,7 \pm 1,6$	$66,3 \pm 0,9$
k_β	$16,4 \pm 0,3$	$16,7 \pm 0,4$	$16,7 \pm 0,4$	$16,6 \pm 0,2$

Cuadro IV. Coeficiente b calculado con los diferentes ajustes de las figuras 10 y 11. Las unidades de b son $[(keV^{-3/2}mA)]$

5. Ley de Duane-Hunt

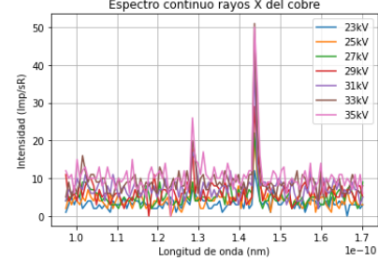


Figura 12. Gráfica de intensidad respecto a longitud de onda. En esta gráfica se observa el espectro continuo del cobre debido a la radiación de frenado de los rayos X.

A partir de los datos obtenidos en la gráfica 12 se extrae el valor mínimo de longitud de onda donde comienza el fenómeno Bremsstrahlung. Con esto, se realizó una gráfica 13 para observar la relación lineal entre el valor mínimo de λ y el inverso de voltaje, teniendo un barrido entre 23kV y 35kV con un paso de 2kV.

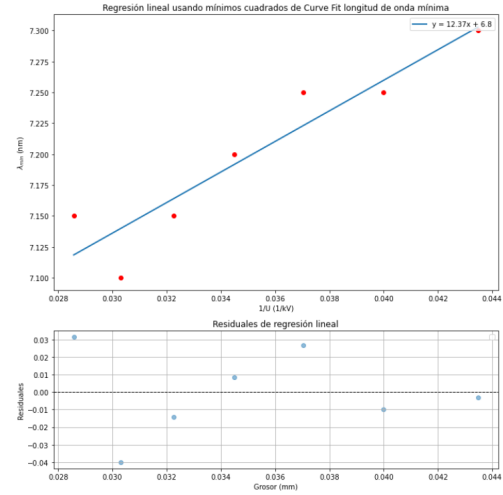


Figura 13. Ajuste lineal para longitud de onda mínima. Se realizó un ajuste lineal usando mínimos cuadrados de Curve Fit de Scipy con el fin de obtener la pendiente para próximos cálculos.

A partir de los parámetros calculados a partir de la regresión lineal realizada 13, se puede calcular la constante de Planck. Tomando la relación $h = me/c$, donde m corresponde a la pendiente obtenido en 13, se calcula que $h = 4,123 \cdot 10^{-15} eV \cdot s \pm 0,07$. Este valor es muy cercano al valor teórico de $4,135 \cdot 10^{-15} eV \cdot s$. y es de incertidumbre pequeña, por lo que se concluye que el experimento fue tanto exacto como preciso.

IV. CONCLUSIONES

En primer lugar, observamos claramente los picos del espectro característico del cobre. Observando los residuales de la figura 5, observamos que ambos ajustes se acercan bastante a los valores experimentales, mostrando únicamente un error significativo en los inicios de los picos donde la función cambia súbitamente. Aun así, los residuales siguen estando centrados en cero sin ninguna tendencia clara, por lo que los ajustes fueron adecuados. Observamos que el perfil de Voigt se ajusta ligeramente mejor a los datos experimentales. De los perfiles calculamos los valores de la energía de las líneas de emisión, con una desviación de $\approx 1\sigma$ del valor de la literatura [4], y un error porcentual de $\approx 35\%$. Por lo tanto, podemos concluir que en las mediciones hubo tanto precisión como exactitud. Esto debido a que se realizó el debido proceso de calibración, siempre garantizando que el detector no se saturara. Así mismo, como se incluyó un término de offsets en los perfiles, la radiación de fondo no fue una fuente significativa de error. La principal fuente de error del experimento puede ser la incertidumbre en las mediciones de ángulo, e impurezas en el cristal que afecten la regularidad de la estructura

cristalina de este.

En cuanto a la absorción de rayos X, se observa que los datos para diferentes grosores sí siguen un comportamiento lineal al tener residuales centrados en 0. Con esto se verifica la expresión exponencial para la intensidad de radiación dependiente de la intensidad del rayo incidente y del grosor del material. Asimismo, se distingue al diferencia de atenuación entre el Zinc y el Aluminio al tener estos diferentes densidades debido a sus números atómicos.

Por otro lado, observamos la dependencia de la intensidad de emisión crece al aumentarse tanto la tensión como la corriente del ánodo. Esto es de esperarse ya que a mayores valores de voltaje y corriente es más probable excitar un electrón para que este emita su radiación característica. Los ajustes calculados para la toma a corriente variable son idénticos entre sí, por lo que linealizar los datos no tuvo ningún efecto significativo. Así mismo, los valores de b son consistentes entre las series de datos, estando en un rango similar a una o dos desviaciones estándar entre sí.

Finalmente, respecto a la Ley de Duane-Hunt, donde se observó la radiación de frenado de rayos X, se calculó de manera exacta y precisa la constante de Planck al tener un ajuste lineal con residuales centrados en 0, lo que indica que los datos sí siguen la tendencia esperada.

-
- [1] D. M. et al., J Res Natl Inst Stand Technol **1**, 75 (2004).
 - [2] PHYWE, *Characteristic x-rays of copper*.
 - [3] J. Olivero and R. Longbothum, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **17**, 233 (1977).
 - [4] M. Deutsch, G. Hölzer, J. Härtwig, J. Wolf, M. Fritsch, and E. Foerster, Physical Review A **51**, 283 (1995).
 - [5] U. de los Andes, *Rayos X, Guías de laboratorio intermedio* (2024).
 - [6] K. W. Vugrin, L. P. Swiler, R. M. Roberts, N. J. Stucky-Mack, and S. P. Sullivan, Water Resources Research **43** (2007), <https://doi.org/10.1029/2005WR004804>.
 - [7] I. Hughes and T. Hase, *Measurements and Their Uncertainties: A Practical Guide to Modern Error Analysis* (OUP Oxford, 2010).

APÉNDICE DE CÁLCULO DE ERRORES

Los códigos donde se realizan los ajustes con su respectiva incertidumbre se encuentran a continuación: https://github.com/andresarias1105/Experimentos/blob/main/RayosX_Fit.ipynb, https://github.com/margarita1509/intermedio_mmrui31

Las incertidumbres de los parámetros de las regresiones son obtenidos directamente de la función *Curvefit* de Scipy, la cual estima el error basándose en una apro-

ximación lineal a la función modelo alrededor de los valores óptimos.[6].

Para la propagación de error se usó la formula:

$$\sigma_f = \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x}\sigma_x\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\sigma_y\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial z}\sigma_z\right)^2 + \dots} \quad (6)$$

Para la regresión lineal se utilizaron las siguientes formulas:

$$m = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \quad (7)$$

$$b = \frac{\sum y_i \sum x_i^2 - \sum x_i \sum x_i y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \quad (8)$$

$$\sigma_m = \sqrt{\frac{n \sum (y_i - mx_i - b)^2}{(n-2)(n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2)}} \quad (9)$$

$$\sigma_b = \sqrt{\left(1 + \frac{(\sum x_i)^2}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}\right) \frac{\sum (y_i - mx_i - b)^2}{n(n-2)}} \quad (10)$$

Para los valores promedios, se tomó el error como la desviación estándar de los valores experimentales, dividido por la raíz del doble del numero de datos -1:

$$s = \frac{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}{N-1}}}{\sqrt{2N-1}} \quad (11)$$

Para los valores de conteos se asumió que estos siguen una distribución de Poisson debido a que son producto de un decaimiento radioactivo estocástico. Por lo tanto,

la incertidumbre de estos valores es \sqrt{N} [7], donde N es el numero de conteos.

De acuerdo con la ecuación de propagación de errores, los errores de las variables calculadas son:

$$\sigma_E = \frac{hc}{\lambda^2} \sigma_\lambda \quad (12)$$

$$\sigma_h = \frac{\sigma_m}{c} \cdot 100 \quad (13)$$