

Core Level Spectroscopies

Taller #3 - Semana 4

Profesor Juan Gabriel Ramírez

Fecha de Entrega: miércoles 14 de febrero por BN
--

1. Utilice la ecuación de energía de transición $E_{\text{final}} - E_{\text{inicial}} = h\nu$ para explicar cómo se relaciona la energía de los fotones emitidos con la diferencia de energía entre los niveles electrónicos involucrados en la técnica de fluorescencia de rayos X (XRF).
2. Discuta cómo la ley de Moseley $\nu = A(Z - B)^2$ es fundamental para identificar elementos en una muestra mediante XRF, relacionando la frecuencia de los rayos X emitidos con el número atómico del elemento.
3. Explique la relevancia del efecto Compton, utilizando la ecuación $\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos\theta)$, en el contexto de la espectroscopía XRF y cómo afecta la interpretación de los espectros.
4. Discuta cómo la relación de incertidumbre de Heisenberg $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ afecta la elección de detectores para análisis específicos en XRF, considerando la resolución espectral necesaria.
5. Explique cómo la ley de Beer-Lambert $I = I_0 e^{-\mu x}$ se utiliza para cuantificar la concentración de elementos en una muestra mediante XRF, considerando la atenuación de los rayos X a través de la muestra.
6. La dispersión Rayleigh, o dispersión elástica, ocurre cuando los fotones de rayos X interactúan con los átomos de una muestra sin cambio en la energía (longitud de onda) del fotón, pero con un posible cambio en la dirección. Este fenómeno puede ser descrito considerando la interacción fotón-átomo como un proceso donde el fotón incidente induce una polarización temporal en el átomo, lo que a su vez emite radiación en diferentes direcciones sin cambiar su estado energético interno.

Utilizando el principio de conservación de la energía y el momento, junto con la teoría electromagnética clásica, derive una expresión para la intensidad de la luz dispersada por un único electrón (tratado como un oscilador armónico clásico) en función del ángulo de dispersión θ . Luego, discuta cómo la dispersión Rayleigh afecta la interpretación de los espectros XRF, especialmente en términos de la contribución de fondo y la necesidad de correcciones durante el análisis de muestras. Considere la relación entre la intensidad dispersada y el factor de forma atómico, y cómo esto puede influir en la detección de elementos ligeros versus elementos pesados en la muestra.

7. La capacidad para detectar elementos en la espectroscopía XRF depende significativamente de la energía de los fotones de fluorescencia emitidos, la cual está relacionada con las diferencias de energía entre los niveles electrónicos internos del átomo. Para elementos livianos, estas diferencias de energía son relativamente pequeñas, lo que resulta en la emisión de fotones de baja energía.

Utilizando la relación de energía de los fotones emitidos $E = h\nu$, donde E es la energía del fotón, h es la constante de Planck, y ν es la frecuencia del fotón, y considerando la ecuación de Rydberg para calcular la energía de ionización de un electrón en el nivel más bajo de un átomo hidrogenoide $E_n = -\frac{R_H Z^2}{n^2}$, donde R_H es la constante de Rydberg para el hidrógeno, Z es el número atómico del elemento, y n es el número cuántico principal:

- (a) Calcule la energía de los fotones de fluorescencia esperada para el litio ($Z=3$), asumiendo una transición electrónica desde el segundo nivel de energía ($n=2$) al nivel más bajo ($n=1$). Compare esta energía con la de un elemento más pesado, como el hierro ($Z=26$), para una transición similar.

- (b) Discuta por qué la baja energía de los fotones emitidos por elementos livianos como el litio presenta desafíos para su detección en XRF, considerando aspectos como la absorción por el aire, la eficiencia de los detectores de rayos X a bajas energías, y la resolución espectral.
8. Un típico detector de estado-sólido para XRF es construido con un cuerpo de silicio, germanio u otro material semiconductor. Una ventana de berilio permite a los fotones de rayos-X entrar en el detector. En el frente hay una capa inerte y atrás hay una placa colectora.

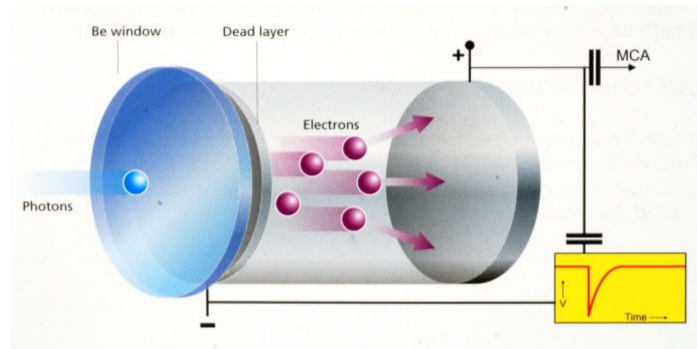


Figura 1: Detector básico XRF

Los fotones pasan a través de la ventana y penetran el cuerpo del detector para producir pares electrón-hueco en el cuerpo. El número de electrones depende de la energía de los electrones entrantes. Mientras más alta es la energía más electrones serán producidos. Un alto voltaje (1500V) a través de la capa inerte y atrás significa que el electrón es atraído hacia la parte trasera. Cuando los electrones llegan a la parte trasera, el potencial cae y da un pulso negativo. La profundidad del pulso es proporcional al número de electrones y por tanto proporcional a la energía de la radiación entrante. Después de la amplificación, el analizador multicanal (AMC) cuenta los pulsos.

Considerando un detector de estado sólido con las características descritas, donde los fotones de rayos X penetran el cuerpo del detector y generan pares electrón-hueco. La eficiencia de este proceso depende de la energía de los fotones incidentes y del material semiconductor utilizado. Suponga que un fotón de rayos X con una energía específica E_{photon} incide en el detector y genera pares electrón-hueco. La energía necesaria para generar un par electrón-hueco en silicio es aproximadamente 3.6 eV.

Calcule el número de pares electrón-hueco generados por un fotón de rayos X con una energía de 14.4 keV que incide en el detector. Considerando un voltaje aplicado de 1500 V y asumiendo que cada par electrón-hueco contribuye a la señal detectada, estime la magnitud del pulso (en términos de carga eléctrica) generado por la absorción de un único fotón de 14.4 keV.

Discuta cómo la profundidad del pulso (y por lo tanto la señal detectada) varía con la energía de los fotones incidentes y qué implicaciones tiene esto para la resolución y la capacidad de detección del espectro de energías en la espectroscopía XRF.

9. Se les proporcionará un conjunto de datos espectrales obtenidos mediante la técnica de espectroscopía de fluorescencia de rayos X (XRF) de varias muestras. Estos datos incluyen la intensidad de los picos y la energía correspondiente a cada pico observado. La tarea es analizar los espectros, identificar los elementos presentes y determinar las transiciones electrónicas asociadas a los picos observados sin conocer previamente la composición de las muestras.

- (a) Basándose en los espectros proporcionados, identifique los elementos presentes en las muestras. Utilice las energías de los picos observados y compárelas con las energías de transición conocidas para los elementos. ¿Cómo determinaron qué elementos corresponden a los picos observados?
 - (b) Para cada elemento identificado, determine las transiciones electrónicas (por ejemplo, $K\alpha$, $K\beta$, $L\alpha$, etc.) que corresponden a los picos observados. Explique cómo las energías de los picos se relacionan con las transiciones específicas de cada elemento.
 - (c) Con base en la intensidad y la energía de los picos, realice una estimación cualitativa de la composición de la muestra. ¿Qué elementos parecen estar presentes en mayor cantidad? ¿Hay evidencia de elementos traza?
 - (d) Agende una cita para medir la muestra que le sea asignada con la operaria del equipo, Rosa Julieth Cifuentes Guzmán r.cifuentesguzman@uniandes.edu.co.
10. La figura proporcionada muestra un espectro de fluorescencia de rayos X que incluye cuatro picos prominentes.

Basándose en las energías de los picos observados:

- (a) Utilice las energías de los picos proporcionados para identificar el elemento desconocido. Explique cómo las energías de los picos corresponden a las transiciones características de este elemento.
- (b) Discuta si las relaciones de intensidades observadas entre los picos $K\alpha_1/K\beta_1$ y $L\alpha_1/L\beta_1$ son consistentes con lo que se esperaría para el elemento identificado. Considerando que la relación de intensidad típica entre $K\alpha_1$ y $K\beta_1$ es aproximadamente de 3:1 a 5:1 y que los picos de la serie L son generalmente menos intensos que los de la serie K, ¿los datos presentados en la figura reflejan estas relaciones? Justifique su respuesta basándose en el conocimiento de las probabilidades de transición y los rendimientos de fluorescencia para las series K y L.

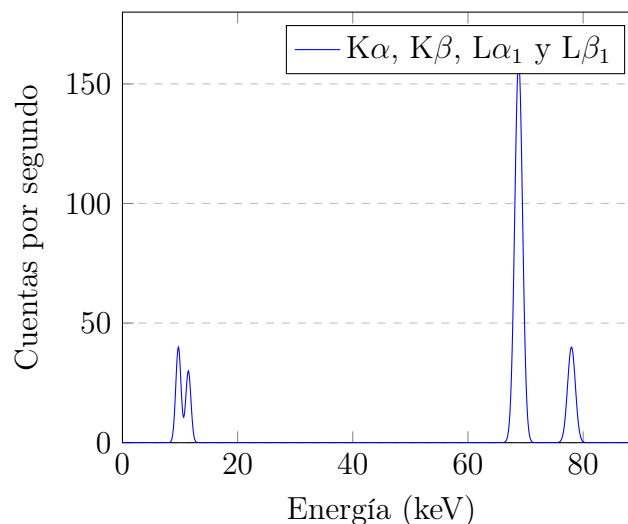


Figura 2: Simulación simplificada de los picos $K\alpha$, $K\beta$, $L\alpha_1$ y $L\beta_1$ de un elemento desconocido.