

Facultad de Ciencias Exactas | UNLP



EXPERIMENTOS CUÁNTICOS II

Profesora: Dra. Laura Damonte

JTP: Dr. Fernando Monticelli

Ayudante Diplomado: Lic. Joaquín Hoya

Año 2020

EXPERIMENTOS CUÁNTICOS II



EXPERIMENTOS CUÁNTICOS II

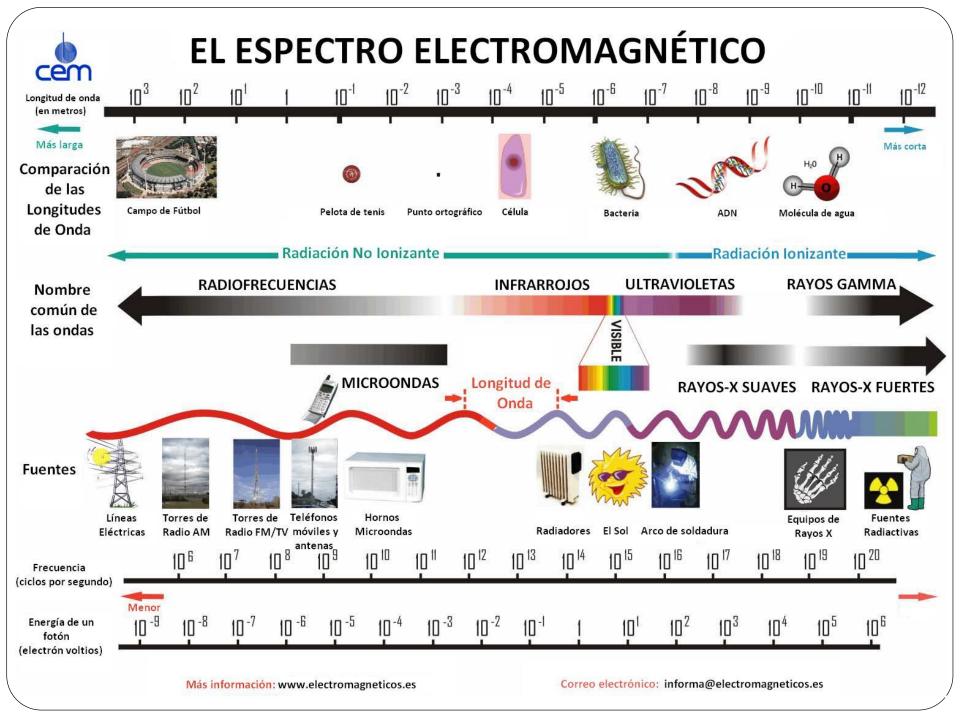
¿Qué entendemos por espectroscopía?

El análisis de la energía de la radiación luego de su *interacción con la materia*.



La *radiación* puede ser electromagnética, mecánica, o partículas.

En el caso de *radiación electromagnética* las energías se extienden desde la radio frecuencia a los rayos γ .



Espectroscopías de Estado Sólido

- □ El conocimiento de la materia se ha obtenido de la física atómica, nuclear y de partículas.
- Métodos, conceptos y modelos de naturaleza empírica.
- El descubrimiento de la radioactividad natural ha sido una verdadera revolución del pensamiento científico, que alteró a fondo la comprensión del universo y la evolución de los conocimientos.

Interacción de la radiación con la materia

- ☐ Involucra el estudio de la penetración de la *partícula* en la *materia* (400 años atrás)
- ☐ Problema de describir la partícula (*radiación*) y el blanco (*sólido*):
 - ☐ La fuente adecuada de radiación
 - ☐ El haz de partículas incidente
 - ☐ La muestra que interactúa con la radiación incidente
 - ☐ La radiación emergente
 - ☐ La instrumentación para el análisis de la radiación
 - ☐ Un sistema de detección apropiado para la radiación
- ☐ Transcurre casi un siglo desde el descubrimiento de las partículas radiactivas (1895) al desarrollo de la *física computacional* (1970) y posteriores avances en descripciones basadas en la *mecánica cuántica y estadística*.

Conceptos involucrados

- Las leyes de conservación de la energía y el momento.
- ☐ El mismo principio, la *Regla de oro de Fermi*.
- □ La sección eficaz de interacción

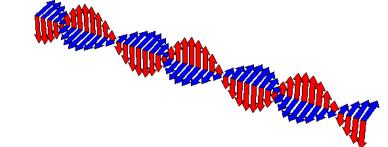
Radiación electromagnética

 Puede caracterizarse por la descripción clásica de una onda plana

$$E = E_0 e^{i(kx - \omega t)}$$

 La relación entre el vector de onda k, la longitud de onda l, el número de onda n y la energía ε de la radiación está dada por:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi v = \frac{n\omega}{c_0} = \frac{n\varepsilon}{\hbar c_0}$$



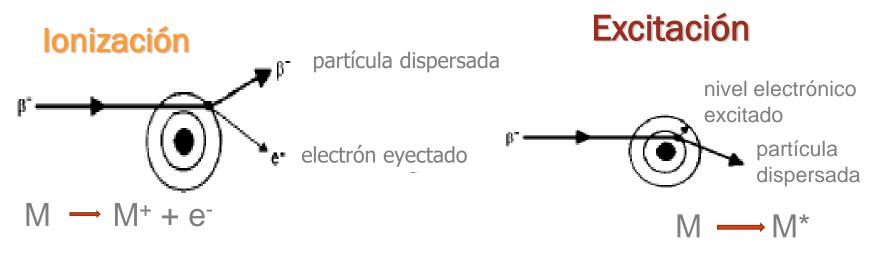
- El vector de onda para la luz visible:
- ~10⁵cm⁻¹ pequeño frente a q≈10⁸cm⁻¹

El espectro electromagnético

	Wavelength	Wave number	Frequency	Energy	Spectroscopic techniques
		(cm^{-1})	(s^{-1})	(eV)	-
Electric					
waves	∞ -0.03 cm		0-E12		ESR, EPR, NMR
Far infrared	$3000\text{-}40\mu\mathrm{m}$	3-400		(0.4-50)E-3	FTIR, abs., refl.
Infrared	$40\text{-}0.8\mu\mathrm{m}$	250 - 12500	(7-400)E12	7	IR, FTIR
Visible light	$0.8 \text{-} 0.4 \mu \text{m}$	(12-25)E3		1.6-3	abs., refl., ellipsom.
Ultraviolet	$400\text{-}10\mathrm{nm}$			3-120	abs., UPS
x-ray	$10\text{-}0.01\mathrm{nm}$			50-120E3	XPS, XAFS
γ radiation	$10-0.1~\mathrm{pm}$			(2-1200)E4	MB, PAC

Mecanismos Específicos de Interacción de las Radiaciones

Básicamente, ionización y excitación; ambos efectos se utilizan para la detección.



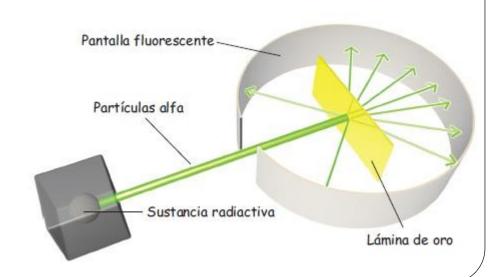
- 1-Radiaciones de partículas cargadas (α , β -, β +, p): **Excitan e ionizan** los átomos de la materia en forma **primaria**, entregando su energía en procesos de múltiples etapas.
- 2-Fotones X y γ : Excitan e ionizan los átomos de la materia en forma secundaria.

Mecanismos Básicos

- Partículas cargadas (α , β^- , β^+ ,p): interactúan con la materia entregando su energía en procesos de múltiples etapas, excitando e ionizando los átomos que encuentran en su camino.
- Fotones: interactúan con los electrones del medio mediante dos procesos fundamentales, en un caso son absorbidos por los átomos desapareciendo del haz (efecto foto-eléctrico) y en otros casos son desviados por los electrones (dispersión Compton).

Interacción de partículas cargadas con la materia

- > La comprensión de la estructura de átomos y núcleos atómicos se ha basado en experimentos de scattering.
- > Se basan en la interacción de un haz de partículas elementales con el átomo o núcleo de un elemento conocido.
- Experimento clásico: dispersión de Rutherford de partículas alpha por un folio delgado confirmó la estructura del átomo.



Interacción de partículas cargadas con la materia

- □ Proceso inverso: medir la interacción de radiación con blancos de elementos desconocidos a fin de determinar su composición análisis de materiales.
- ☐ Elementos intervinientes: fuente de la radiación, el haz de partículas, la sección transversal de interacción, la radiación emergente y el sistema de detección.
- ☐ Elementos de interés: energía e intensidad de la radiación emitida.
 - □ Energía identificación composición

Interacción de la radiación con la materia

- □ La sección eficaz es una medida cuantitativa de la interacción entre una partícula incidente y un átomo.
- La sección eficaz por átomo, σ , se define a través de la probabilidad de que un determinado proceso ocurra:

$$P = \frac{N \text{\'umero de interacciones}}{N \text{\'umero de part\'iculas incidentes}}$$

puede ser calculada si el proceso de interacción es conocido.

Consideremos un flujo F de partículas incidentes, dN_s es el no.partículas dispersadas en el ángulo sólido por unidad de tiempo

$$\frac{d\sigma(E,\Omega)}{d\Omega} = \frac{1}{F} \frac{dN_s}{d\Omega}$$

$$\sigma(E) = \int \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} d\Omega$$

Blanco

Sección eficaz total

 $[\sigma] = barn=10^{-24} cm^2$

Ley de Lambert-Beer

Radiación no ionizante UV-vis

Cuando un haz de radiación atraviesa una especie absorbente de espesor "l" y de concentración "c" se producen interacciones de los átomos y moléculas absorbentes con los fotones, con lo cual la intensidad del haz disminuye.

$$I = f(I_0, l, c)$$

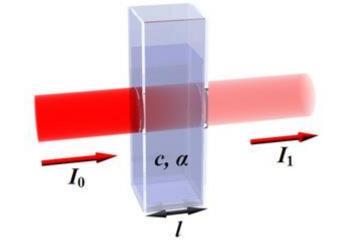
transmitancia

absorbancia

$$T = \frac{I}{I_0}$$

$$A = -\log T = \log \frac{I_0}{I}$$

$$A(\lambda) = \varepsilon(\lambda) \left[\frac{L}{mol \times cm} \right] \times b \left[cm \right] \times C \left[\frac{mol}{L} \right]$$



ε representa el coeficiente de absorción de la sustancia analizada (l/mol cm), (o a=l/gcm)

C representa la concentración de la muestra (mol/l o g/l).

L representa el espesor de la cubeta (cm).

Radiación ionizante

- Procesos de ionización nuclear, atómica, estado sólido.
- ☐ Detección de *partículas* involucra efectos de ionización.
- ☐ Distinción radiación electromagnética

(rayos X, gamma) y partículas cargadas (iones livianos, pesados, protones, electrones, etc).

☐ La atenuación de la *radiación electromagnética* al pasar por la materia obedece la ley de Lambert-Beer:

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



disminución en intensidad

- ☐ Las *partículas cargadas* son *frenadas* poder de frenado (dE/dx).
- ☐ Cambio en el flujo de partículas involucra tanto cambio en energía como en número de partículas.

- · Radiación electromagnética ionizante
- ☐ Los fotones se clasifican de acuerdo a su origen:
 - Rayos γ (0.1MeV-5MeV) transiciones nucleares.
 - ☐ Bremsstrahlung o rayos X continuos: aceleración de elibres u otra partícula cargada.
 - □ Rayos X característicos (1keV-0.5MeV)
 transiciones atómicas.
 - □ Radiación de aniquilación: combinación de un e⁺ y e⁻.
- ☐ La energía de estas radiaciones se expresa en la forma:

E=ħv

☐ Las interacciones de fotones con la materia no dependen de su origen sino de su energía.

Atenuación de un haz de fotones (REM)

Tipos de interacción

- Electrones atómicos
- Nucleones
- □ Campo eléctrico entorno del núcleo o electrones
- Campo entorno de los nucleones

Efectos de la interacción

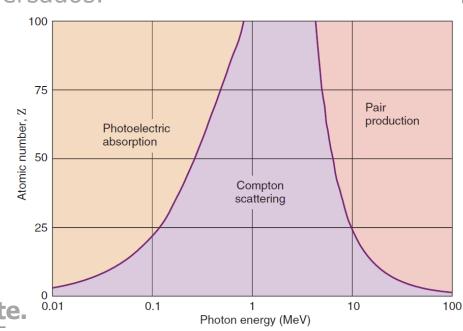
- Absorción completa
- Dispersión elástica
- Dispersión inelástica

Existen 12 posibles procesos en los cuales los rayos gamma pueden ser absorbidos o dispersados.

En el rango de energías de 0.01 a 10 MeV, sólo tres procesos son los más importantes:

- Dispersión Compton
- ☐ Efecto fotoeléctrico
- Producción de pares

□ Cada proceso domina en una dada región de energías del fotón incidente.



Ley de Lambert-Beer

• Radiación ionizante rayos X y γ

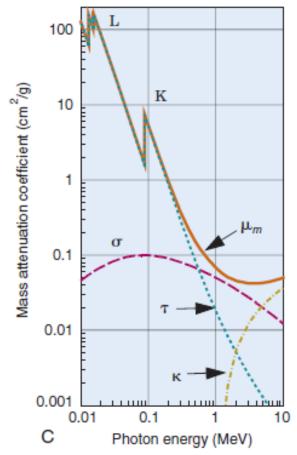
I=
$$I_0 \exp(-\sigma x) \exp(-\tau x) \exp(-\kappa x)$$

$$I = I_0 \exp(-\mu_0 x)$$

$$\mu_0 = \sigma_a + \sigma_s + \tau + \kappa$$

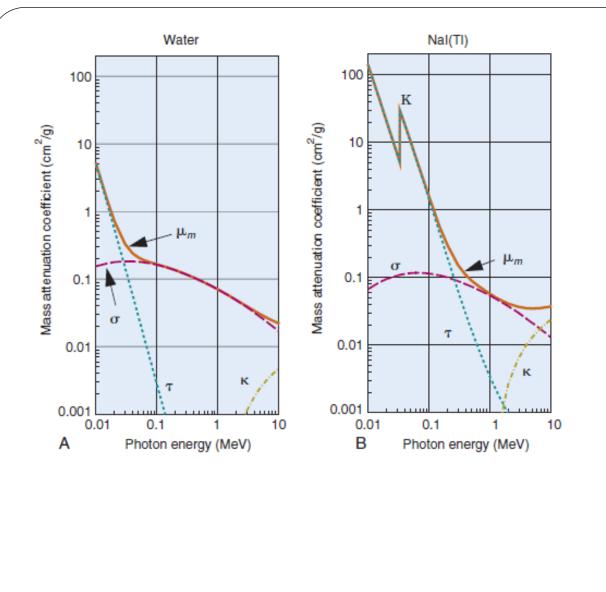
el coeficiente de atenuación lineal total, es una medida del número de fotones primarios que har sufrido interacción.

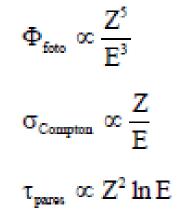
 $\mu,$ el coeficiente de absorción es algo menor, mide la energía absorbida por el medio.

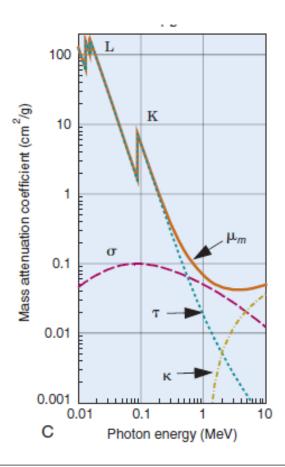


En cualquier tipo de interacción, el coeficiente de atenuación másico es el coeficiente de atenuación lineal dividido por la densidad

$$\tau$$
 (cm⁻¹) = τ_e (cm²/átomo) N (átomos/cm³)
N (átomos/cm³) = N (átomos/mol) ρ (g/cm³)
A (g/mol)
 $\tau/\rho = \tau_e$ N/A (cm²/g)







Aspectos formales

Desde el punto de vista de la mecánica cuántica, para estudiar un *sistema* que presenta una *perturbación externa* (como puede ser la perturbación producida por la radiación electromagnética sobre los átomos o moléculas, y que puede dar lugar a la absorción o a la emisión de un fotón) hay que resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

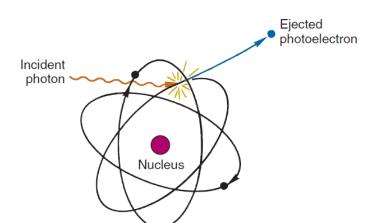
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

Utilizaremos para ello un tratamiento aproximado, válido en el caso de que se cumplan los siguientes supuestos:

- □ Acción o perturbación externa débil, que nos permitirá utilizar la teoría de perturbaciones.
- ☐ Tratamiento semiclásico: el sistema se trata de forma cuántica, mientras que los campos externos (radiación electromagnética) de forma clásica.

Efecto fotoeléctrico

➤ Por debajo de 0.1 MeV el modo predominante de interacción en absorbentes de Z alto es el efecto fotoeléctrico.



- ➤ Un fotón incidente no puede ser absorbido totalmente por un e- libre, pero sí si está ligado a un átomo.
- ➤ El 80% de las absorciones ocurren en la capa K.
- > Conservación de la energía y de la cantidad de movimiento:

$$E_r = T_e + T_a + E_B \qquad \overrightarrow{p}_r = \overrightarrow{p}_e + \overrightarrow{p}_a$$

➤ La energía de retroceso del átomo $T_a \approx m_0/M_0 T_e$, es despreciable, luego la energía del electrón eyectado:

$$T_e = h \nu - E_B$$

Sección transversal para la absorción por efecto fotoeléctrico

Absorción de un cuanto y eyección de un electrón con energía: $\hbar \omega - E^{V}_{B}(k)$

- > Conocer las funciones de onda de los electrones dentro del átomo.
- > Resolver la ecuación de Schrödinger.
- > Potencial V(r) adecuado para el sólido.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

- > Teoría de perturbaciones.
- ightharpoonup Si V=0 ightharpoonup funciones de onda de partícula libre, ondas planas: $\Psi(\mathbf{x},t)$ =A exp i(kx- ωt).
- Para $V(r)=Ze^2/r$ funciones de onda hidrogenoide: $u(r,\theta,\phi)=R(r)Y(\theta,\phi)$

Probabilidad de transición por unidad de tiempo para una transición del estado m al estado k (Regla de oro de Fermi):

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E) \left| \left\langle \psi_k \left| H \right| \psi_m \right\rangle \right|^2$$

Pozo de potencial cuadrado.

Función de onda inicial: partícula ligada a un pozo cuadrado.

Función de onda final: onda plana.

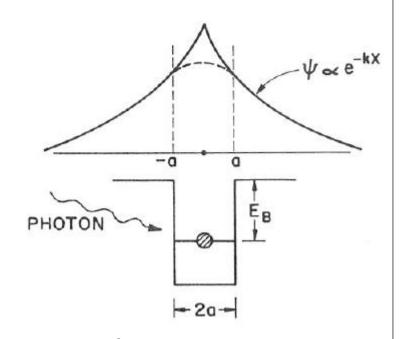
Condiciones de contorno.

Si
$$\hbar\omega$$
 » $E_B \longrightarrow E \sim \hbar\omega$

Si
$$\hbar \omega$$
 » $E_B \longrightarrow E \sim \hbar \omega$
$$W = \frac{4e^2 \xi^2 \hbar}{m} \frac{E_B^{3/2}}{E^{7/2}}$$

> La probabilidad para un evento por fotón incidente será:

$$\sigma = \frac{W}{F} = \frac{8e^2\hbar}{mc} \frac{E_B^{3/2}}{E^{5/2}}$$



 $[\sigma]=(\text{probabilidad de transición/tiempo})/(n^{\circ}. \text{ de fotones/área/tiempo})$

Efecto fotoeléctrico

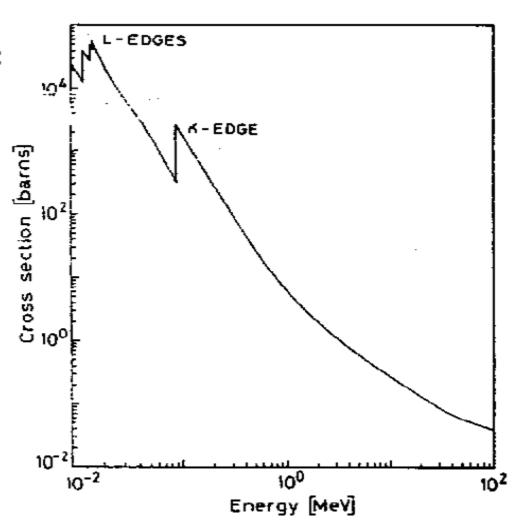
- > El efecto fotoeléctrico es siempre acompañado por efectos secundarios, electrones Auger.
- > Para electrones de la capa K:

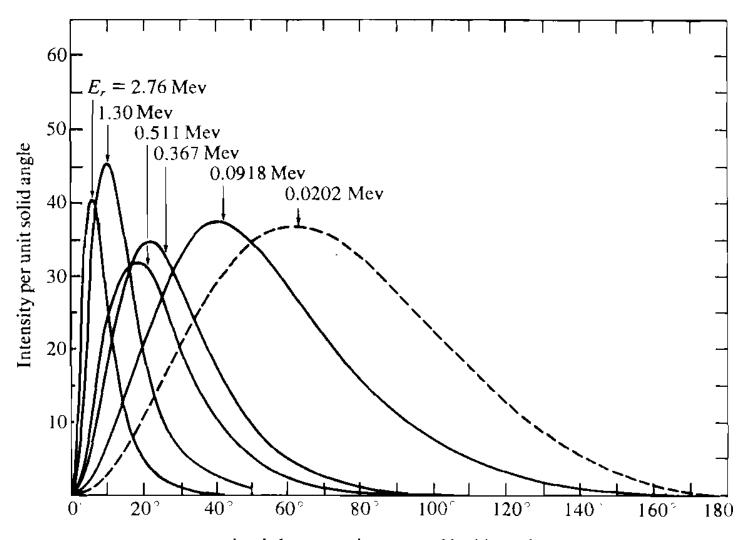
$$E_8 \approx 13.6 (Z-1)^2 \text{ ev.}$$

➤ Los aspectos cuantitativos son empíricos, siendo las teorías útiles para interpolación y extrapolación.

$$\tau \sim \text{cte. } Z^4/(hv)^3$$

Materiales con Z alto poseen mayor probabilidad de absorción por efecto fotoelectrico





Angle between electron and incident photon

FIGURE 3-22 Angular distribution (intensity per unit solid angle) of photoelectrons as a function of the angle between the electrons and the incident gamma rays. The energy of the incident gamma radiation is given for each curve. [By permission from C. M. Davisson and R. D. Evans, Rev. Mod. Phys., 24: 79 (1952).]



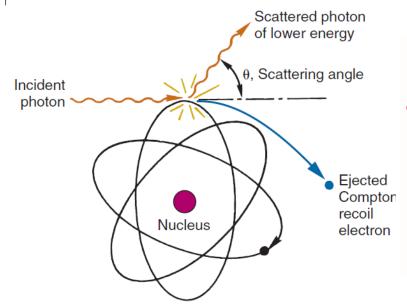
Dispersión Compton

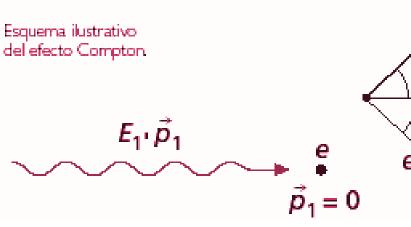
Arthur Holly Compton (1922)

- \gt La dispersión de fotones de muy baja energía (hv « m $_0$ c²) por electrones libres es bien descripta por teoría clásica norelativista (J.J.Thomson, dispersión Thomson).
- > Conservación de la energía y de la cantidad de movimiento:

$$E_r = E_r' + T_e$$

$$p_{r} = p_{r}^{'} \cos \theta + p_{e} \cos \varphi$$
$$0 = p_{r}^{'} sen \theta - p_{e} sen \varphi$$





Dispersión Compton

▶ La energía cinética del e⁻:

La energía cinética del e:
$$T_{\epsilon} = E_{\gamma} - E_{\gamma'} = E_{\gamma} - \frac{E_{\gamma}}{1 + \frac{E_{\gamma}}{mc^2}(1 - \cos\theta)}$$

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0c} (1 - \cos\theta)$$

> Es la longitud de onda Compton del electrón:

$$\frac{h}{m_0 c} = 2,426 \text{ F}$$

> Su valor máximo, para $\theta = \pi$:

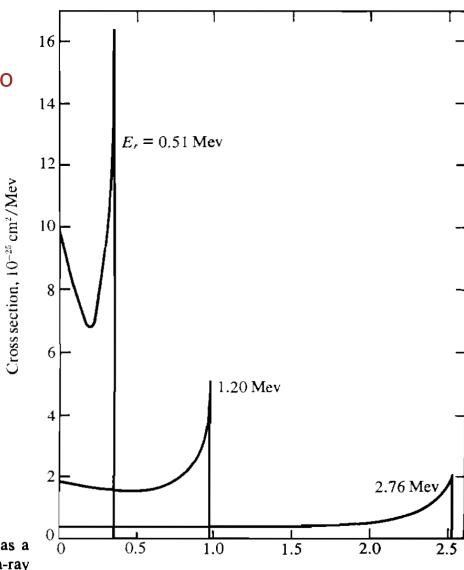
$$T_e(\max) \approx E_r - E_r'(\theta = 180^\circ)$$

$$E_{\gamma,\min} = \frac{E_{\gamma}}{1 + \frac{2E_{\gamma}}{mc^2}} \rightarrow T_{\epsilon,\max} = \frac{\frac{2E_{\gamma}}{mc^2}}{1 + \frac{2E_{\gamma}}{mc^2}} E_{\gamma}$$

$$\approx E_r - 0.255 \text{ Mev}$$

> Si hv $\sim m_0 c^2 = 0.511$ MeV, se deben incluir correcciones relativistas.

Distribución de energías del electrón Compton retrodispersado

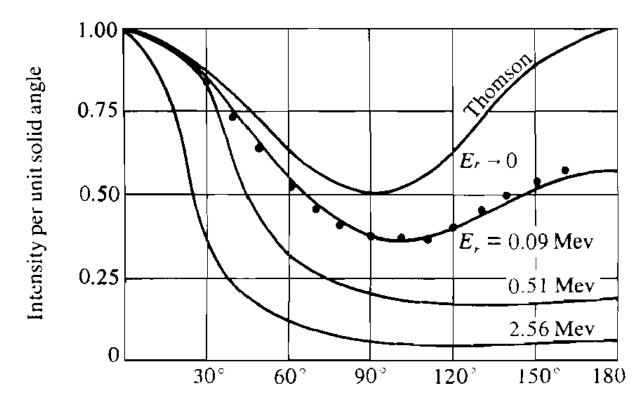


Electron energy Te, Mev

FIGURE 3-19 Energy distribution of Compton electrons as a function of electron energy for various incident gamma-ray energies E_r . [By permission from C. M. Davisson and R. D. Evans, Rev. Mod. Phys., 24: 79 (1952).]

> Si $E_r = h_V \gg m_0 c^2 = 0.511$ MeV, se deben incluir correcciones relativistas

i



 $E_r' \approx \frac{m_0 c^2}{1 - \cos \theta}$

Photon angle θ

FIGURE 3-18 Angular distribution (intensity per unit solid angle) of Compton-scattered gamma rays as a function of the scattering angle for various incident gamma-ray energies E_r . All curves have been normalized at 0° . (By permission from Heitler, 1954.)

Para energías de fotones mayores otros efectos tienen influencia:

- A las fuerzas electrostáticas deben agregarse fuerzas magnéticas
- ➤ Interacción momento dipolar magnético del e con el vector magnético de las ondas incidentes y dispersadas.
- ➤ Dado que el e¹ es un elemento de corriente, experimenta una fuerza de Lorentz perpendicular al campo magnético incidente.

Para energías moderadas, correcciones debidas a Compton, Breit y otros.

Klein y Nishina (1928) aplicaron la teoría relativista de Dirac obteniendo una solución general con buen acuerdo con experimentos.

El momento lineal p de un e- libre no está completamente determinado: cada valor de p tiene dos estados de energía

$$T + m_0 c^2 = \pm \sqrt{(pc)^2 + (m_0 c^2)^2}$$

Sección transversal de colisión promedio, fórmula de Klein-Nishina:

$$\sigma_e = 2\pi r_0^2 \left\{ \frac{1+\alpha}{\alpha^2} \left[\frac{2(1+\alpha)}{1+2\alpha} - \frac{1}{\alpha} \ln(1+2\alpha) \right] + \frac{1}{2\alpha} \ln(1+2\alpha) - \frac{1+3\alpha}{(1+2\alpha)^2} \right\} \text{ cm}^2/\text{electr\'on}$$

$$\alpha = h \, v_0 \, / \, m_0 c^2$$

Coeficiente de atenuación lineal Compton:

Sea un absorbente delgado con N átomos/cm 3 , Z electrones/átomo y espesor dx, el número de fotones primarios que son removidos

del haz incidente con n fotones de energía hv_0 está dado por:

$$-dn/n = (NZdx)\sigma_e$$

 $\sigma_{\rm e}$ es función de la energía incidente y disminuye monotonamente a medida que aumenta hv_0 .

Para calcular la fracción de fotones transmitidos, se define el coeficiente de atenuación lineal total como:

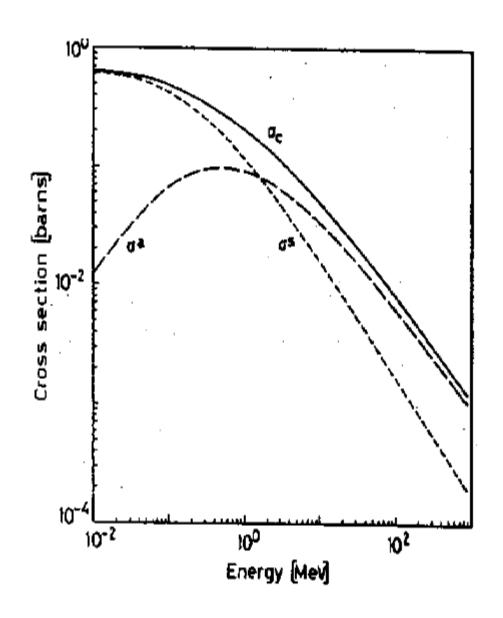
$$\sigma = NZ \sigma_e cm^{-1}$$

σ_e: probabilidad de cualquier tipo de colisión

 σ_s : fracción promedio de la energía total en el fotón dispersado.

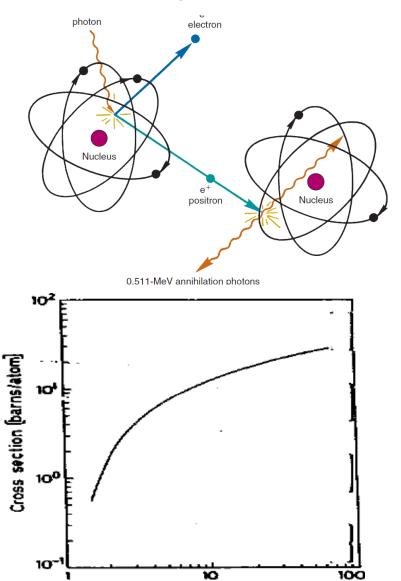
 σ_a : la energía promedio transferida al electrón de retroceso.

$$T_{\max} = h \nu \left(\frac{2 \gamma}{1 + 2 \gamma} \right)$$



Producción de pares

➤ Para energías superiores a 1.02 MeV (2m₀c²) comienza a ser importante.

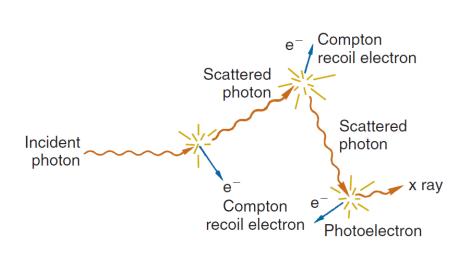


Energy [MeV]

$$h \nu - 1.022 = E_{+} + E_{-}$$

 $\kappa \sim Z^{2}/137 \text{ (e}^{2}/\text{m}_{0}\text{c}^{2}\text{)}^{2}$
 $\kappa = \kappa_{a} \text{ N cm}^{-1}$

 \triangleright Para un elemento desconocido, vale: $\kappa = \kappa_{Pb} \rho/11.35$ 207.2/A (Z/82)²



¿Qué es la radiactividad?

Se denomina *radiactividad* al proceso de transformación *espontánea* de núcleos atómicos mediante la emisión de radiaciones.

Bajo ciertas circunstancias *los núcleos* pueden ser *inestables* y transformarse en otros mediante la *emisión de* partículas y radiaciones.

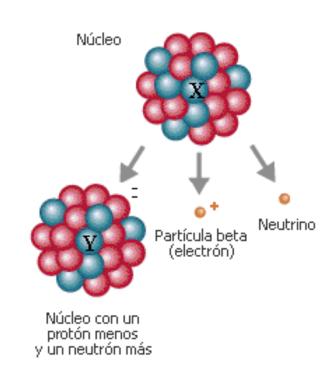
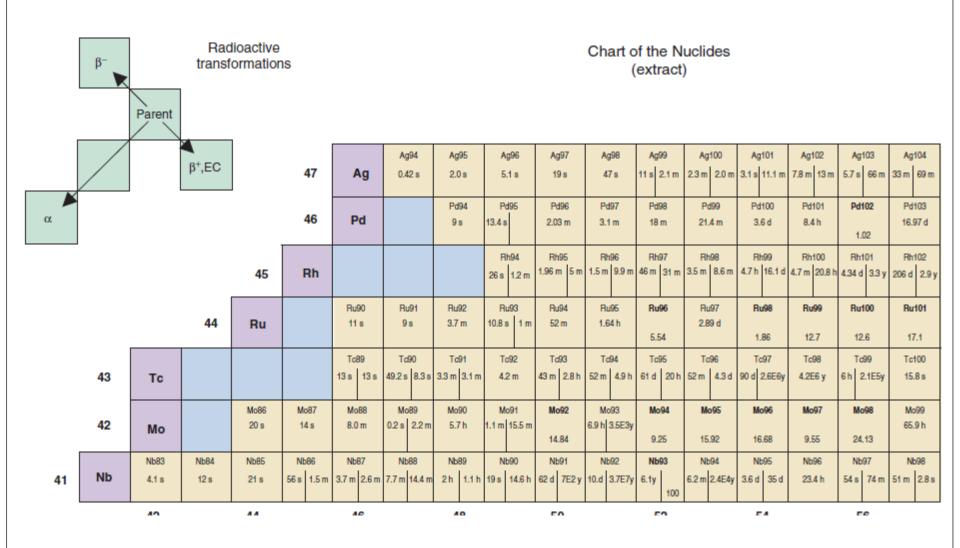


Tabla de nucleídos



¿Cómo se mide la radiación?

La *Actividad* de una fuente radiactiva es el número medio de *procesos de decaimiento* que sufre por unidad de tiempo.

- ✓ Cantidad extrínseca
- ✓ Depende del esquema de desintegración nuclear específico (actividad ≠ cantidad de radiación emitida).
- ✓ Unidades:

1 Becquerel (Bq)= 1 desintegración/s

Antes,

1Curie (Ci)= 3.7×10^{10} desintegraciones/s



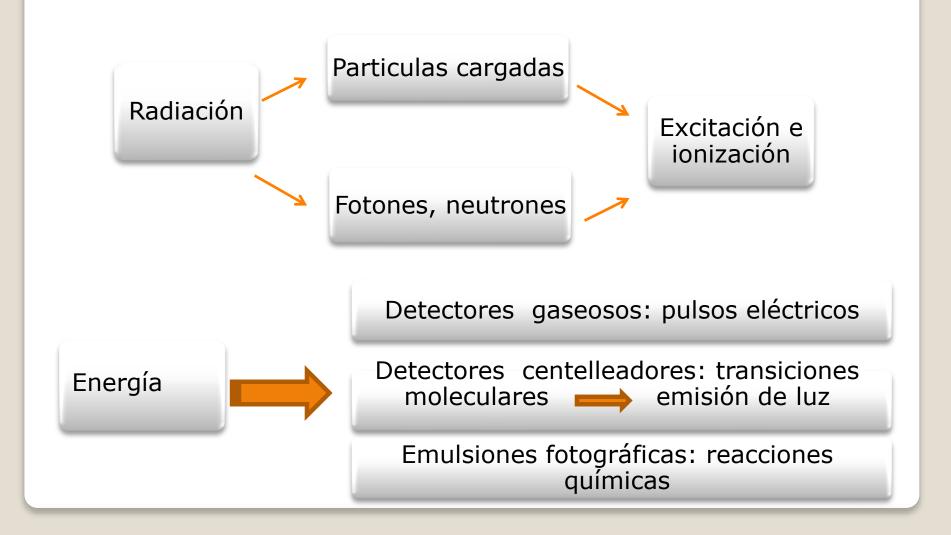
actividad de 1 g de ²²⁶Ra

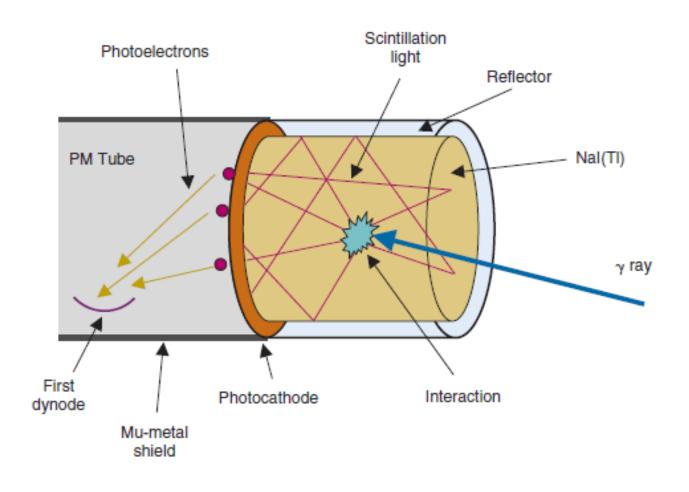
Detección de la Radiación

■ Necesidad de medir la radiación en espectroscopía. ☐ Amplio campo de aplicaciones satisfacer gran número de especificaciones diferentes: ☐ Alta sensibilidad, ancho de banda, velocidad, estabilidad, etc ☐ Principales características y propiedades básicas: eficiencia cuántica respuesta ☐ límite de detección ■ velocidad de detección

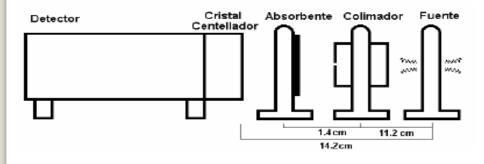
Características Generales de los Detectores

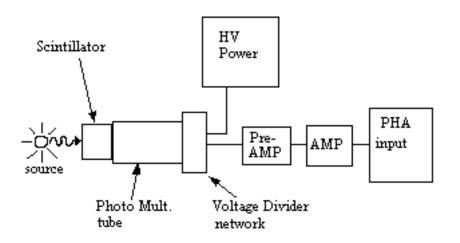
Fundamentos de la detección: transferencia de parte o toda la energía de la radiación a la masa del detector donde es convertida a una forma perceptible.





Esquema de dispositivo experimental





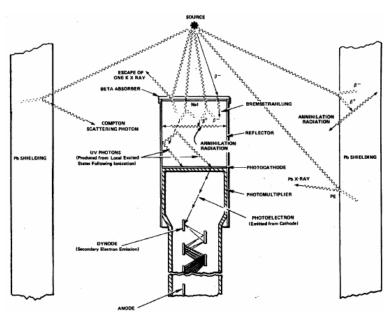
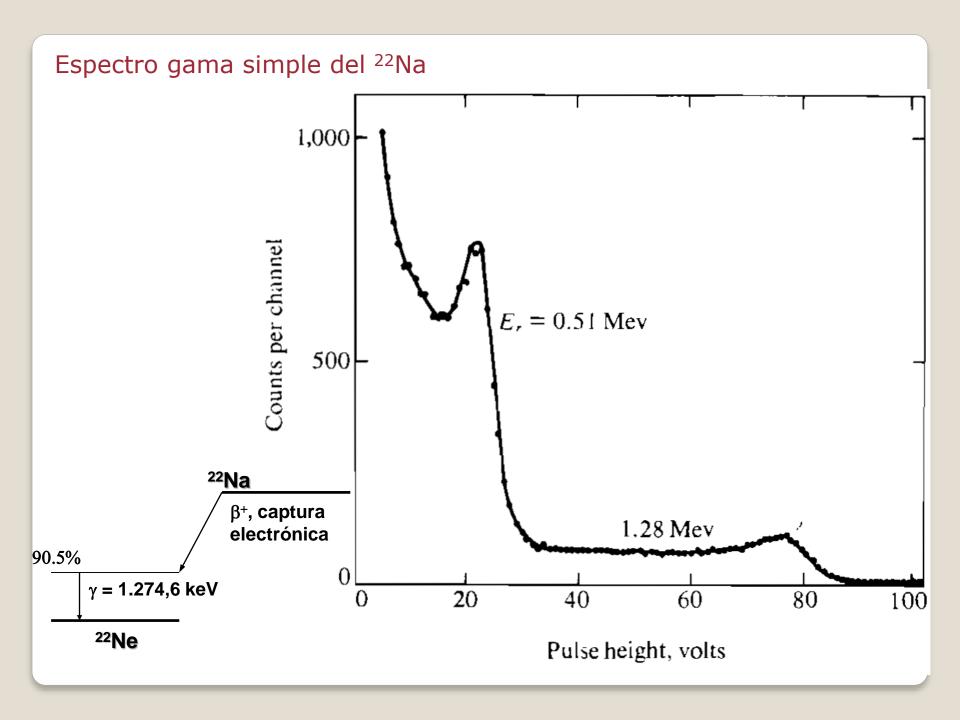
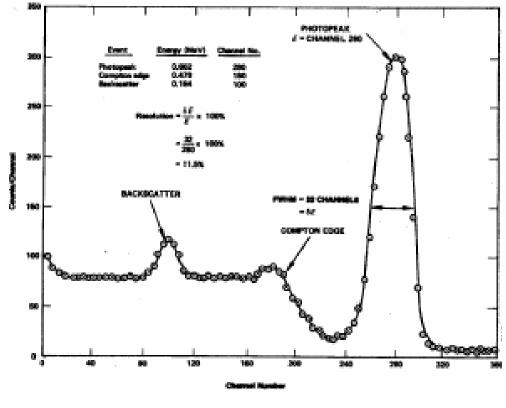


Figura 1.1- Fuente radiactiva, detector NaI(Té), PMT, y blindaje de plomo, mostrando varios tipos de interacción (Douggan 1988)

Corte esquemático del módulo detector: cristal semiconductor (INa(Tl)), fotomultiplicador (PM), placas de apantallamiento (Pb), fuente radiactiva e interacciones diversas.



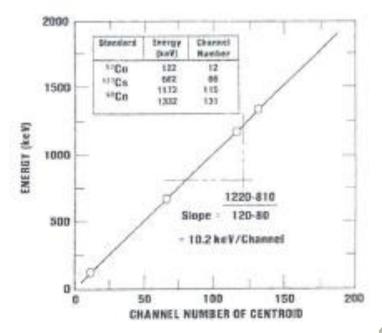
Espectro gamma simple del 137Cs.



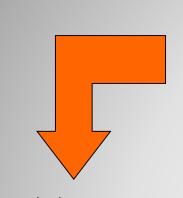
30.07(3) yr. 137 Cs P Q = 1175.63 1102 661.657(3) 85.1(5) 137 Ba 137 Ba

Figura 9.1.- Esquema de desintegración del ¹³⁷Cs

Recta de calibración en energías



Determinación del coeficiente de atenuación lineal



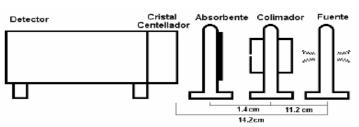
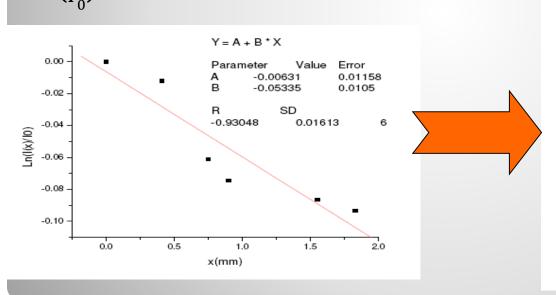
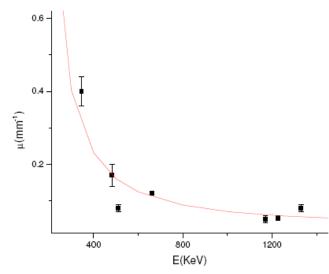


Figura 2.- Esquema del dispositivo utilizado

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





 μ_0 vs x

 μ_0 vs E_i

Bibliografía

- Caracterización y estudio de materiales por técnicas nucleares, A.Somoza y A.López García, UNICEN. 1998
- > Chr. Lehmann, Interaction of radiation with solids and elementary defect production.
- W.R.Leo_Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments, Springer-Verlag, 1987.
- > C. Cohen-Tannoudji, Mecanique Quantique Tomo I y II,
- ➤ Robley D. Evans, *The Atomic Nucleus*; (1955).
- > C.Kittel, Introducción a la Física del Estado Sólido, Ed.Reverté (1995).
- > Elements of Nuclear Physics, Meyerhof, 1967
- > Introduction to Nuclear Physics, W.N.Cottingham and D.A.Greenwood, 1985.
- > Physics in Nuclear Medicine, S.R.Cherry, J.A. Sorenson, M.E.Phelps
- > G.Longworth, *The use of Mossbauer Spectrosocpy in Materials Science*, Treat.Mat.Sc.Tech. 194 (1980) 107.
- L.C. Feldman and J.W.Mayer. *Fundamentals of surface and thin film analysis*, North Holland, 1986.
- K. Teo, EXAFS: Basic principles and data analysis, Springer-Verlag, 1985.
- > H.Kuzmany, Solid State Spectroscopy, An Introduction, Springer-Verlag, Berlín, 2009.