

Informe: Rayos X

Sergio Laverde* and Samuel Hernandez**

Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia.

(Dated: 13 de febrero de 2025)

En este informe se reportan y analizan los resultados del experimento de Rayos X desarrollado por medio del montaje facilitado por PHYWE [4]. Por medio de ajustes Lorentzianos y de Voigt, se estudia el espectro característico del cobre y se determinan las longitudes de onda para las líneas espectrales K_β y K_α . Los valores teóricos para estas longitudes de onda son $(1,3911340 \pm 6 \times 10^{-6}) \text{ \AA}$ y $(1,54059290 \pm 5 \times 10^{-8}) \text{ \AA}$ respectivamente. Se obtuvieron $(1,548031 \pm 1 \times 10^{-6}) \text{ \AA}$ y $(1,399849 \pm 5 \times 10^{-6}) \text{ \AA}$. Así mismo, se determinó experimentalmente el coeficiente de atenuación de masa para el Aluminio y Zinc. Además, se estudia la relación entre la intensidad de cada pico, la corriente y el voltaje el ánodo. Corroboramos el carácter lineal o radical de esta relación.

I. MARCO TEÓRICO

En 1895, Wilhem Röntgen durante su estudio de la radiación de rayos catódicos protegió el aparato emisor y de todas formas notó una tenue luz gracias a la presencia de pantallas sensibles a la luz. Investigaciones futuras indicaron que esto era causado por lo que hoy se conoce como Rayos X, onda electromagnética con longitud de onda de 10 nm hasta 0,001 nm [5]. Los Rayos X se convirtieron en una herramienta poderosa para experimentos físicos y en la ciencia médica [3]. Esto le valió para ser galardonado con el premio Nobel en física en 1901.

Posteriormente, Max von Laue descubrió un fenómeno de difracción a la hora de incidir Rayos X en un cristal se genera un fenómeno de difracción en los rayos. Posteriormente, William Henry Bragg y su hijo explicaron teóricamente este fenómeno y con él estudiaron las estructuras cristalinas. Tanto von Laue como los Bragg recibieron el premio Nobel en física en los años 1914 y 1915 respectivamente.

Introducción a los Rayos X: Cuando tenemos una partícula cargada eléctricamente con una gran energía cinética, y esta pierde parte de esta energía al encontrarse con un material metálico, entonces se generan Rayos X. Para este fin, calentamos una placa metálica (el cátodo) para liberar electrones por termo-ionización. Luego, estos son acelerados por una diferencia de potencial U_A entre el cátodo y el ánodo. Los Rayos X son generados a un voltaje específico que depende del material que se esté usando. En este proceso se generan dos clases de Rayos X:

- **Rayos X característicos:** Cuando un electrón acelerado choca con un electrón de nuestro material a estudiar, si tiene la energía suficiente, desprenderá dicho electrón. Entonces, otro electrón rápidamente ocupará el espacio liberado, emitiendo así un fotón. La energía de este fotón va a estar dada por:

$$E_\gamma = E_i - E_f. \quad (1)$$

Siendo E_f la energía del orbital final y E_i la de la inicial. Como estas energías dependen de cada material, la radiación causada por este fenómeno es llamada *Radiación de Rayos X característica* [4].

- **Bremsstrahlung:** Si uno de los electrones acelerados no choca con ningún electrón y pasa de largo, este interactuará con el núcleo y se verá frenado, liberando así un fotón de Rayos X. Como realmente no hay un límite para esta interacción, el espectro que esperamos es continuo.

Estos dos fenómenos se dan simultáneamente. Intuitivamente, hay unos electrones que chocan con los del material y otros que no, por eso se dan al simultáneo. Además, la intensidad es cero hasta cierta longitud de onda mínima. Esta viene dada por la ley de Duane-Hunt:

$$\lambda_{\text{mín}} = \frac{12,40}{U_A} (\text{\AA}). \quad (2)$$

* Correo institucional: s.laverdeg@uniandes.edu.co

** Correo institucional: sm.hernandezc1@uniandes.edu.co

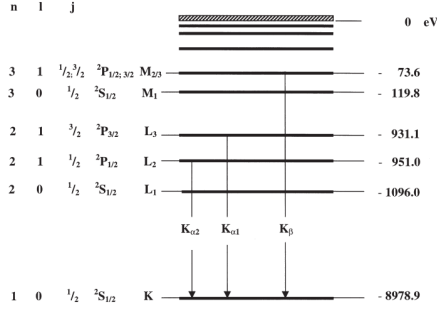


Figura 1. Diagrama de transiciones para un átomo de Cu. Fuente: *PHYWE, Characteristic X-Rays of Copper* [4]

Además, esperamos ver dos líneas estrechas correspondientes al espectro característico, $K_{\alpha} = 8,038$ keV y $K_{\beta} = 8,905$ keV, como podemos ver en la Figura 1 .

Atenuación de Rayos X: Cuando los Rayos X interactúan con el blanco, se generan efectos Compton y fotoeléctrico. Esto genera una disminución en la intensidad. Así, podemos modelar la intensidad como:

$$I = I_0 e^{-\mu(\lambda, Z)d}. \quad (3)$$

Siendo μ el coeficiente de absorción del material y Z el número atómico. Además, μ se relaciona funcionalmente con Z y λ así:

$$\frac{\mu}{\rho} = k(\lambda Z)^3. \quad (4)$$

Donde ρ es la densidad del material y k es una constante que depende de la longitud de onda.

Por último, en el uso de los cristales de LiF y KBr es útil tener en cuenta la condición de Bragg:

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad n \in \mathbb{N}^+. \quad (5)$$

Lo cual nos lleva a una expresión muy práctica para la energía de radiación, dada por:

$$E = \frac{nhc}{2d \sin \theta}. \quad (6)$$

II. MONTAJE EXPERIMENTAL

Además del montaje experimental mostrado en la figura 2, para el desarrollo del experimento también se hace uso de: cristales de LiF y KBr, tubo contador con cable BNC, láminas metálicas de diferentes materiales y grosores, y filtros.

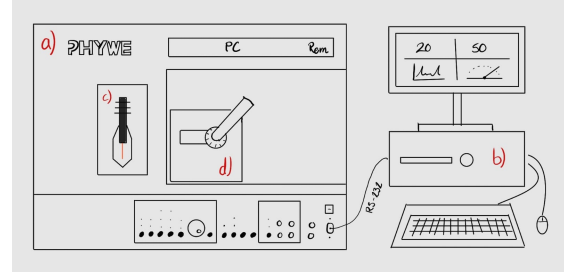


Figura 2. Montaje experimental.

Consiste en: a) Unidad de rayos X 35kV (Phywe), b) Computador, c) Tubo desmontable de rayos X de Cobre, d) Goniómetro rayos X (Phywe).

A. Calibración del equipo de Rayos X.

Se debe ubicar el ángulo al cual la intensidad es máxima. Una vez encontrado, se calcula el desfase respecto al valor teórico de 22.6° y se aplica este desfase a todos los datos y rangos de medición. Porque las mediciones están diseñadas respecto al valor teórico.

B. Actividad 1: Rayos X característicos del Cobre.

El objetivo de esta actividad es medir la intensidad de rayos difractados en función del ángulo de difracción y mediante la ley de Bragg (ec 5.) estudiar el espectro de rayos X.

Para ello, teniendo conectada la unidad de rayos X al computador, en el programa *Mesure* configuramos la toma de datos. Después, de estar la toma de datos realizada, exportamos los datos obtenidos para su posterior análisis. Repita el proceso para el cristal de KBr.

C. Actividad 2: Absorción de Rayos X.

El objetivo de esta actividad es estudiar la absorción de rayos X como función del espesor del material.

Para lograr esto, instalamos el cristal de LiF sobre la base giratoria y configuramos la toma de datos en el programa. A continuación, se realizan mediciones para Al y Zn, primero sin material y luego incrementando progresivamente el espesor de este.

D. Actividad 3: Dependencia de la intensidad del voltaje y corriente del ánodo.

El objetivo de esta actividad es estudiar cómo cambia el espectro de rayos X cambiando el voltaje y manteniendo la corriente constante y viceversa.

En este caso se usan un tubo de Rayos X de Cu y el cristal de LiF. Primeramente, se configura la toma de datos con un rango de medición de 19° - 24° , tiempo de integración de 2s y resolución de 0.1° . Seguido de esto, se realizan dos tomas de datos: la primera con $I = 1mA$ y $V \in [11, 35]kV$ iniciando en 35kV y decreciendo a pasos de 2-3kV y la segunda con $V = 35kV$ y $I \in [0, 1]mA$ iniciando en 1mA y decreciendo a pasos de 0.1mA.

E. Actividad 4: Ley de Duane-Hund.

El objetivo de esta actividad es evidenciar empíricamente la Ley de Duane-Hund y mediante esta obtener experimentalmente el valor de la constante de Planck h .

Nuevamente se usan el tubo de Rayos X de Cu y el cristal de LiF y además se emplea el diafragma de 2mm. se configura la toma de datos con un rango de medición de 10° - 21° , tiempo de integración de 2s, resolución de 0.1° y corriente de 1mA. Después, se realizan tomas de datos variando el voltaje $V \in [13, 35]kV$ iniciando en 35kV y decreciendo a pasos de 2kV. Posteriormente, se encuentra la longitud de onda mínima donde empieza el Bremsstrahlung (λ_{min}) para cada medición y usando la Ley de Duane-Hund se determina h .

III. RESULTADOS Y ANÁLISIS

Para las actividades 1 y 2 que se expondrán a continuación, se encontró el máximo de intensidad a 20.3° y para las actividades 3 y 4 se encontró a 20.5° . Los cuales son la referencia respecto al valor teórico de 22.6° . Entonces, desplazaremos todos los datos por la diferencia entre 22.6° y el valor obtenido experimentalmente. Ejemplo: si en la actividad 1 se realizó una medición a 21° , en el análisis se tomará como 23.3° .

Los datos en el archivo 'Data.xlsx' y el análisis desarrollado en Python se encuentran en Github <https://github.com/samuhdz/Laboratorio-Intermedio/tree/main/Rayos%20X>.

A. Actividad 1: Rayos X característicos del Cobre.

Cuando se realizaron las mediciones del espectro característico se obtuvo la gráfica III A. Para hacerla, se empleó la ley de Bragg para pasar de ángulo a longitud de onda, y se tomó para dos órdenes de difracción diferentes. Para analizar en más detalle este espectro, se hicieron dos tipos de ajuste: ajuste Lorentziano y ajuste a un perfil de Voigt.

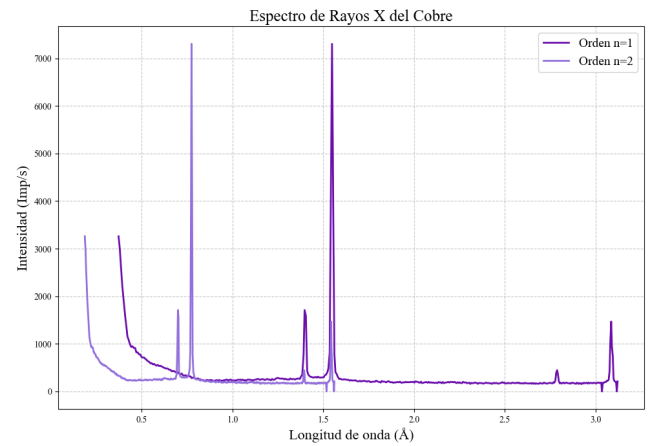


Figura 3. Espectro característico del cobre usando como orden de difracción $n = 1$ y $n = 2$ respectivamente.

En las figuras 4 y 5 podemos ver los ajustes de Voigt y Lorentz para $n = 1$. Para el ajuste Lorentziano, los valores para las longitudes de onda respectivas encontrados son $K_\alpha = (1,548031 \pm 1 \times 10^{-6})$ Å y $K_\beta = (1,399849 \pm 5 \times 10^{-6})$ Å. Por otro lado, para el perfil de Voigt las longitudes asociadas son $K_\alpha = (1,547952 \pm 1 \times 10^{-6})$ Å y $K_\beta = (1,399708 \pm 8 \times 10^{-6})$ Å.

Ahora veamos los ajustes realizados para $n = 2$. Los resultados se ven en las figuras 6 y 7. En ambos casos podemos ver como el ajuste solo modela el segundo pico, una mejor que la otra. Para el ajuste Lorentziano la longitud de onda para K_α nos da $(1,543004 \pm 2 \times 10^{-6})$ Å. Para el perfil de Voigt el valor obtenido para la longitud de onda relacionada con K_α nos da $(1,54341 \pm 1 \times 10^{-5})$ Å. Las razones que se proponen para el mal ajuste son: la cantidad tan limitada de datos que había para el pico de K_β ; una mala elección de semilla para los ajustes.

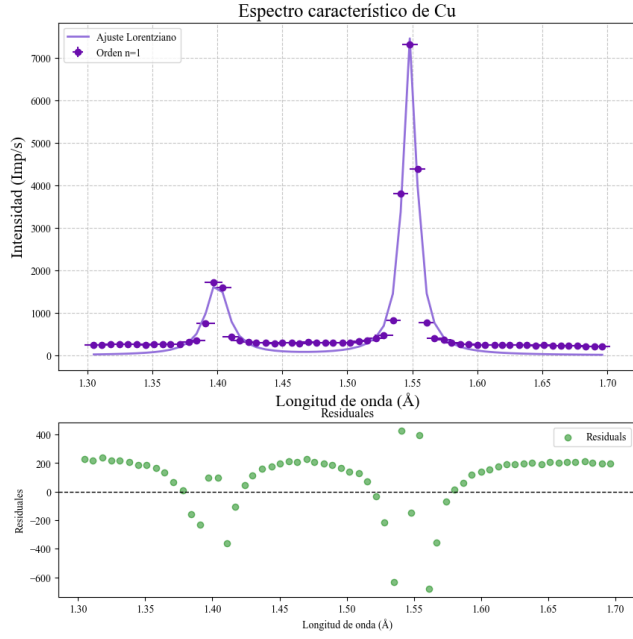


Figura 4. Ajuste Lorentziano para el primer orden de difracción. Podemos ver como los residuales no presentan mucha aleatoriedad, salvo quizá, en los picos. Esto indica como nuestro ajuste no es realmente fiable.

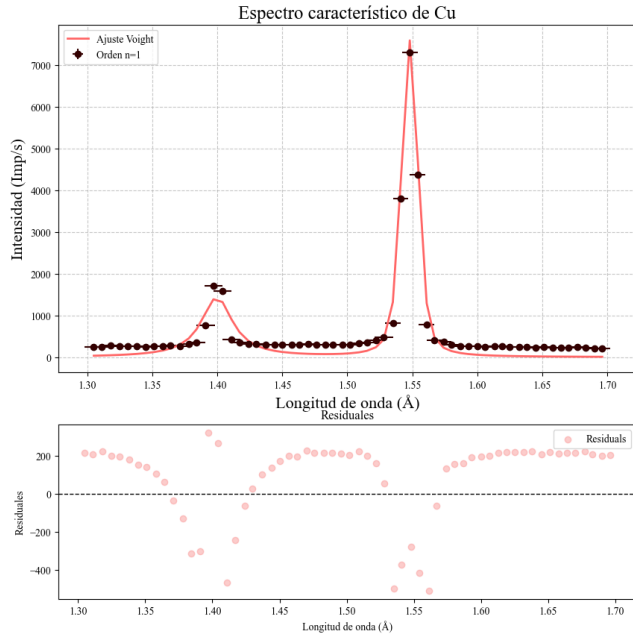


Figura 5. Perfil de Voight para el primer orden de difracción. Como en el caso anterior, vemos unos residuales poco aleatorios, dando así indicios de la poca credibilidad del ajuste.

En la literatura que usamos [4], los valores para estas longitudes son 1,54 Å y 1,39221 Å respectivamente. Po-

demos ver que en todos los casos, menos para K_β con $n = 2$, tenemos exactitud. En términos de precisión, nuestros ajustes son precisos en todos los casos, ya que nuestra incertidumbre relativa siempre es menor al 1%. A partir de estos datos podemos obtener los valores de la energía de cada pico. Para este cálculo usamos el primer ajuste de Lorentz, ya que se ajusta mejor a los datos. Los resultados los vemos en el siguiente cuadro.

Ajuste lorentziano ($n = 1$)	Valor teórico [keV]	E [keV]
K_β	8,905413(38)	1724,07(1,64)
K_α	8,0478227(26)	7443,66(1,80)

Cuadro I. Valores teóricos del NIST [1] y valores obtenidos con el ajuste de Lorentz.

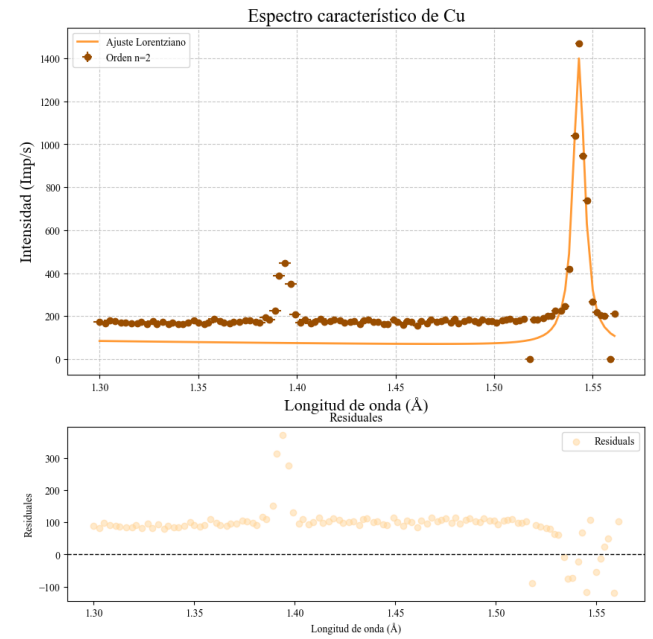


Figura 6. Ajuste Lorentziano para el segundo orden de difracción. Se evidencia un patrón más bien errático en el ajuste con respecto a nuestros datos. Vemos que modelamos únicamente un solo pico, y los residuales son poco aleatorios.

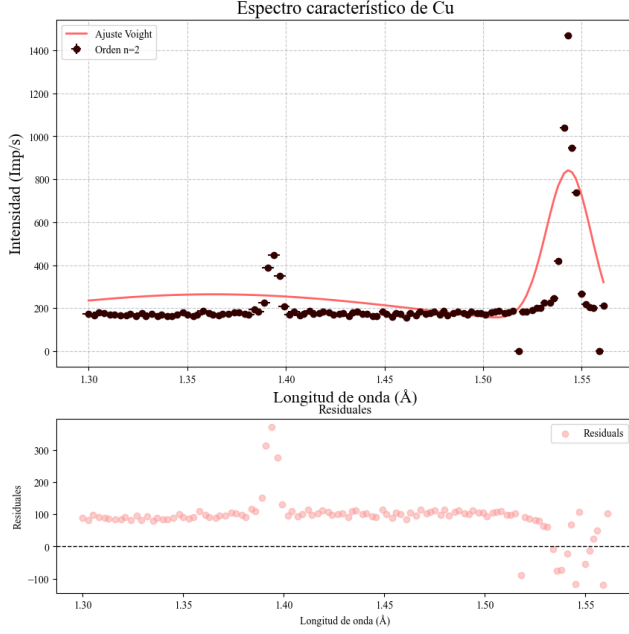


Figura 7. Perfil de Voigt para el segundo orden de difracción. Como podemos ver a simple vista, el perfil no se ajusta en casi nada a los datos. Presumiblemente por las mismas razones por las cuales falló el ajuste Lorentziano. Este comportamiento se ve reflejado en la poca aleatoriedad de los residuales.

B. Actividad 2: Absorción de Rayos X.

Para hallar el coeficiente de absorción de Rayos X del Zn y el Al, guiados por la ecuación 3 realizamos un despeje de la siguiente forma para realizar una regresión lineal:

$$\ln\left(\frac{I}{I_0}\right) = -\mu d \quad (7)$$

En las figuras 8 y 9 se observa la absorción de Rayos X de Aluminio y Zinc respectivamente variando la longitud de onda correspondiente. Los coeficientes de absorción obtenidos mediante *Weighted least squares* de numpy se muestran en la tabla II.

A continuación, calculamos el coeficiente de atenuación de masa $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)$ con $\rho_{Al} = 2698 \text{ Kg/m}^3$ y $\rho_{Zn} = 7138 \text{ Kg/m}^3$. Guiados por la ecuación (4) graficamos el coeficiente de atenuación de masa respecto al cubo de la longitud de onda como se muestra en las figuras 10 y 11 para el Aluminio y el Zinc respectivamente.

Se puede observar que la tendencia no es lineal como lo sugiere la ecuación (4). El ajuste realizado en ambos

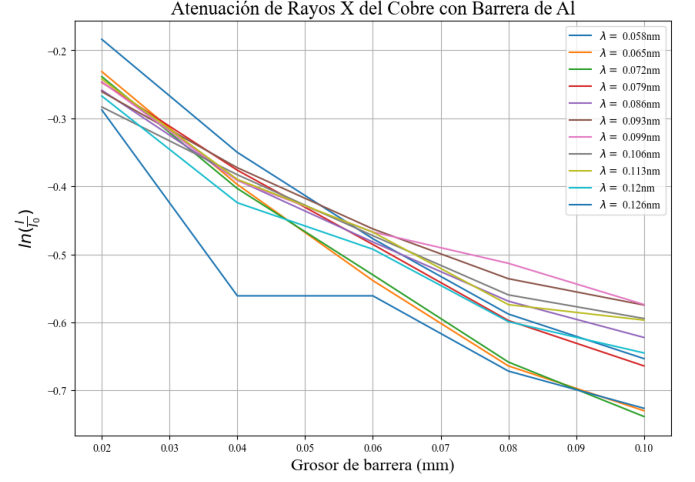


Figura 8. Atenuación de Rayos X del Cobre con Barrera de Al

Los datos se obtuvieron barriendo el rango de ángulos especificado en section II C y pasando a longitud de onda mediante ley de Bragg (5) con $n=1$. Debido a que no se obtiene una visualización graficando los datos y los modelos lineales correspondientes.

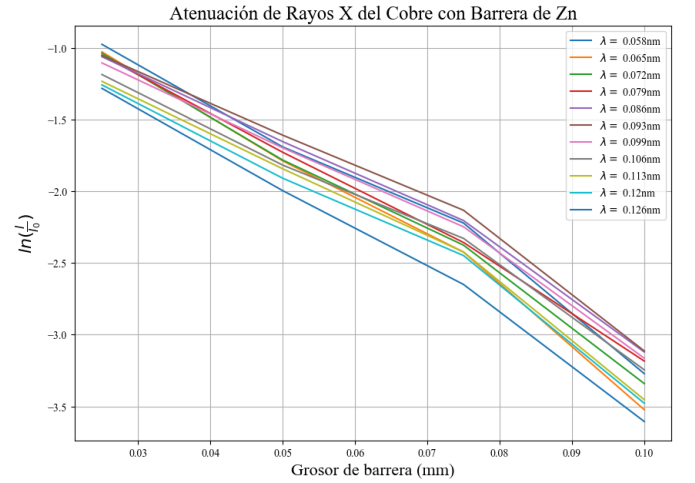


Figura 9. Atenuación de Rayos X del Cobre con Barrera de Zn

Los datos se obtuvieron barriendo el rango de ángulos especificado en section II C y pasando a longitud de onda mediante ley de Bragg (5) con $n=1$. Debido a que no se obtiene una visualización graficando los datos y los modelos lineales correspondientes.

casos corresponde a *Weighted least squares* de grado 3 de numpy con los siguientes resultados:

$\lambda \pm 0,0007$ (nm)	$\mu_{Al}(\frac{1}{mm})$	$\Delta\mu_{Al}(\frac{1}{mm})$	$\mu_{Zn}(\frac{1}{mm})$	$\Delta\mu_{Zn}(\frac{1}{mm})$
0.0581	5.9	0.5	30	3
0.0651	6.3	0.5	32	3
0.0720	6.3	0.4	30	2
0.0789	5.3	0.3	28	1
0.0858	4.5	0.4	27	2
0.0927	4.0	0.4	27	3
0.0995	3.9	0.5	27	2
0.1063	4.0	0.4	27	2
0.1130	4.5	0.6	29	3
0.1198	4.6	0.5	29	3
0.1265	4.9	1	30	2

Cuadro II. Coeficiente de absorción de Rayos X de Al y Zn
Se muestran los coeficientes de absorción de Rayos X de Al y Zn de acuerdo a su correspondiente longitud de onda medida.

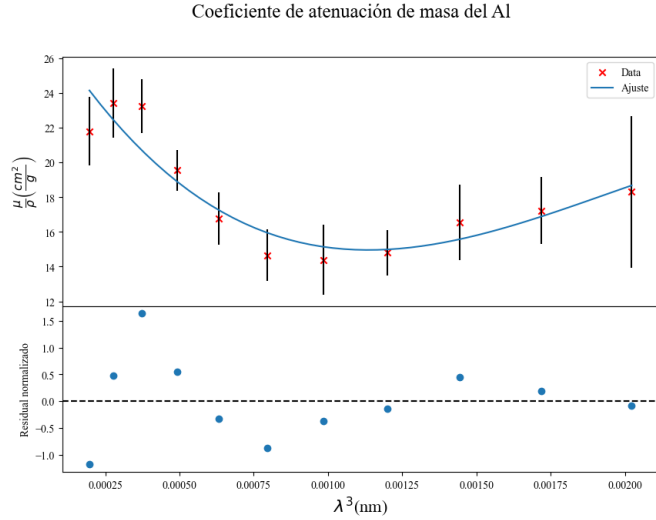


Figura 10. Coeficiente de atenuación de masa del Al
Los datos se obtuvieron al dividir por la densidad del Al los coeficientes de atenuación antes calculados.

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{Al} &= (-3 \pm 3)10^9 \lambda^9 + (2 \pm 1)10^7 \lambda^6 \\
 &\quad + (-3 \pm 1)10^4 \lambda^3 + (29 \pm 3) \\
 \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{Zn} &= (-4 \pm 3)10^9 \lambda^9 + (2 \pm 1)10^7 \lambda^6 \\
 &\quad + (-3 \pm 1)10^4 \lambda^3 + (48 \pm 3)
 \end{aligned} \tag{8}$$

Por último, en la tabla III se indican coeficientes de atenuación de masa de Al y Zn según longitud de onda.

Con energías de fotón incidente desde los $9,8 \times 10^{-3} MeV$ a $21,3 \times 10^{-3} MeV$. Comparando con los valo-

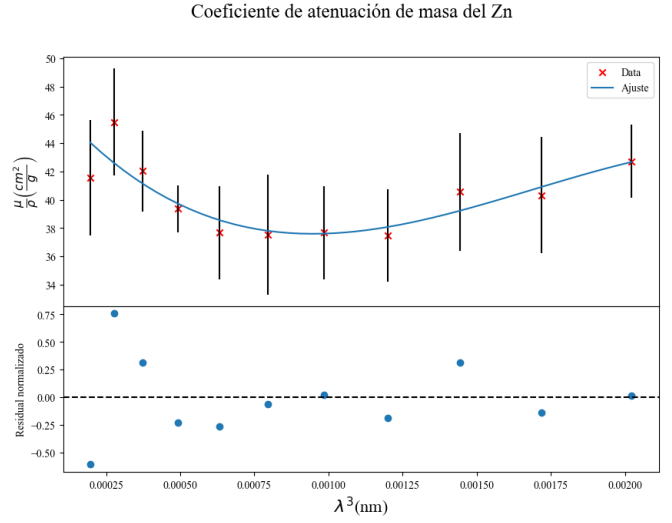


Figura 11. Coeficiente de atenuación de masa del Zn
Los datos se obtuvieron al dividir por la densidad del Zn los coeficientes de atenuación antes calculados.

$\lambda \pm 0,0007$ (nm)	$\frac{\mu}{\rho}_{Al} \left(\frac{cm^2}{g}\right)$	$\Delta \frac{\mu}{\rho}_{Al} \left(\frac{cm^2}{g}\right)$	$\frac{\mu}{\rho}_{Zn} \left(\frac{cm^2}{g}\right)$	$\Delta \frac{\mu}{\rho}_{Zn} \left(\frac{cm^2}{g}\right)$
0.0581	22	2	42	4
0.0651	23	2	45	4
0.0720	23	2	42	3
0.0789	20	1	39	2
0.0858	17	1	38	3
0.0927	15	1	37	4
0.0995	14	2	38	3
0.1063	15	1	37	3
0.1130	16	2	40	4
0.1198	17	2	40	4
0.1265	18	4	43	2

Cuadro III. Coeficiente de atenuación de masa de Al y Zn
Se muestran los coeficientes de atenuación de masa de Al y Zn de acuerdo a su correspondiente longitud de onda medida.

res expuestos en la base de datos de NIST [NIST], para el aluminio entre los rangos mencionados el coeficiente de atenuación de masa está entre $2,623 \times 10^1$ y $3,441 cm^2/g$, y para el zinc entre $2,331 \times 10^1$ y $3,719 \times 10^1 cm^2/g$. Se evidencia que para el caso del Aluminio se obtuvo precisión, mas sin embargo para el Zinc no. En cuanto a precisión, de acuerdo al criterio establecido en V A, tanto para el Al y el Zn 6 de los 11 coeficientes de atenuación de masa resultaron precisos.

C. Actividad 3: Dependencia de la intensidad del voltaje y corriente del ánodo.

Vamos a estudiar la dependencia de la intensidad, para las líneas K_β y K_α del cobre, con el voltaje y la corriente. Si tenemos una longitud de onda dada, debe seguir la siguiente relación

$$(9) \quad I_\lambda = I_0 b (U_a - U_K)^{3/2}.$$

Siendo I_0 la corriente, U_a el voltaje en el ánodo y U_K el potencial de ionización del orbital K. Vamos a tomarlo como $U_K = 9,979\text{keV}$. Primero vamos a graficar I vs λ para diferentes voltajes con un ajuste Lorentziano.

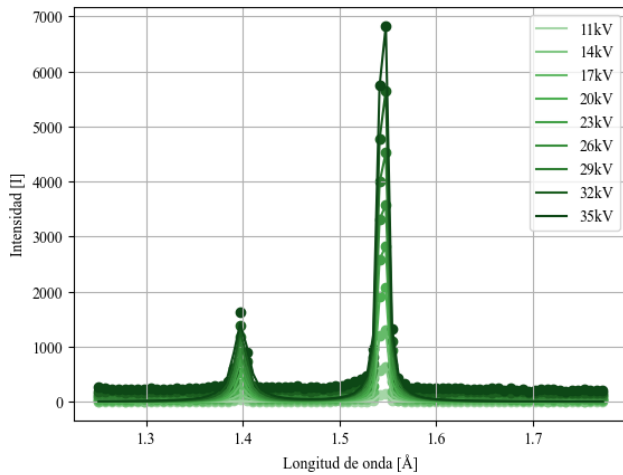


Figura 12. Intensidad en función de la longitud de onda para los diferentes valores de voltaje

Estas gráficas deben ser interpretadas con cautela. A simple vista parecen un buen ajuste, pero en realidad, para el primer voltaje, y para los últimos dos, las gráficas reales tienen picos más arriba de lo esperado para la línea K_α . En particular, el primer dato presenta un valor de energía para esta línea exageradamente alta. Esto seguro es un error en el código, o debido a un error aleatorio de la máquina. Por esta razón, no se tomó en cuenta ese dato, ya que no permitía un buen análisis.

En las siguientes gráficas se hacen dos clases de ajuste para K_β y K_α de acuerdo con la ecuación III C.

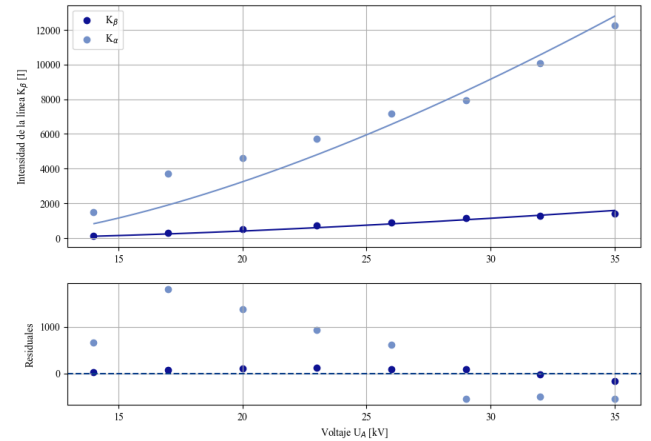


Figura 13. Ajuste de intensidad en función del voltaje, de acuerdo a la ecuación III C. Esto a una corriente constante de 1mA. Los residuales son bastante aleatorios como esperaríamos, reflejando así alta fiabilidad del ajuste.

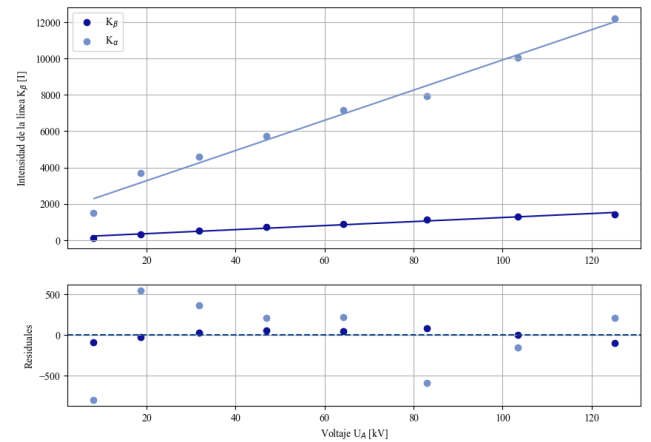


Figura 14. Ajuste linealizando los datos. De nuevo, los residuales son bastante aleatorios como esperaríamos, reflejando así alta fiabilidad del ajuste.

Ahora vamos a ver la gráfica de I vs λ para diferentes valores de corriente y el respectivo ajuste. Una particularidad de este caso, es que ahora todos los datos presentan valores razonables para los picos. Esto tiende a confirmar la teoría de un error aleatorio en la máquina para el caso de voltaje variable.

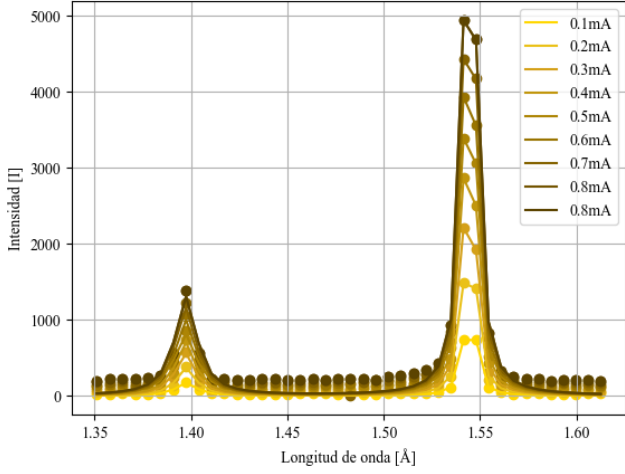


Figura 15. Intensidad en función de la longitud de onda para los diferentes valores de corriente.

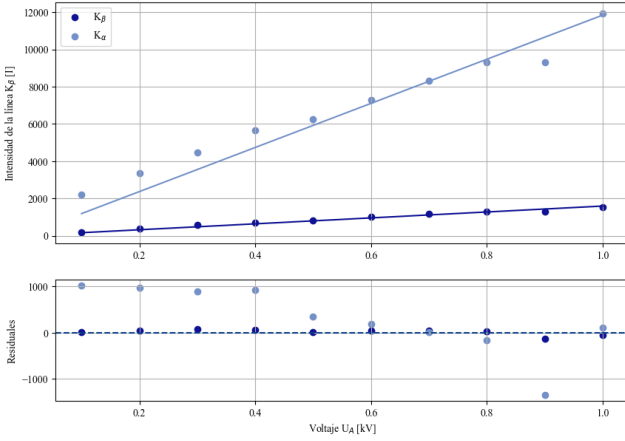


Figura 16. Ajuste para la intensidad de las líneas espectrales en función de la corriente, para un valor fijo del voltaje de 35keV. Vemos la tendencia lineal predicha por la ecuación III C. Los residuos son bastante aleatorios como esperaríamos, reflejando así alta fiabilidad del ajuste.

Para cada uno de los ajustes que vimos se puede determinar la constante b , los cuales se reportan en el cuadro IV. Realmente no encontramos valores teóricos para esta constante, por lo cual no es factible discutir acerca de la exactitud de estos datos.

Parámetro b	U_A	$(U_a - U_k)^{2/3}$	I_A
b_α	102 ± 5	83 ± 4	95 ± 3
b_β	$12,8 \pm 0,5$	$11,1 \pm 0,7$	$12,7 \pm 0,3$

Cuadro IV. Valores para la constante b de cada ajuste. La constante tiene unidades de $V^{-2/3}$

D. Actividad 4: Ley de Duane-Hund.

Lamentablemente, como se puede observar en la gráfica 17 lo único que se puede observar es ruido.

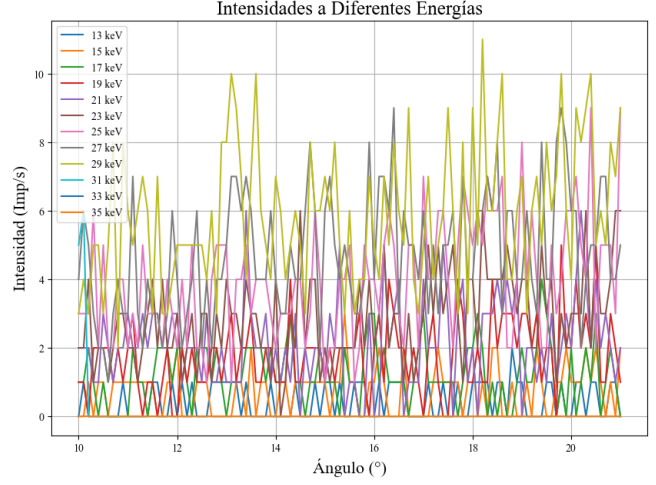


Figura 17. Espectro de Rayos X del Cobre a Diferentes Energías

Los datos se obtuvieron al disparar Rayos X a un cristal de LiF a distintas energías de disparo.

Como posibles causas se pueden proponer la mala instalación del diafragma/colimador de 2mm o al haber hecho mediciones en ángulos fuera del rango donde empieza la radiación de frenado (*Bremsstrahlung*).

IV. CONCLUSIONES

Uno de los objetivos principales de este experimento, que se evidenció a lo largo de toda la práctica, era la distinción entre *Bremsstrahlung* y el espectro característico del Cobre. En este último, se logró medir de manera bastante exitosa los valores de energía para las líneas K_β y K_α y sus longitudes de onda. Los valores difirieron en $2,9\sigma$ y $0,09\sigma$ respectivamente, lo cual es bastante razonable. En cuanto a la absorción de Rayos X se logró evidenciar una absorción de tipo exponencial como lo predice la ecuación (3) y se lograron calcular los coeficientes de absorción para cada material satisfactoriamente. En cuanto al coeficiente de atenuación de masa se obtuvo exactitud para el caso del Aluminio y precisión en la mitad de los coeficientes. Otro de los objetivos era evidenciar el comportamiento funcional de las intensidades de los picos en función de la corriente y el voltaje. Pudimos ver cómo el ajuste teórico planteado tiene un grado de fiabilidad considerable; sin embargo, al no tener valores teóricos para las constantes del ajuste, no se puede decir mucho en términos de exactitud.

Por último, para la ley de Duane-Hund se evidencia un resultado insatisfactorio en la toma de datos.

-
- [1] National Institute of Standards and Technology (NIST) (2024). X-ray transition energies database. Accessed: 2025-12-02.
 - [NIST] NIST. *X-Ray Mass Attenuation Coefficients*. Accessed: 2025-02-12.
 - [3] Nobel Prize (1901). Wilhelm röntgen - facts. Accessed: 2025-01-29.
 - [4] PHYWE (2024). *Characteristic X-rays of Copper*. Göttingen, Germany. Accessed: 2025-01-29.
 - [5] Suryanarayana and Norton, G. (1998). *X-Ray Diffraction: A Practical Approach*.

V. ANEXOS

A. Criterios

- Precisión: $= \frac{\sigma}{X_{exp}} \leq 0,1$
- *Exactitud* $:= |X_{real} - X_{exp}| \leq 3 \cdot \sigma$

B. Apéndice de cálculo

- Propagación de errores:

$$\sigma_f = \sqrt{\sum_i^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \sigma x_i \right)^2} \quad (10)$$