

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA
UNIDAD DE INVESTIGACIÓN



INFORME FINAL DEL PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

**“TRANSICIONES ENERGÉTICAS K EN ESPECTROS DE
EMISIÓN DE RAYOS X: DETERMINACIÓN EXPERIMENTAL Y
SU EVIDENCIA SEGÚN LAS REGLAS DE SELECCIÓN”**

AUTOR: CARLOS ALBERTO QUIÑONES MONTEVERDE

(PERIODO DE EJECUCIÓN: DEL 01.09.2019 AL 31.08.2020)

(RESOLUCIÓN DE APROBACIÓN N° 980-2019-R)

Callao, 2020

A handwritten signature in black ink, consisting of a stylized 'C' followed by a vertical line and a horizontal stroke.

DEDICATORIA

A mi madre Isolina, la principal promotora de mis sueños, quien supo confiar y creer en mis expectativas; por los consejos, valores y principios que me inculcó.

A mis esposa Blanca, mi compañera de vida, por su cariño, paciencia, comprensión y apoyo incondicional en todo momento.

A mis hijos Andrés y Aimeé, en quienes proyecto mi existencia, por ser los motores más fieles y confiables que pude encontrar en mi vida, por hacerme sentir orgulloso por todos sus logros alcanzados.



AGRADECIMIENTO

A la UNAC que, a través de su VRI y el aporte del FEDU, vienen impulsando con mucho esmero y responsabilidad la realización de las tareas de investigación.

A mi familia, por el estímulo recibido y la tolerancia durante el lapso en que este trabajo absorbió gran parte del tiempo que debí haberles dedicado.

Al Dr. Rafael Edgardo Carlos Reyes, Jefe de Laboratorios y Talleres de Física y Química de la Facultad de Ciencias Naturales y Matemática, por brindarme todas las facilidades para el uso del Laboratorio de Difractometría de rayos X, donde se llevó a cabo la parte experimental del proyecto.

A la Sra. Susana Raquel Rivas Huash, Secretaria del Departamento Académico de Física, por el apoyo brindado en la digitación y diagramación de los textos de los informes trimestrales y el informe final del proyecto de investigación.

A todos aquellos que, de alguna manera, estuvieron conmigo en los momentos difíciles, alegres, y tristes que me tocó vivir durante la ejecución del proyecto.



ÍNDICE

	Página
INDICE	1
TABLAS DE CONTENIDO	3
RESUMEN	8
ABSTRACT	9
INTRODUCCIÓN	10
CAPÍTULO I: PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	11
1.1. Descripción de la realidad problemática	11
1.2. Formulación del problema	12
1.3. Objetivos	13
1.4. Limitantes de la investigación	13
CAPÍTULO II: MARCO TEÓRICO	15
2.1. Antecedentes	15
2.2. Marco	17
2.2.1. Teórico	17
2.2.2. Conceptual	30
2.3. Definición de términos básicos	31
CAPÍTULO III: HIPÓTESIS Y VARIABLES	33
3.1. Hipótesis	33
3.2. Definición conceptual de variables	33
3.3. Operacionalización de variables	34



CAPÍTULO IV: DISEÑO METODOLÓGICO	35
4.1. Tipo y diseño de Investigación	35
4.2. Método de investigación	35
4.3. Población y muestra	44
4.4. Lugar de estudio y período desarrollado	44
4.5. Técnicas e instrumentos para la recolección de la información	44
4.6. Análisis y procesamiento de datos	50
CAPÍTULO V: RESULTADOS	56
5.1. Resultados descriptivos	56
5.2. Resultados inferenciales	61
5.3. Otro tipo de resultados	62
CAPÍTULO VI: DISCUSIÓN DE RESULTADOS	64
6.1. Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados	64
6.2. Contrastación de los resultados con otros estudios similares	66
6.3. Responsabilidad ética	67
CONCLUSIONES	68
RECOMENDACIONES	69
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	70
ANEXOS	72
- Matriz de consistencia	73
- Espectros de emisión de rayos X obtenidos	74
- Longitudes de onda y energías para las radiaciones características	87



TABLAS DE CONTENIDO

INDICE DE FIGURAS	Página
Figura 1. Líneas $K\alpha$ y $K\beta$ del espectro característico, que corresponden a determinados valores de longitudes de onda, superpuesto al espectro continuo que se extiende en todo el rango de longitudes de onda.	18
Figura 2. Producción de la radiación característica debido a la transferencia de un electrón a la capa K para cubrir la vacancia creada por la expulsión de un electrón	20
Figura 3. Líneas más importantes del espectro debido a las transiciones electrónicas	26
Figura 4. Diagrama de niveles de energía del Cobre mostrando las posibles transiciones electrónicas	27
Figura 5. Diagrama de niveles de energía del Molibdeno mostrando las posibles transiciones electrónicas	28
Figura 6. Diagrama de niveles de energía del Hierro mostrando las posibles transiciones electrónicas	29
Figura 7. Material del blanco del ánodo mostrado en el display del equipo	36
Figura 8. Botones del panel de control usados en el proceso de autocalibración del goniómetro	36
Figura 9. Display del equipo mostrando la selección de la función <i>Autocalibración</i>	37
Figura 10. Display mostrando las Curvas de calibración al final del proceso de Autocalibración con la leyenda <i>Calibración exitosa</i>	37
Figura 11. Ventana del Navegador del programa <i>Measure 4.6.15.3</i>	38
Figura 12. Ventana <i>Ajustes de los tubos</i> para fijar los valores del voltaje y la corriente de operación del tubo de rayos X de Cobre	39
Figura 13. Ventana interactiva <i>Ajustes del goniómetro</i> para definir los parámetros experimentales del goniómetro	39

Figura 14.	Ventana <i>Procesamiento de datos adicional</i> para definir qué hacer con los datos experimentales obtenidos	40
Figura 15.	Espectros de emisión del Cobre obtenidos experimentalmente usando los monocristal de LiF (100), KBr (100), NaCl (100), NaCl (110) y NaCl (111)	41
Figura 16.	Espectros de emisión del Molibdeno obtenidos experimentalmente usando los monocristal de LiF (100), KBr (100), NaCl (100) y NaCl (110)	42
Figura 17.	Espectros de emisión del Fierro obtenidos experimentalmente usando los monocristal de LiF (100), KBr (100), NaCl (100), NaCl (110) y NaCl (111)	43
Figura 18.	Equipo XR 4.0 PHYWE y sus elementos funcionales	45
Figura 19.	Panel de control del equipo XR 4.0 PHYWE	46
Figura 20.	El tubo de rayos X y sus elementos funcionales	47
Figura 21.	El goniómetro y sus elementos funcionales	48
Figura 22.	El Contador Geiger-Müller	49
Figura 23.	Juego de Monocristales	50
Figura 24.	Área seleccionada del espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de LiF (100)	51
Figura 25.	Área seleccionada del espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de LiF (100) mostrando la ventana de diálogo <i>Análisis de picos</i>	52
Figura 26.	Área seleccionada del espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de LiF (100) mostrando la ventana de diálogo <i>Análisis de picos</i> y los resultados obtenidos	52
Figura 27.	Espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de LiF (100) mostrando la ventana de diálogo <i>Leyenda</i>	53
Figura 28.	Espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de LiF (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de	54

difracción $n = 1$ y $n = 2$

- Figura 29. Espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de KBr (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ y $n = 4$ 74
- Figura 30. Espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$ y $n = 3$ 75
- Figura 31. Espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (110) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 2$ y $n = 4$ 76
- Figura 32. Espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (111) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ y $n = 4$ 77
- Figura 33. Espectro de emisión del Molibdeno obtenido experimentalmente usando el monocristal de LiF (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ y $n = 4$ 78
- Figura 34. Espectro de emisión del Molibdeno obtenido experimentalmente usando el monocristal de KBr (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ y $n = 4$ 79
- Figura 35. Espectro de emisión del Molibdeno obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ y $n = 4$ 80
- Figura 36. Espectro de emisión del Molibdeno obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (110) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de 81



difracción $n = 2$, $n = 4$ y $n = 6$

- Figura 37. Espectro de emisión del Hierro obtenido experimentalmente usando el monocristal de LiF (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$ y $n = 2$ 82
- Figura 38. Espectro de emisión del Hierro obtenido experimentalmente usando el monocristal de KBr (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$ y $n = 3$ 83
- Figura 39. Espectro de emisión del Hierro obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$ y $n = 3$ 84
- Figura 40. Espectro de emisión del Hierro obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (110) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 2$ y $n = 4$ 85
- Figura 41. Espectro de emisión del Hierro obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (111) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$ y $n = 3$ 86



ÍNDICE DE TABLAS

Página

Tabla 1. Energías de transición electrónica del Cobre	57
Tabla 2. Energías de transición electrónica del Molibdeno	59
Tabla 3. Energías de transición electrónica del Hierro	61
Tabla 4. Análisis del diagrama de niveles de energía de los Elementos en relación a los números cuánticos	65
Tabla 5. Valores experimentales y aceptados de las energías de transición electrónica de los elementos	66



RESUMEN

En este trabajo de investigación, se ha hecho uso de la técnica de espectroscopía de rayos X para la medición experimental de las longitudes de onda y las energías correspondientes a las transiciones electrónicas representadas por las líneas características $K\alpha$ y $K\beta$ en los espectros de emisión de rayos X de algunos elementos metálicos.

Los elementos estudiados fueron cobre, molibdeno y fierro, materiales del blanco del ánodo de los tubos de rayos X usados, operando a 35 kV y 1 mA. Se usó un equipo XR 4.0 PHYWE y diversos tipos de monocristales analizadores: LiF(100), KBr(100), NaCl(100), NaCl(110) y NaCl(111), con el propósito de determinar experimentalmente los valores de las energías correspondientes a las transiciones electrónicas en cada elemento y cómo éstas se justifican mediante las reglas de selección de la mecánica cuántica.

Los resultados experimentales obtenidos para las energías de las transiciones electrónicas $K\alpha$ y $K\beta$ del cobre (8,031 keV y 8,887 keV), del molibdeno (17,426 keV y 19,552 keV) y del fierro (6,407 keV y 7,058 keV) son comparables, con bastante aproximación, con los reportados por otras fuentes; aún cuando, el equipo usado es un módulo de enseñanza de baja resolución. Asimismo, estos resultados han permitido comprobar las hipótesis planteadas en el proyecto.

Palabras claves: Espectroscopía de rayos X, líneas características del espectro, transiciones electrónicas, reglas de selección.



ABSTRACT

In this research work, the X-ray spectroscopy technique has been used for the experimental measurement of wavelengths and energies corresponding to the electronic transitions represented by the characteristic lines $K\alpha$ and $K\beta$ in the emission spectra X-ray of some metallic elements.

The studied elements were copper, molybdenum and iron, materials of the anode target of the used X-ray tubes, operating at 35 kV and 1 mA. An XR 4.0 PHYWE kit and various types of analyzer monocrystals were used: LiF (100), KBr (100), NaCl (100), NaCl (110) and NaCl (111), in order to experimentally determine the values of the energies corresponding to the electronic transitions in each element and how these are justified by the selection rules of quantum mechanics.

The experimental results obtained for the energies of the electronic transitions $K\alpha$ and $K\beta$ of copper (8,031 keV and 8,887 keV), molybdenum (17,426 keV and 19,552 keV) and iron (6,407 keV and 7,058 keV) are comparable, with enough approximation, with those reported by other sources; even though, the equipment used is a low resolution teaching module. Likewise, these results have allowed to verify the hypotheses raised in the project.

Key words: X-ray spectroscopy, characteristic lines of the spectrum, electronic transitions, selection rules.



INTRODUCCIÓN

La espectroscopía de emisión de rayos X es una técnica que permite obtener información acerca del átomo y las moléculas, basada en la medición de las longitudes de onda y las energías de las líneas características $K\alpha$ y $K\beta$ del espectro de emisión de rayos X que se obtiene después de que un material de un determinado elemento químico es impactado con electrones de alta energía que llegan hasta el interior del átomo del material y expulsan uno de los electrones que está en la capa K cercana al núcleo del átomo, creando una vacancia que puede ser cubierta por algún electrón que se encuentra en la capa L o en la capa M, emitiendo un fotón de rayos X de energía elevada dando lugar al espectro característico de rayos X.

No todas las transiciones de electrones de una capa a otra son posibles; más aún, si se tiene en cuenta que la capa L tiene 3 sub-capas y la capa M tiene 5. Para que ocurra una transición de un electrón ubicado en una sub-capas de la capa L o la capa M hacia la capa K se deben cumplir las reglas de selección de la mecánica cuántica, las cuales son un conjunto de valores que asumen los números cuánticos asociados a los electrones ubicados en cada capa o sub-capas del átomo y que limitan el número de transiciones electrónicas posibles.

La Facultad de Ciencias Naturales y Matemática posee el equipo XR 4.0 PHYWE de enseñanza que pudo usarse para la obtención experimental de espectros de emisión de rayos X de elementos como el cobre, molibdeno y hierro usando monocristales analizadores con diferentes distancias interplanar.

En este trabajo de investigación, se mostró cómo diversos tipos de monocristales analizadores: LiF(100), KBr(100), NaCl(100), NaCl(110) y NaCl(111), que poseen diferentes distancias interplanares, fueron usados para la obtención de los espectros de emisión K del cobre, molibdeno y hierro, con el propósito de determinar experimentalmente los valores de las transiciones energéticas y cómo éstas se justifican mediante las reglas de selección.



CAPÍTULO I: PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1. Descripción de la realidad problemática

La espectroscopía de rayos X es una técnica que permite obtener información acerca del átomo y las moléculas, basada en la medición de las longitudes de onda y las energías de las líneas características del espectro de emisión de rayos X que se obtiene después de que un material es impactado con electrones de alta energía. En los tubos de rayos X de los laboratorios, estos electrones son generados por emisión termoiónica en el filamento adjunto al cátodo y son acelerados hacia el blanco del ánodo por una gran diferencia de voltaje entre el ánodo y el cátodo. (Martínez, 2009).

Al alcanzar el blanco del ánodo, los electrones emitidos por el cátodo poseen energía suficiente para vencer la repulsión eléctrica de los electrones ubicados en las capas exteriores de los átomos del elemento que está siendo utilizado como material del blanco, pudiendo presentarse dos casos: (1) llegar hasta el interior del mismo átomo del blanco para expulsar uno de los electrones que está en las capas más cercanas al núcleo del átomo, creando una vacancia que puede ser cubierta por algún electrón que se encuentre en las capas superiores, emitiendo un fotón de rayos X de energía elevada, dando lugar al espectro característico de rayos X; y (2) cambiar su dirección de movimiento respecto al núcleo del átomo sin alterar, en su recorrido, la estructura electrónica del átomo del blanco, dando origen a la radiación de frenado o *bremstrahlung*, lo que da lugar al espectro continuo de rayos X. (Martínez, 2009). Debemos tener presente que, según la electrodinámica clásica, una partícula con carga eléctrica emite radiación electromagnética cuando es acelerada.

Sin embargo, no todas las transiciones de electrones de una capa a otra son posibles. Para que ocurra una transición se deben cumplir ciertos requisitos denominados, reglas de selección, en los estados fundamentales y excitados

Si se obedece una regla de selección, se dice que la transición está permitida; pero si se viola la regla de selección, la transición está prohibida. Las reglas de selección de la espectroscopía electrónica, proporcionan información de la probabilidad de una transición electrónica dada y son las siguientes: (1) El cambio en el número cuántico principal n debe ser ≥ 1 ; (2) El cambio en el número cuántico azimutal ℓ sólo puede ser ± 1 ; (3) El cambio en el número cuántico de momento angular j sólo puede ser ± 1 o 0. (Velásquez, 2011).

Resulta evidente que, para obtener información importante acerca de la estructura interna de los átomos de los elementos, que van a definir sus diversas propiedades físicas y químicas, se hace necesario analizar la radiación originada por la expulsión de uno de los electrones interiores del átomo, determinar su energía y, asimismo, observar qué transiciones son posibles en los espectros de emisión de rayos X. (Olmo y Nave, s.f)

La Facultad de Ciencias Naturales y Matemática posee un equipo de rayos X - el XR 4.0 de la empresa PHYWE - que puede usarse para la obtención experimental de espectros de emisión de rayos X de elementos como el cobre, molibdeno y fierro usando monocristales analizadores con diferentes distancias interplanar, tales como, LiF(100), KBr(100), NaCl(100), NaCl(110) y NaCl(111) y realizando barridos en el goniómetro con intervalos angulares variables a fin de conseguir la mayor cantidad de órdenes de difracción en los espectros

1.2. Formulación del problema

Por todo lo expuesto, se planteó e intentó resolver las siguientes interrogantes:

Problema General

¿Las reglas de selección evidencian las transiciones energéticas K en los espectros de emisión de rayos X obtenidos experimentalmente?



Problemas Específicos

¿Los espectros de emisión de rayos X permitirán determinar las energías de las líneas características?

¿El número de órdenes de difracción en los espectros de emisión de rayos X dependerá de la distancia interplanar del monocristal analizador usado?

1.3 Objetivos

Objetivo General

Determinar experimentalmente las transiciones energéticas K en espectros de emisión de rayos X y evidenciarlas mediante las reglas de selección.

Objetivos Específicos

1. Determinar las energías de las líneas características en los espectros de emisión de rayos X.
2. Observar la dependencia del número de órdenes de difracción en los espectros de emisión de rayos X con la distancia interplanar del monocristal analizador.

1.4 Limitantes de la Investigación

Las técnicas espectroscópicas son muy diversas y se usan para estudiar la interacción de la radiación electromagnética con la materia mediante la detección de la absorción o emisión de energía, la que puede ser de diferentes frecuencias y, por lo tanto, de diferentes longitudes de onda. Entre estas técnicas tenemos la espectroscopia infrarroja, la ultravioleta, la de luz visible, la de rayos X, la de rayos gamma, etc.

Por lo expresado, la limitante teórica de la investigación se circunscribió en el ámbito de la espectroscopía de emisión de rayos X, específicamente en las transiciones electrónicas hacia la capa K del átomo, por lo que se determinaron como unidades de análisis en el presente proyecto. En este sentido, nuestra referencia teórica se limitó, principalmente, a lo que se describía para la física de los rayos X, (Cullity & Stock, 2014), (Jenkins & De Vries, 1973), los aspectos teóricos relacionados con la estructura electrónica de los átomos bajo una descripción mecánico-cuántico de los números cuánticos (Tilley, 2013), y en las Series de Publicaciones PHYWE (PHYWE Series of Publications, 2005) y (measure 4.6.15.3., 2014), que hacen referencia a la determinación experimental de los espectros de rayos X.

Por otro lado, debido al tiempo que llevó realizar las diversas etapas del proyecto: revisión e interpretación de la información bibliográfica y su traducción al castellano, en la mayoría de los casos; al montaje y al alineamiento de los equipos e instrumentos que fueron usados en el desarrollo del trabajo experimental, y a la obtención e interpretación de los espectros de emisión de rayos X, se estableció el plazo de 12 meses como límite temporal para el desarrollo de todo el proyecto.

La limitante espacial de la investigación estableció que este proyecto se debía realizar en la Universidad Nacional del Callao, toda vez que el equipo XR 4.0 PHYWE se encontraba instalado en el Laboratorio de Difractometría de Rayos X de la Facultad de Ciencias Naturales y Matemática.



CAPÍTULO II: MARCO TEÓRICO

2.1. Antecedentes

2.1.1 Antecedentes: Internacional

CULLITY, B.D. & STOCK, S.R. *Elements of X-Ray Diffraction*. [2014]. Essex. Pearson Education Limited.

En el desarrollo del texto se presentan los conceptos y leyes de la física de los rayos X; esto es, la espectroscopía, la fluorescencia y la difracción de los rayos X. Del mismo modo, se incluye un breve pero interesante tratado sobre los aspectos más importantes de la geometría cristalina y una descripción muy detallada de todos los componentes que intervienen en la obtención experimental de espectros y patrones de difracción de rayos X, como lo son los tubos de rayos X, los sistemas de colimación de haces de rayos X, los cristales y los diversos tipos de detectores de radiación. Se incluyen tablas de valores aceptados de las energías de transición de los electrones de diversos elementos que pueden tomarse de referencia. Finalmente, todo un tratado de la difracción de los rayos X y sus diversas aplicaciones componen el complemento del texto.

Los valores de las energías de transición de los elementos, que fueron determinados experimentalmente en el presente proyecto, han podido ser contrastados con los que se exponen en este texto.

TILLEY, RICHARD. *Understanding Solids*. [2013]. West Sussex. John Wiley & Sons Ltd.

En este texto se exponen de manera precisa los aspectos teóricos relacionados con la estructura electrónica de los átomos, bajo una descripción mecánico-cuántico de los números cuánticos contenidas en las soluciones de la ecuación de Schrödinger y las energías del electrón. Asimismo, desarrolla aspectos importantes de la cristalografía, como son, la definición, clasificación y notación

de las estructuras cristalinas y las principales propiedades física de los diversos tipos de sólidos.

A diferencia del texto citado, este proyecto constituyó principalmente un trabajo experimental, pero por su importancia, este texto fue usado como referencia para contrastar las transiciones energéticas determinadas en los espectros de emisión de rayos X, en relación a los números cuánticos asociados a los electrones en sus diferentes estados.

PHYWE series of publications. TESS expert, Laboratory Experiments. [2005]. *X-ray experiments*. Göttingen: PHYWE Systeme GmbH & Co.

Constituye un manual donde se exponen los lineamientos e instrucciones para realizar un conjunto de experimentos que se pueden llevar a cabo aplicando técnicas de Espectroscopía, Difracción y Fluorescencia de rayos X, usando el equipo XR 4.0 PHYWE y diferentes detectores de radiación, entre los que se pueden citar, un tubo contador de gas Geiger-Müller, un detector de energía de estado sólido con un analizador multicanal y una cámara digital de alta resolución, como formas de sistemas de detección de los rayos X. La radiación puede provenir de tubos al vacío con ánodos de cobre, molibdeno, fierro y tungsteno. Se presentan resultados para los diversos experimentos que se exponen y que pueden usarse como referencia.

Para nuestro trabajo experimental, se usó también el equipo XR 4.0 PHYWE y la fuente de energía primaria provino de tubos de rayos X con ánodos de Cobre, Molibdeno y Fierro. El sistema de detección usado consistió de un tubo contador de gas Geiger-Müller. Los resultados experimentales se pudieron comparar con los que presenta el manual.

2.1.2 Antecedentes: Nacional

No se encontraron referencias bibliográficas relacionadas al proyecto en el ámbito nacional al formular el proyecto.

2.2. Marco

2.2.1. Teórico

a) Los rayos X

Los rayos X se pueden tratar como ondas electromagnéticas asociadas a sus longitudes de onda o como haces de fotones con sus energías asociadas (Brouwer, 2010). Todos los rayos X representan una porción muy energética del espectro electromagnético y tienen asociadas longitudes de onda comprendidas entre 0,1 a 100 angstroms (Å), donde $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$. Los rayos X limitan con la luz ultravioleta a longitudes de onda largas y con los rayos gamma a longitudes de onda cortas. Los rayos X en el rango de 50 a 100 Å se denominan rayos X blandos debido a que tienen energías más bajas y son absorbidos fácilmente. El rango de interés de los rayos X es aproximadamente de 0,1 a 100 Å. (Cullity & Stock, 2014).

La relación entre la frecuencia ν de la radiación electromagnética y su energía corpuscular E , es dada por:

$$E = h \nu \quad (1)$$

Donde: $h = 6,62 \times 10^{-24} \text{ J.s}$ es la constante de Planck y ν se expresa en Hertz.

Además, para todas las longitudes de onda λ , se cumple que: $\nu = c / \lambda$ (2)

Donde: $c = 2,99782 \times 10^8 \text{ m/s}$ es la velocidad de la luz en el vacío y λ se expresa en Å. De (2) en (1):

$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{(6,62 \times 10^{-24} \text{ J.s})(2,99782 \times 10^8 \text{ m/s})}{\lambda} = \frac{1,98636 \times 10^{-24}}{\lambda}$$

Donde: E se expresa en Joule y λ en metros.

Considerando que: $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$ y $1 \text{ eV} = 1,6021 \times 10^{-19} \text{ J}$, reemplazando

estos valores se tiene la ecuación de Duane-Hunt: $E(\text{eV}) = \frac{12,396}{\lambda(\text{Å})}$ (3)

Observar que existe una relación inversa entre la energía y la longitud de onda; esto es, longitudes de onda cortas corresponden a energías altas y longitudes de onda largas a bajas energías. Las energías en el rango de las longitudes de onda de los rayos X son 124 keV (0,1 Å) a 124 eV (100 Å). Las magnitudes de las energías de los rayos X sugirieron a los investigadores iniciales que los rayos X se producen desde el interior de un átomo. Los producidos a partir de un material consisten en dos componentes superpuestas distintas: el espectro continuo o radiación blanca, que tiene una distribución continua de intensidades sobre todo el rango de las longitudes de onda, y el espectro característico, que se produce como un pico de intensidad variable a longitudes de onda discretas, como muestra la Figura 1. (Cullity & Stock, 2014).

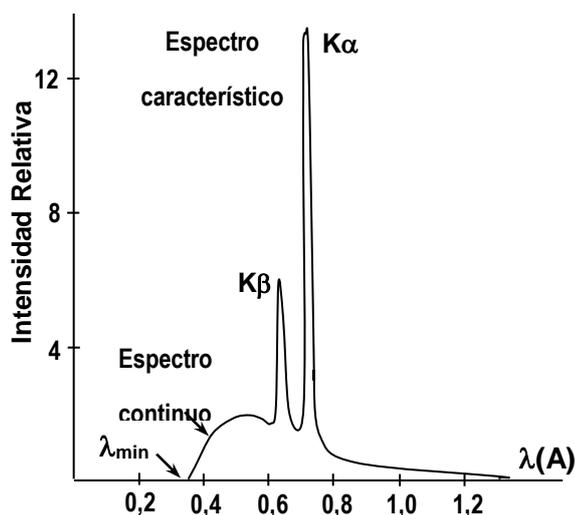


Figura 1. Líneas $K\alpha$ y $K\beta$ del espectro característico, que corresponden a determinados valores de longitudes de onda, superpuesto al espectro continuo que se extiende en todo el rango de longitudes de onda. Adaptado de Elements of X-Ray Diffraction por B. Cullity & S. Stock, 2014, p.8. Copyright 2014 por Pearson Education Limited.

Los rayos X poseen las siguientes propiedades: son invisibles; se propagan con la velocidad de la luz; no son afectados por campos eléctricos y magnéticos; son absorbidos de manera diferente cuando pasan a través de materiales de composición, densidad y espesor variable; son reflejados, difractados, refractados y polarizados; son capaces de: ionizar a los gases, afectar a las propiedades eléctricas de los sólidos y los líquidos, ennegrecer

una placa fotográfica, liberar fotoelectrones; son emitidos en un espectro continuo y también en un espectro de líneas características del elemento químico y tienen espectros característicos de absorción del elemento químico. (Cullity & Stock, 2014).

b) Producción de la radiación característica

Un átomo consiste de un núcleo, que contiene protones - que son partículas cargadas positivamente - y neutrones - que son partículas sin carga - rodeado de electrones distribuidos en capas u orbitales. La capa más interna se denomina la capa K, seguida por la capa L, la capa M, etc. La capa L tiene 3 sub-capas llamadas L_I , L_{II} y L_{III} . La capa M tiene 5 sub-capas M_I , M_{II} , M_{III} , M_{IV} y M_V . Las capas K, L y M pueden contener, respectivamente, 2, 8 y 18 electrones. La energía de un electrón depende de la capa que ocupa y del elemento al que pertenece. Cuando partículas tales como fotones de rayos X y electrones con energía suficientemente alta inciden sobre un átomo, pueden expulsar un electrón de la órbita del átomo, como muestra la Figura 2. (Brouwer, 2010).

Este hecho produce una vacancia en una capa. En el caso que se muestra en la Figura 2, la vacancia inicial se crea en la capa K, poniendo al átomo en un estado excitado inestable con una energía más alta. Como el átomo quiere restaurar la configuración original, transfiere un electrón de una capa exterior, tal como la capa L, para cubrir la vacancia en la capa K. Puesto que, un electrón de la capa L tiene una energía más alta que un electrón de la capa K; entonces, cuando un electrón de la capa L se transfiere a la capa K, debe emitir el excedente de energía como un fotón de rayos X. En un espectro de rayos X, esto se observa como una línea. (Brouwer, 2010)

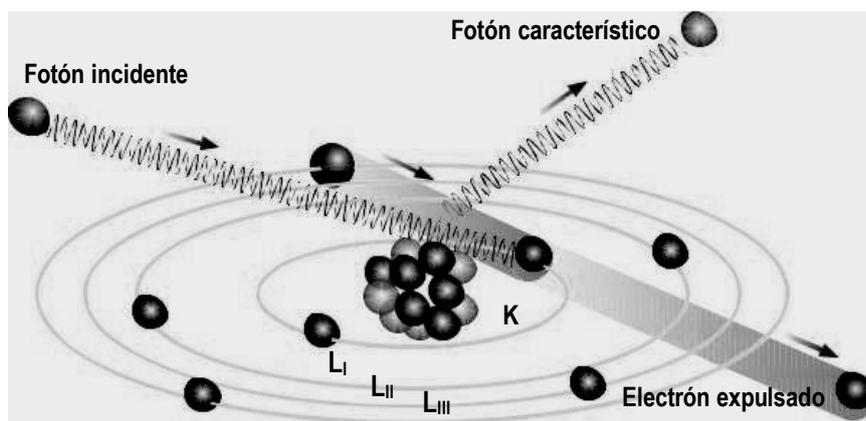


Figura 2. Producción de la radiación característica debido a la transferencia de un electrón a la capa K para cubrir la vacancia creada por la expulsión de un electrón. Adaptado de Theory of XRF por P. Brouwer, 2010, p. 11. Copyright 2003 por PANalytical BV.

La energía de los rayos X emitidos por el átomo depende entonces de la diferencia de las energías entre la capa con la vacancia inicial y la energía del electrón que cubre la vacancia. Cada átomo tiene sus niveles de energía con valores específicos, por lo que la radiación emitida por él es característica de ese átomo. Un átomo puede emitir energías de diferentes valores debido a que los fotones incidentes pueden originar diferentes vacancias que pueden ser cubiertas por diferentes electrones. El espectro de rayos X, que es la colección de las líneas emitidas por un átomo, es una característica del elemento y se puede considerar como la huella digital del elemento. (Brouwer, 2010).

Para conseguir expulsar un electrón de un átomo, los rayos X incidentes deben tener un mayor valor de energía que la energía de enlace del electrón. Si se logra expulsar un electrón del átomo, la radiación incidente se absorbe, y cuanto mayor sea la absorción más alta es la radiación emitida. Si, por otro lado, la energía de los rayos X incidentes es demasiado alta, muchos fotones traspasarán al átomo y sólo unos pocos electrones de éste serán removidos. (Brouwer, 2010).

Los espectros atómicos se interpretan en términos de niveles de energía de los átomos y se explican considerando que un átomo puede existir solamente en ciertos estados estacionarios caracterizados por un valor de energía total y que si el átomo emite radiación electromagnética, como radiación X, pasa de un estado estacionario de nivel superior de energía a otro de nivel inferior emitiendo un fotón de frecuencia determinada. Este fotón es una onda dipolar eléctrica que posee cierta cantidad de momento angular. Según el principio de conservación, el momento angular del átomo antes de la emisión debe ser igual a su momento angular después de la emisión más el momento angular del fotón; esto es, cada estado estacionario de un átomo se caracteriza por un valor determinado de momento angular. (Wichmann, 1986).

En el espectro de la Figura 3, se muestran los niveles de energía como líneas horizontales, las rayas verticales entre los niveles indican posibles transiciones y las puntas de flecha hacia abajo indican que en cada caso se trata de un proceso de emisión de energía. (Wichmann, 1986).

c) Notación de las líneas del espectro de rayos X

La notación Siegbahn y la notación de la International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) son las dos notaciones que se usan principalmente para designar las diferentes líneas de un espectro de rayos X. La notación Siegbahn designa una línea del espectro por el símbolo del elemento seguido del nombre de la capa donde creó la vacancia inicial más una letra griega (α , β , γ , etc.) que indica la intensidad relativa de la línea. Por ejemplo, $\text{FeK}\alpha$ es la línea de Hierro más intensa del espectro debido a que un electrón de la capa K fue expulsado. Asimismo, la notación Siegbahn indica de qué capa del átomo viene el electrón que llena la vacancia. (Brouwer, 2010).

En la notación IUPAC, una línea se designa por el símbolo del elemento y el nombre de la capa donde se produce la vacancia inicial, seguida del nombre de la capa de donde viene el electrón que cubre la vacancia. Por ejemplo, $\text{Cr KL}_{\text{III}}$

es la radiación de Cromo debido a una vacancia producida en la capa K llenada por un electrón de la capa L_{III} . En general, las líneas K son más intensas que las líneas L, que son más intensas que las líneas M, y así sucesivamente. (Brouwer, 2010).

d) Los números cuánticos

De acuerdo con la mecánica cuántica, el átomo está constituido por un núcleo, con carga eléctrica positiva, formado por protones y neutrones. Los protones poseen carga eléctrica positiva y los neutrones no poseen carga. El número de protones o electrones que posee el átomo se denomina el número atómico Z. El núcleo está rodeado de una nube de electrones, de carga negativa, que se encuentra unido al núcleo mediante fuerzas eléctricas. (Aranda, s. f.)

El movimiento del electrón en el campo potencial se puede describir por una función de onda Ψ ; que indica su comportamiento dual: esto es, no se puede determinar su posición en un momento dado, sino indicar cual es la probabilidad de encontrarlo en un elemento infinitesimal de volumen dV ubicado en el punto del espacio de coordenadas (x, y, z) , la cual está definida por la densidad de probabilidad $\Psi^2 dV$. Así, su ubicación más probable en el espacio es la de mayor densidad de probabilidad y es la que determina el tamaño del átomo. (Aranda, s. f.).

Según la mecánica ondulatoria, los electrones se sitúan en niveles discretos de energía, que comienzan a ocuparse por los electrones de menor energía. Estos niveles de energía se obtienen de la ecuación de Schrödinger, la cual representa el comportamiento dual del electrón como onda o como partícula. (Aranda, s. f.). Esta ecuación se puede determinar de la siguiente manera:

La ecuación de una onda estacionaria es:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\Psi \quad (4)$$

Donde: Ψ depende sólo de la posición x y λ es la longitud de onda.

La energía total E del electrón es:
$$E = K + V = \frac{1}{2} m_e v^2 + V \quad (5)$$

Donde: K es la energía cinética y V es la energía potencial.

Según De Broglie, la longitud de onda λ asociada al electrón de momento lineal

$p = m_e v$, es:
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v} \quad (6)$$

Donde h es la constante de Planck.

De (5) y (6): $E - V = \frac{h^2}{2 m_e \lambda^2}$; de donde:
$$\lambda^2 = \frac{h^2}{2 m_e (E - V)} \quad (7)$$

Reemplazando (7) en (4) obtenemos:
$$-\frac{h^2}{8 \pi^2 m_e} \frac{d^2 \Psi}{d x^2} + V \Psi = E \Psi \quad (8)$$

Las soluciones a la ecuación de Schrödinger se obtienen empleando las condiciones de frontera límite, pues para que Ψ^2 tenga sentido, Ψ tiene que ser finita y tener un único valor en cada uno de sus puntos, además de cumplirse que $\int_V \Psi^2 dV = 1$, (Young y Freedman, 2013). Esto exige que la amplitud de onda asociada a una partícula encerrada en un espacio finito sea nula en los extremos. Por ello, en un espacio de una dimensión, cada onda puede caracterizarse por un número entero. La relación postulada por Born entre el número cuántico y el momento angular se deduce teniendo en cuenta el espacio de dimensión circular, (Aranda, s. f.)

Suponiendo que un electrón gira en una órbita circular estacionaria, entonces es necesario que la longitud de la circunferencia contenga un número entero de longitudes de onda; $2 \pi r = n \lambda$, y como la longitud de onda y el momento lineal del electrón están relacionados por la ecuación (6); igualando ambas longitudes se obtiene el valor de la magnitud del momento angular L

postulado por Born:
$$L = m_e v r = \frac{n h}{2 \pi} \quad (9)$$

Aplicando esta condición de frontera obtenemos las energías permitidas de los

orbitales atómicos:

$$E_n = -\frac{m_e e^4 Z^2}{8h^2 \epsilon_0^2 n^2} \quad (10)$$

donde: n es el número cuántico principal, y determina los estados cuánticos discretos permitidos. (Aranda, s. f.). A cada n le corresponde una capa y en ella todos los electrones poseen el mismo nivel de energía. Como se indicó, las capas se denominan $K(n=1)$, $L(n=2)$, $M(n=3)$, $N(n=4)$, , con números crecientes de n . (Brouwer, 2010).

En cada capa existen subcapas que reflejan pequeñas diferencias de energía, lo cual se debe a otros tres números cuánticos: (1) el número cuántico de momento angular orbital ℓ , donde $\ell = 0, 1, \dots, (n-1)$; (2) el número cuántico magnético m_ℓ , donde $m_\ell = -\ell$ a $+\ell$ y el número cuántico de spin s , donde $s = \pm 1/2$. Las subcapas u orbitales se designan como: $s(\ell=0)$, $p(\ell=1)$, $d(\ell=2)$, $f(\ell=3)$. Cada uno de estos estados cuánticos puede ser ocupado por dos electrones de espines opuestos, según el Principio de exclusión de Pauli. (Aranda, s. f.) y (Phillips, 2003).

Si consideramos que el electrón además de ejecutar un movimiento de traslación alrededor del núcleo realiza un movimiento de rotación alrededor de su propio eje, se pueden definir dos magnitudes físicas asociados a cada tipo de movimiento: el momento angular orbital L y el momento angular de spin S , respectivamente.

Usando el modelo de partículas independientes para el electrón con funciones de onda Ψ en la que cada estado se caracteriza por sus números cuánticos, se puede encontrar que $L^2 = \ell(\ell+1)\hbar$ y $S^2 = s(s+1)\hbar$, donde $\hbar = h/2\pi$, es la constante de Planck reducida. Luego, el momento angular total J para la configuración está dada por $J=L+S$ y los posibles valores del número

cuántico de momento angular total j , serán: $j = \ell + s, \ell + s - 1, \dots, |\ell - s|$.

El momento angular total J de un átomo es una propiedad muy importante porque determina sus propiedades magnéticas y las probabilidades de transición en los procesos radiativos. (Alonso & Finn, 1971).

Sin considerar el momento angular del núcleo, el momento angular total J del átomo es de la forma: $J^2 = j(j+1)\hbar^2$; donde los valores de j son dados por la regla, $2j = 0, 1, 2, \dots$; tal que $2j$ es un número entero positivo par o impar, si el átomo tiene un número par o impar de electrones, respectivamente. Se prueba que en una transición dipolar eléctrica los cambios permitidos en el momento angular total obedecen la regla: $\Delta j = -1, 0, +1$. (Wichmann, 1986).

En resumen, las letras minúsculas se usan en física atómica para denotar el momento angular de un solo electrón: ℓ para el momento angular orbital, s para el momento angular de espín y j para el momento angular total. Las letras mayúsculas se usan para denotar el momento angular de dos o más electrones: L para el momento angular orbital, S para el momento angular de espín y J para el momento angular total. La notación espectroscópica usa las letras s, p, d, f, \dots para denotar el momento angular orbital de un solo electrón con $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$ y las letras mayúsculas S, P, D, F, \dots , se usan para denotar el momento angular orbital de dos o más electrones con $L = 0, 1, 2, 3, \dots$ (Phillips, 2003). Esto se puede observar en los espectros de las Figura 3, Figura 4, Figura 5 y Figura 6.

e) Las reglas de selección

Como se ha descrito, los niveles de energía de un sistema mecánico-cuántico, como el formado por un núcleo y un conjunto de electrones, se designan por un conjunto de números cuánticos, los cuales representan los parámetros físicos que describen mecánico-cuánticamente el sistema. (Wichmann, 1986).



La mecánica cuántica enseña que no todas las transiciones son posibles. (Martínez, 2009), por ejemplo en la Figura 3, una transición desde la capa L_I a la capa K . Las transiciones permitidas que los electrones pueden experimentar del estado inicial al estado final se especifican por tres reglas de selección de la mecánica cuántica: (1) El cambio en el número cuántico principal n debe ser ≥ 1 ; (2) El cambio en el número cuántico de momento angular orbital ℓ sólo puede ser ± 1 ; (3) El cambio en el número cuántico de momento angular total j sólo puede ser ± 1 o 0 . La Figura 3 muestra una visión general de las líneas más importantes con sus posibles transiciones en la notación de Siegbahn. (Brouwer, 2010).

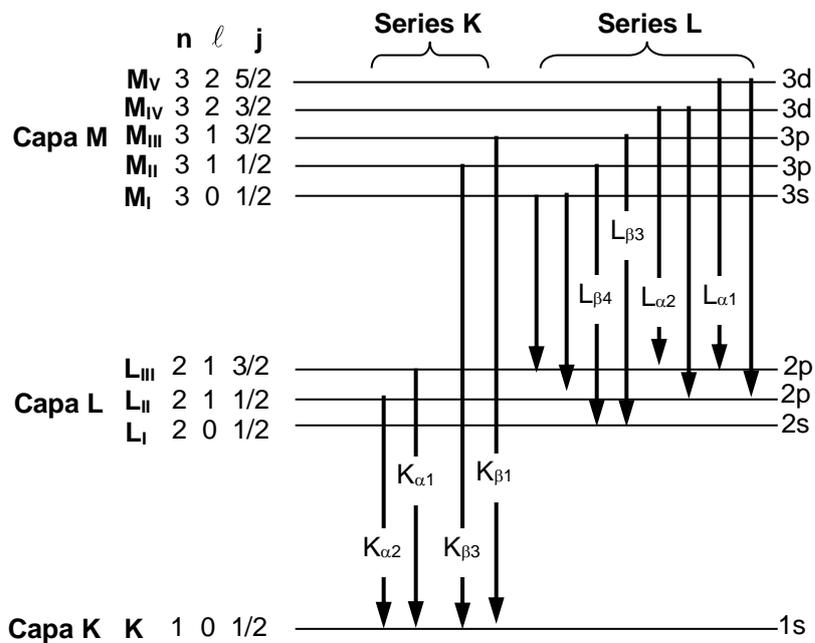


Figura 3. Líneas más importantes del espectro debido a las transiciones electrónicas. Adaptado de La Mecánica Cuántica: La espectroscopía de rayos-X por A. Martínez, 2009, recuperado de: <http://la-mecanica-cuantica.blogspot.com/2009/08/las-reglas-de-seleccion.html>.

La Figura 4 muestra el diagrama de niveles de energía de un átomo de Cobre, con el número cuántico principal n especificando el nivel energético del orbital. Presenta los n valores posibles del momento angular orbital ℓ , que varían

desde $\ell = 0$ hasta $\ell = n - 1$ y los valores posibles del momento angular total j , que se determinan de: $j = \ell \pm \frac{1}{2}$. (PHYWE, 2016).

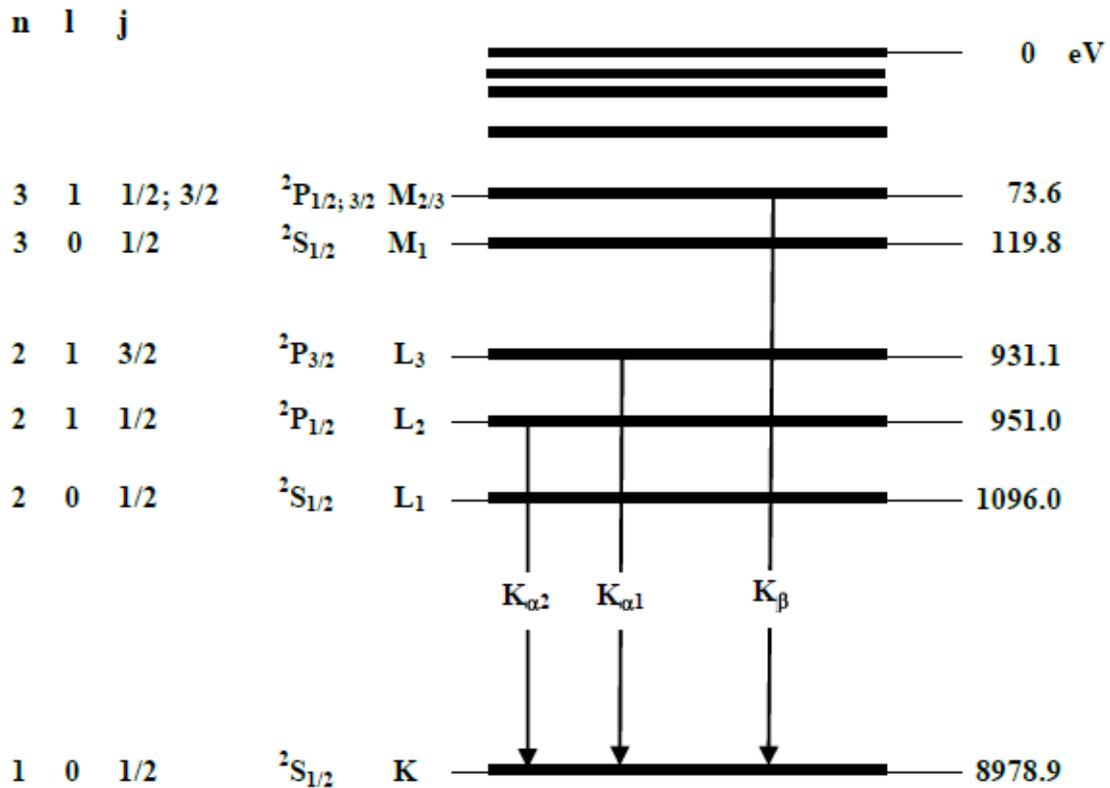


Figura 4. Diagrama de niveles de energía del Cobre mostrando las posibles transiciones electrónicas. Adaptado de PHYWE Series of Publications, TESS extert, Laboratory Experiments, 2016, p. 4 de TEP 5.4.01-01. Copyright 2016 por PHYWE Systeme GmbH & Co.

Luego, las energías de las líneas características del Cobre son:

$$E_{K\alpha^*} = E_K - \frac{1}{2}(E_{L2} + E_{L3}) = 8978,9 - \frac{1}{2}(951,0 + 931,1) = 8,038 \text{ keV}$$

$$E_{K\beta} = E_K - E_{M2/3} = 8978,9 - 73,6 = 8,905 \text{ keV}$$

Donde $E_{K\alpha^*}$ es el valor medio de las energías correspondientes a las líneas $K\alpha_1$ y $K\alpha_2$. (PHYWE, 2016).

La Figura 5 muestra el diagrama de niveles de energía de un átomo de Molibdeno, con el número cuántico principal n especificando el nivel

energético del orbital. Presenta los n valores posibles del momento angular orbital ℓ , que varían desde $\ell = 0$ hasta $\ell = n - 1$ y los valores posibles del momento angular total j , que se determinan de: $j = \ell \pm \frac{1}{2}$. (PHYWE, 2016).

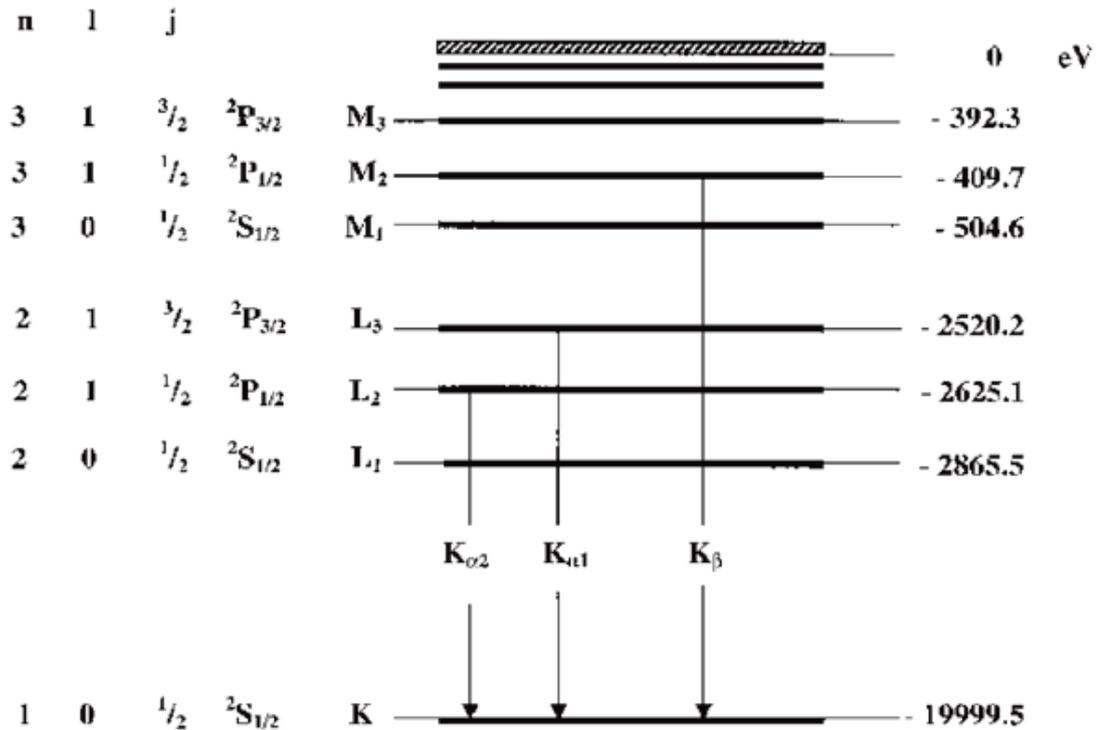


Figura 5. Diagrama de niveles de energía del Molibdeno mostrando las posibles transiciones electrónicas. Adaptado de PHYWE Series of Publications, TESS extert, Laboratory Experiments, 2016, p. 4 de TEP 5.4.02-01. Copyright 2016 por PHYWE Systeme GmbH & Co.

Luego, las energías de las líneas características del Molibdeno son:

$$E_{K\alpha^*} = E_K - \frac{1}{2}(E_{L2} + E_{L3}) = 19999,5 - \frac{1}{2}(2625,1 + 2520,2) = 17,427 \text{ keV}$$

$$E_{K\beta} = E_K - E_{M2} = 19999,5 - 409,7 = 19,590 \text{ keV}$$

Donde $E_{K\alpha^*}$ es el valor medio de las energías correspondientes a las líneas $K\alpha_1$ y $K\alpha_2$. (PHYWE, 2016).

La Figura 6 muestra el diagrama de niveles de energía de un átomo de Hierro, con el número cuántico principal n especificando el nivel energético del orbital.

Presenta los n valores posibles del momento angular orbital ℓ , que varían desde $\ell = 0$ hasta $\ell = n - 1$ y los valores posibles del momento angular total

j , que se determinan de: $j = \ell \pm \frac{1}{2}$. (PHYWE, 2016).

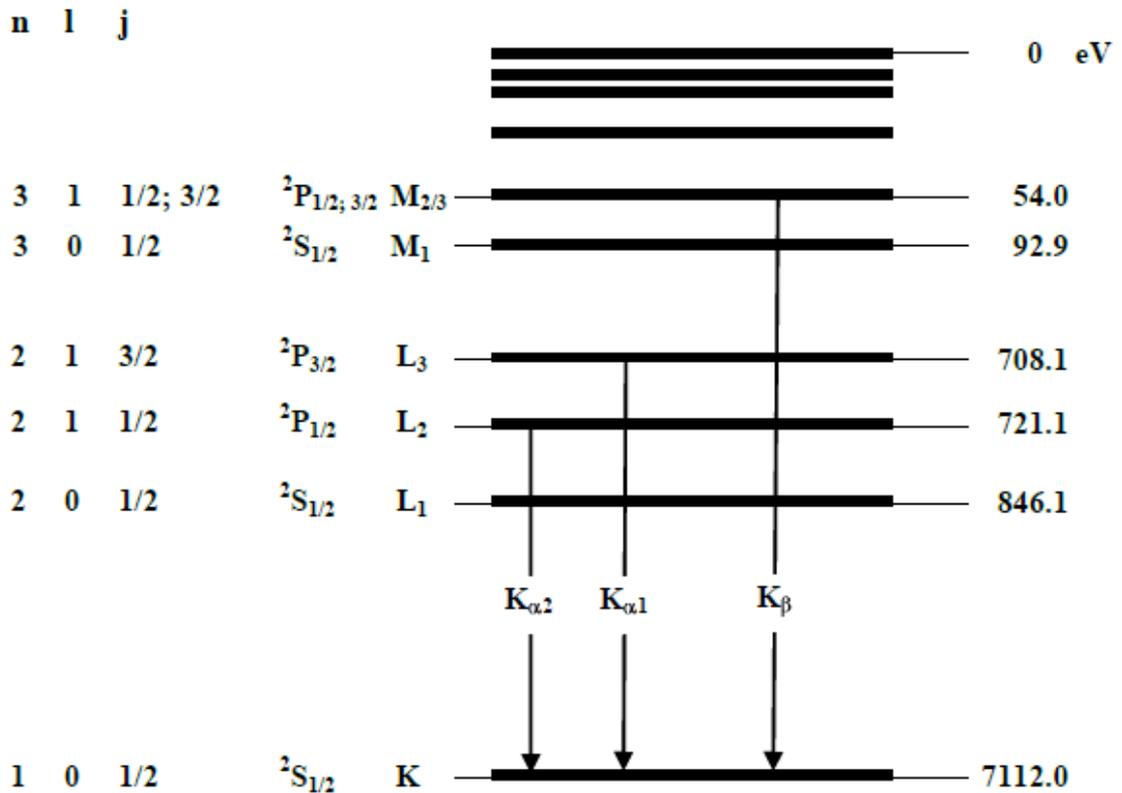


Figura 6. Diagrama de niveles de energía del Hierro mostrando las posibles transiciones electrónicas. Adaptado de PHYWE Series of Publications, TESS extert, Laboratory Experiments, 2016, p. 4 de TEP 5.4.03-01. Copyright 2016 por PHYWE Systeme GmbH & Co.

Luego, las energías de las líneas características del Hierro son:

$$E_{K\alpha^*} = E_K - \frac{1}{2}(E_{L2} + E_{L3}) = 7112,0 - \frac{1}{2}(721,1 + 708,1) = 6,397 \text{ keV}$$

$$E_{K\beta} = E_K - E_{M2/3} = 7112,0 - 54,0 = 7,0580 \text{ keV}$$

Donde $E_{K\alpha^*}$ es el valor medio de las energías correspondientes a las líneas

$K\alpha_1$ y $K\alpha_2$. (PHYWE, 2016).

En las Figura 4, Figura 5 y Figura 6, se pueden observar que las transiciones $M_1 \rightarrow K$ y $L_1 \rightarrow K$ no tienen lugar debido a las reglas de selección de la mecánica cuántica que establecen que: $\Delta n \geq 1$; $\Delta \ell = \pm 1$ y $\Delta j = 0$ ó ± 1 . (PHYWE, 2016)

f) Determinación de las energías de transición

El análisis de los rayos X del espectro es posible mediante el uso de un monocristal. Cuando rayos X de longitud λ inciden sobre un monocristal bajo un ángulo θ respecto al plano dispersor, la interferencia constructiva después de la dispersión solamente ocurre cuando la diferencia de recorrido de las ondas reflejadas parciales desde los planos de la red es un múltiplo entero de la longitud de onda. Según la ley de Bragg:

$$n \lambda = 2 d \sin \theta \quad (11)$$

Donde d es la distancia interplanar y n es el orden de difracción. (PHYWE, 2016)

Si la distancia interplanar d se conoce, entonces la energía de los rayos X puede calcularse a partir del ángulo θ , el cual se obtiene del espectro obtenido

experimentalmente, usando la relación:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (12)$$

Reemplazando el valor de λ de (11) en (12), se obtiene:

$$E = \frac{nhc}{2d \sin \theta} \quad (13)$$

2.2.2. Conceptual

La solución de la ecuación de Schrödinger es la función de onda Ψ . Para el caso de una función potencial V , que dependa sólo de la posición, esta ecuación se puede separar en dos ecuaciones: una independiente del tiempo y otra dependiente del tiempo, las cuales pueden ser resueltas independientemente.

La solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el modelo del átomo de Bohr permite determinar las energías E de los niveles energéticos del electrón, que dependen del número cuántico principal n , y los números cuánticos magnético m_ℓ y de momento angular orbital ℓ .

Las reglas de selección de la mecánica cuántica establece las condiciones que deben cumplir los números cuánticos para que las transiciones de los electrones pueden ser permitidas: $\Delta n \geq 1$; $\Delta \ell = \pm 1$ y $\Delta j = 0$ ó ± 1 .

En la espectroscopía por emisión de rayos X de los elementos, las transiciones electrónicas desde algunas subcapas de las capas electrónicas M y L a la capa K son una evidencia de que se cumplen las tres reglas de selección de la mecánica cuántica; por lo tanto, otras transiciones electrónicas que puedan ocurrir a otras capas del átomo también deberían serlo.

2.3. Definición de términos básicos

Espectroscopía de rayos X

Técnica basada en los fenómenos de absorción, emisión, fluorescencia, difracción y dispersión de radiación electromagnética en el rango de 0,1 a 25 Amstrongs.

Espectro de emisión

Espectro de frecuencias de radiación electromagnética emitida por un átomo o una molécula que realiza una transición de un estado de alta energía a un estado de menor energía. Es característico de cada elemento químico.

Tasa de conteo

Número de fotones, convertidos a impulsos eléctricos, registrados por un detector de radiación en un determinado intervalo de tiempo. En un espectro de rayos representa la intensidad registrada en una determinada posición angular del barrido. Su registro constituye un proceso aleatorio.

Monocristal

Cuerpo cristalino de gran tamaño formado por un único cristal que ha sido fabricado siguiendo orientaciones, dimensiones y acabados de superficie específicos.

Transiciones energéticas K

Cambios en los estados cuánticos de los electrones cuando llenan la vacancia creada en la capa K del átomo debido al cambio de uno de los números cuánticos que definen su estado.

Reglas de selección

Conjunto de valores que asumen los números cuánticos que limitan el número de transiciones energéticas posibles. Establecen que los números cuánticos principal n , del momento angular orbital ℓ y del momento angular total j cumplan que: $\Delta n \geq 1$; $\Delta \ell = \pm 1$ y $\Delta j = 0$ ó ± 1 .

CAPÍTULO III: HIPÓTESIS Y VARIABLES

3.1. Hipótesis

3.1.1 Hipótesis General

Las reglas de selección de la mecánica cuántica evidencian las transiciones energéticas K en los espectros de emisión de rayos X.

3.1.2 Hipótesis Específicas

1. Los espectros de emisión de rayos X permiten determinar las energías de las líneas características.
2. El número de órdenes de difracción en los espectros de emisión de rayos X depende de la distancia interplanar del monocristal analizador usado.

3.2. Definición conceptual de variables

Las variables identificadas en la hipótesis general, se pueden definir conceptualmente de la forma que se indica a continuación:

Variable Dependiente:

Transiciones energéticas K en los espectros de emisión de rayos X: Cambios en los estados cuánticos de los electrones cuando llenan la vacancia creada en la capa K del átomo debido al cambio de uno de los números cuánticos que definen su estado.

Variable Independiente:

Reglas de selección de la mecánica cuántica: Conjunto de valores que asumen los números cuánticos que limitan el número de transiciones energéticas posibles.

3.3. Operacionalización de variables

Variable	Dimensiones	Indicadores	Índices	Método	Técnica
Dependiente Transiciones energéticas K en los espectros de emisión de rayos X	Espectroscopia de rayos X	Espectros de rayos X	Energía Órdenes de difracción	Experimental	Medida
Independiente Reglas de selección	Mecánica cuántica	Números cuánticos	$\Delta n \geq 1$ $\Delta \ell = \pm 1$ $\Delta j = 0 \text{ ó } \pm 1$	Analítico	Observación

CAPÍTULO IV: DISEÑO METODOLÓGICO

4.1. Tipo y diseño de investigación

De acuerdo al propósito de la investigación, el presente proyecto estuvo enmarcado en el tipo de investigación aplicada, cuantitativa y transversal. A esta investigación le correspondió el código UNESCO 220212 y el código del Plan Nacional CTI 04050201.

El diseño de la investigación desarrollado fue experimental y consistió en obtener el comportamiento de la tasa de conteo detectados por un tubo contador Geiger-Müller respecto al ángulo de incidencia de un haz de rayos X sobre un monocristal analizador para obtener los espectros de emisión K de rayos X de diversos materiales del blanco del ánodo del tubo de rayos X con la finalidad de observar sus líneas características y, a partir de ellas, determinar sus valores de energía.

4.2. Método de investigación

Tomando en consideración lo descrito en el manual de experimentos del equipo, (PHYWE, 2016) y realizando algunas modificaciones convenientes, se procedió a calibrar el goniómetro del equipo XR 4.0 PHYWE y a obtener los espectros de emisión de rayos X como se describe a continuación.

4.2.1. Calibración del Goniómetro

1. Se instaló el tubo de rayos X con ánodo de Cobre y se fijó el diafragma tubular de 2 mm de diámetro en la salida del tubo de rayos X.
2. Se montó el monocristal de LiF (100) en el soporte del goniómetro. Se cerró y aseguró la puerta.

3. Se encendió el equipo de rayos X y se constató que el material del blanco del ánodo - que en este caso era Cu - sea automáticamente identificado, así como, los valores de operación de voltaje y corriente, como se muestra en la parte superior del display del equipo de la Figura 7.



Figura 7. Material del blanco del ánodo mostrado en el display del equipo. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora

4. Se calibró automáticamente el goniómetro del equipo de rayos X. Para este fin, tomando en cuenta los controles que se han numerado del panel de control que se muestra en la Figura 8, se presionó el botón ⑥ para desplegar la función *Menú* y con el botón ⑨ se buscó la opción *Goniómetro*, la cual se seleccionó presionando el botón ⑧.



Figura 8. Botones del panel de control usados en el proceso de autocalibración del goniómetro. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

5. Usando el botón ⑨ del panel de control se buscó la función *Autocalibración* del menú *Goniómetro*, como se muestra la Figura 9, y se le seleccionó presionando el botón ⑧. Luego, se presionó el botón ⑦ para iniciar el proceso de calibración.



Figura 9. Display del equipo mostrando la selección de la función *Autocalibración*. Captura fotográfica de imagen desde la pantalla del equipo.

6. El aparato determinó automáticamente las posiciones óptimas del cristal y el goniómetro y luego, las posiciones de los picos. El display mostró las correspondientes curvas de calibración y se configuró la posición del cero del goniómetro cuando apareció en el display *Calibración exitosa*, como muestra la Figura 10.

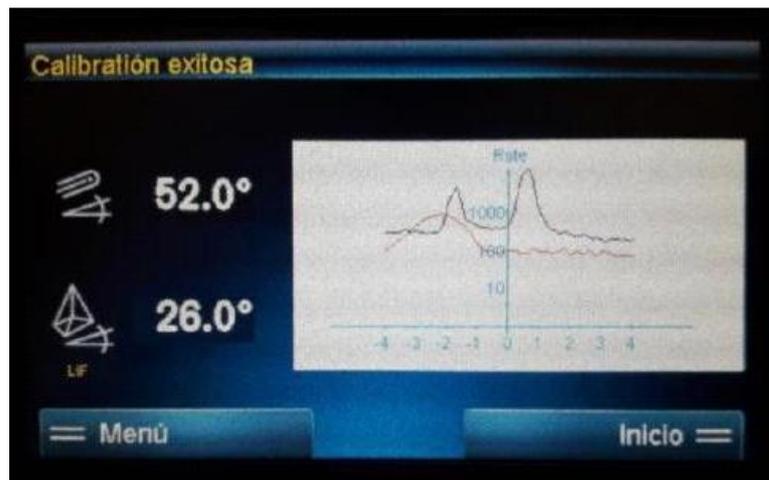


Figura 10. Display mostrando las Curvas de calibración al final del proceso de Autocalibración con la leyenda *Calibración exitosa*. Captura fotográfica de imagen desde la pantalla del equipo.

4.2.2. Obtención de los Espectros de emisión de rayos X

Para obtener los espectros de emisión de rayos X, realizamos el siguiente procedimiento:

1. Se encendió la computadora y se abrió el programa *measure 4.6.15.3*. El programa mostró la ventana del *Navegador* de la Figura 11, en la que se observó una imagen interactiva del equipo de rayos X en la que se pudieron realizar los ajustes convenientes para el trabajo experimental.



Figura 11. Ventana del Navegador del programa *Measure 4.6.15.3*. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

2. Cuando se hizo click en el marco rojo de la izquierda apareció la ventana *Ajustes de los tubos*, donde se pudo ajustar el valor del voltaje de operación del tubo de rayos X seleccionado a 35 kV y el valor de la corriente que se establece por el flujo de electrones del cátodo al ánodo del tubo de rayos X a 1 mA, tal como muestra la Figura 12 para el caso del tubo de Cobre.

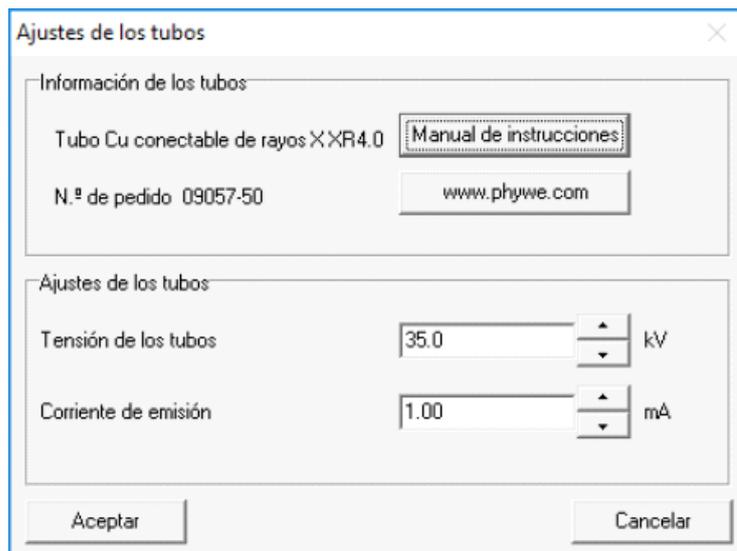


Figura 12. Ventana *Ajustes de los tubos* para fijar los valores del voltaje y la corriente de operación del tubo de rayos X de Cobre. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

3. Cuando se hizo click en el marco rojo de la derecha – ver Figura 11 - apareció la ventana *Ajustes del goniómetro*, donde se pudieron ajustar los valores del ángulo de inicio y el ángulo de parada del barrido, el modo acoplado de rotación del cristal, el incremento del ángulo a 0,1 y el tiempo de integración a 2 segundos, tal como muestra la Figura 13.

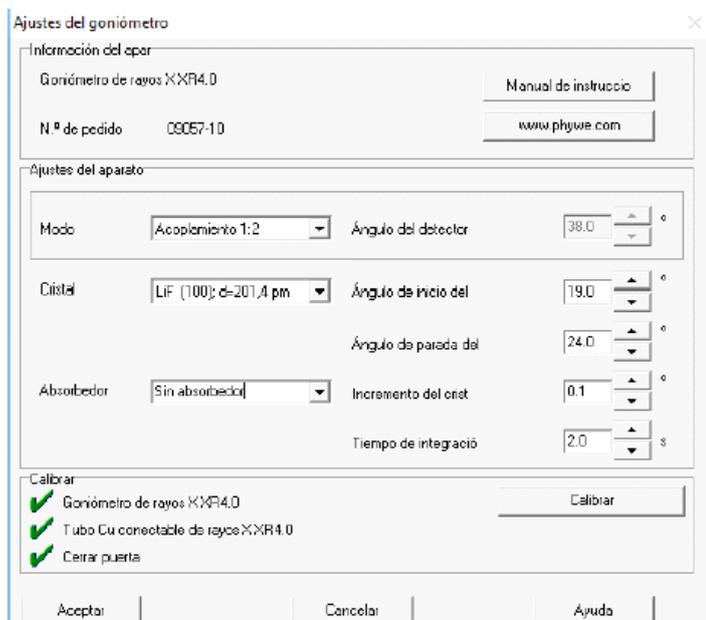


Figura 13. Ventana interactiva *Ajustes del goniómetro* para definir los parámetros experimentales del goniómetro. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

4. En la ventana *Ajustes del goniómetro*, que muestra la Figura 13, se introdujeron los siguientes valores, para el caso del Cobre y el monocristal de LiF (100):

Modo de rotación: acoplado 2:1 Cristal: LiF (100)
Ángulo de inicio: 4° Ángulo de parada: 55°
Absorbedor: sin absorbedor Incremento del cristal: 0.1
Tiempo de integración: 3 s Filtro: sin filtro

5. Se seleccionó *Aceptar* y se hizo click en el botón rojo *Medida* de la barra de accesos directos del programa measure 4.6.15.3 para *iniciar medida*. Cuando terminó el registro, apareció la ventana interactiva *Procesamiento de datos adicional*, que se muestra en la Figura 14, en donde se seleccionó *Transferir todas las mediciones a measure* y luego se hizo click en el botón *OK*. A continuación, se guardó el archivo en una carpeta.

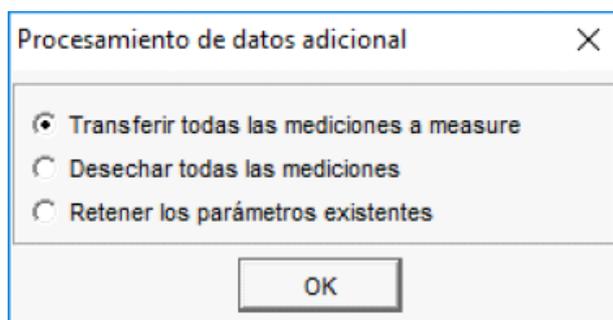


Figura 14. Ventana *Procesamiento de datos adicional* para definir qué hacer con los datos experimentales obtenidos. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

6. Se repitió el procedimiento para otros tubos de rayos X, otros cristales analizadores y otros rangos de barrido del goniómetro que se pudieron determinar previamente haciendo uso de la ecuación (12). Las Figura 15, Figura 16 y Figura 17 muestran los espectros obtenidos para el Cobre, Molibdeno y Fierro, usando los monocristales analizadores LiF (100), KBr (100), NaCl (100), NaCl (110) y NaCl (111).

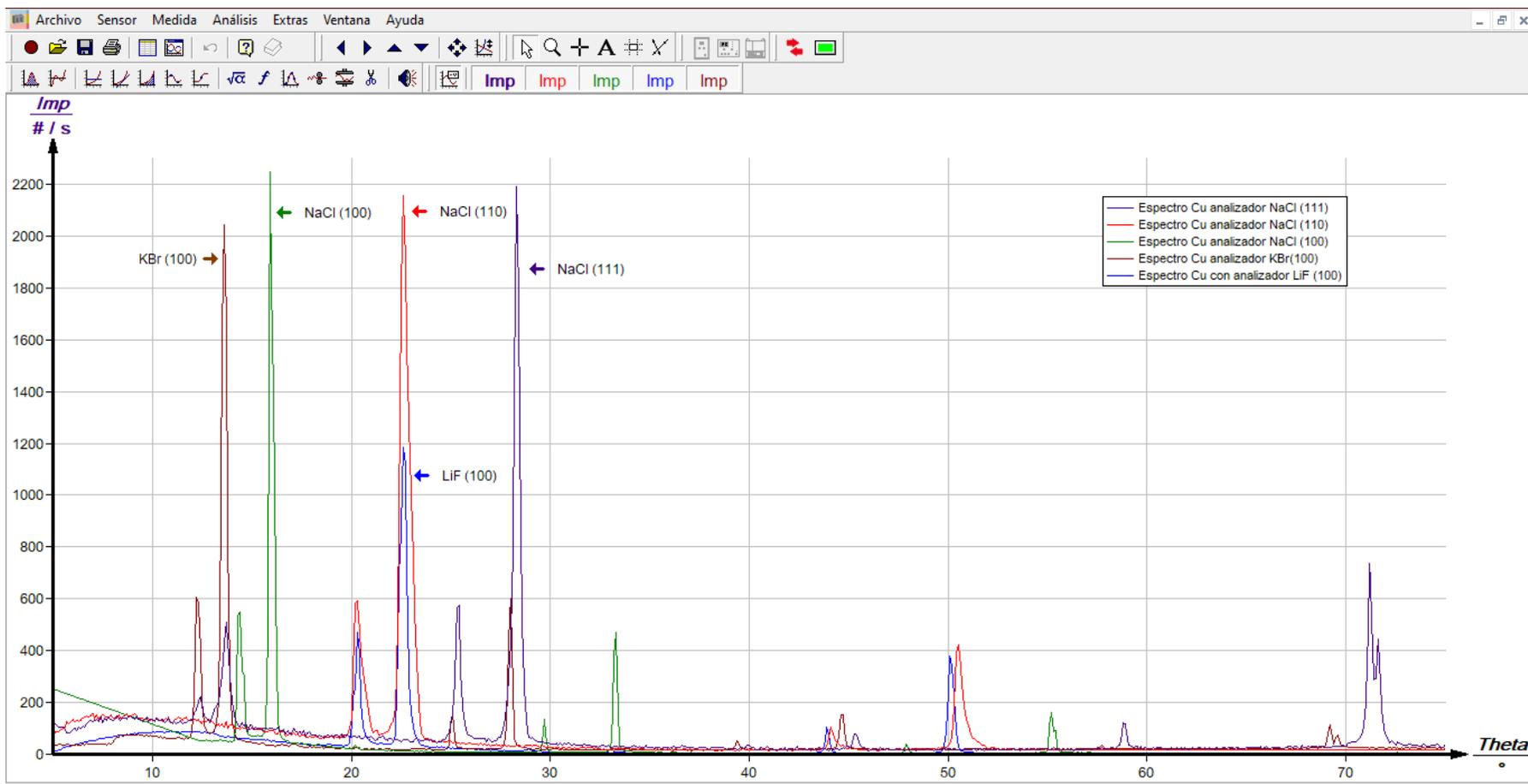


Figura 15. Espectros de emisión del Cobre obtenidos experimentalmente usando los monocristal de LiF (100), KBr (100), NaCl (100), NaCl (110) y NaCl (111). Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

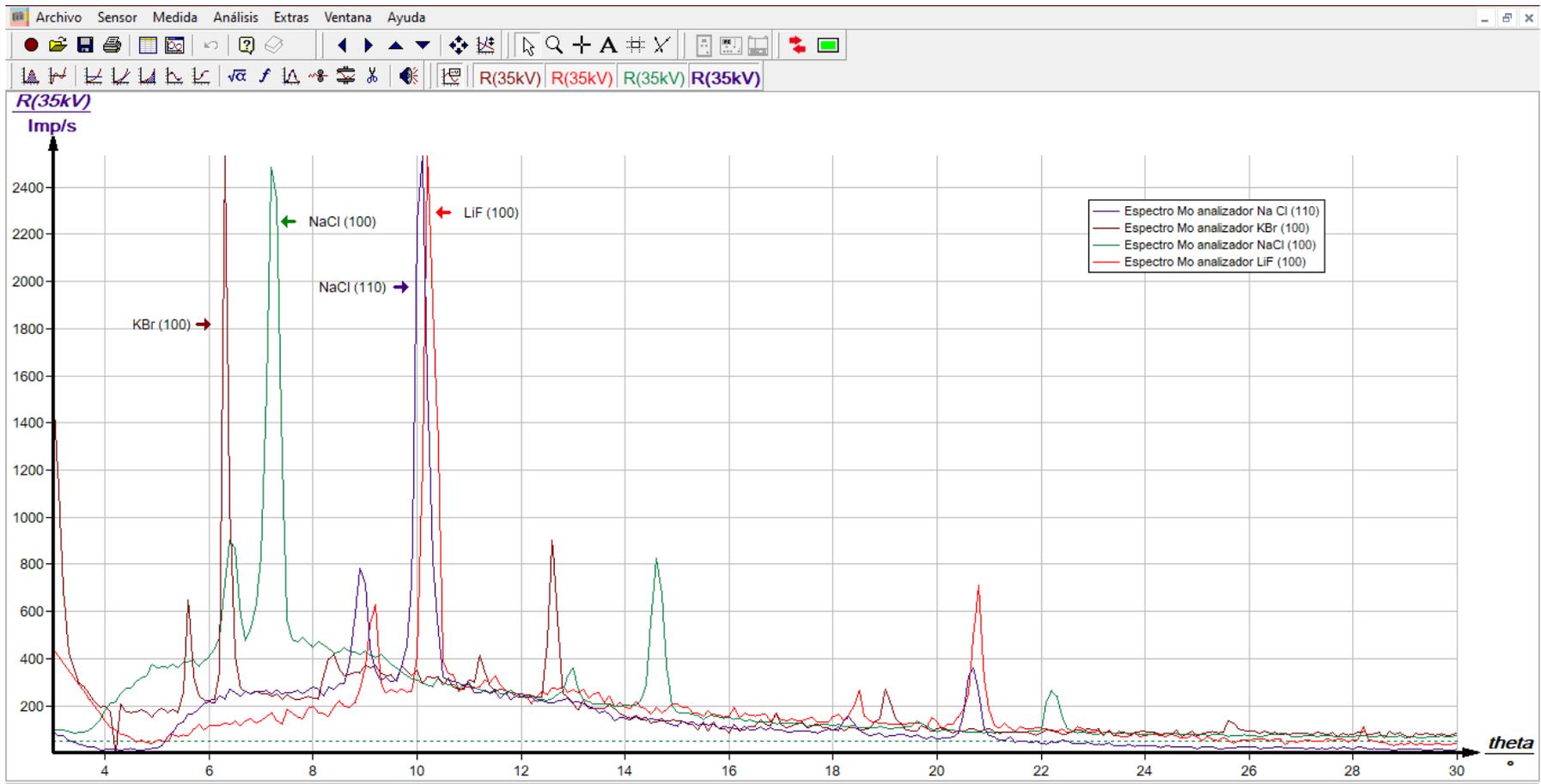


Figura 16. Espectros de emisión del Molibdeno obtenidos experimentalmente usando los monocristal de LiF (100), KBr (100), NaCl (100) y NaCl (110). Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

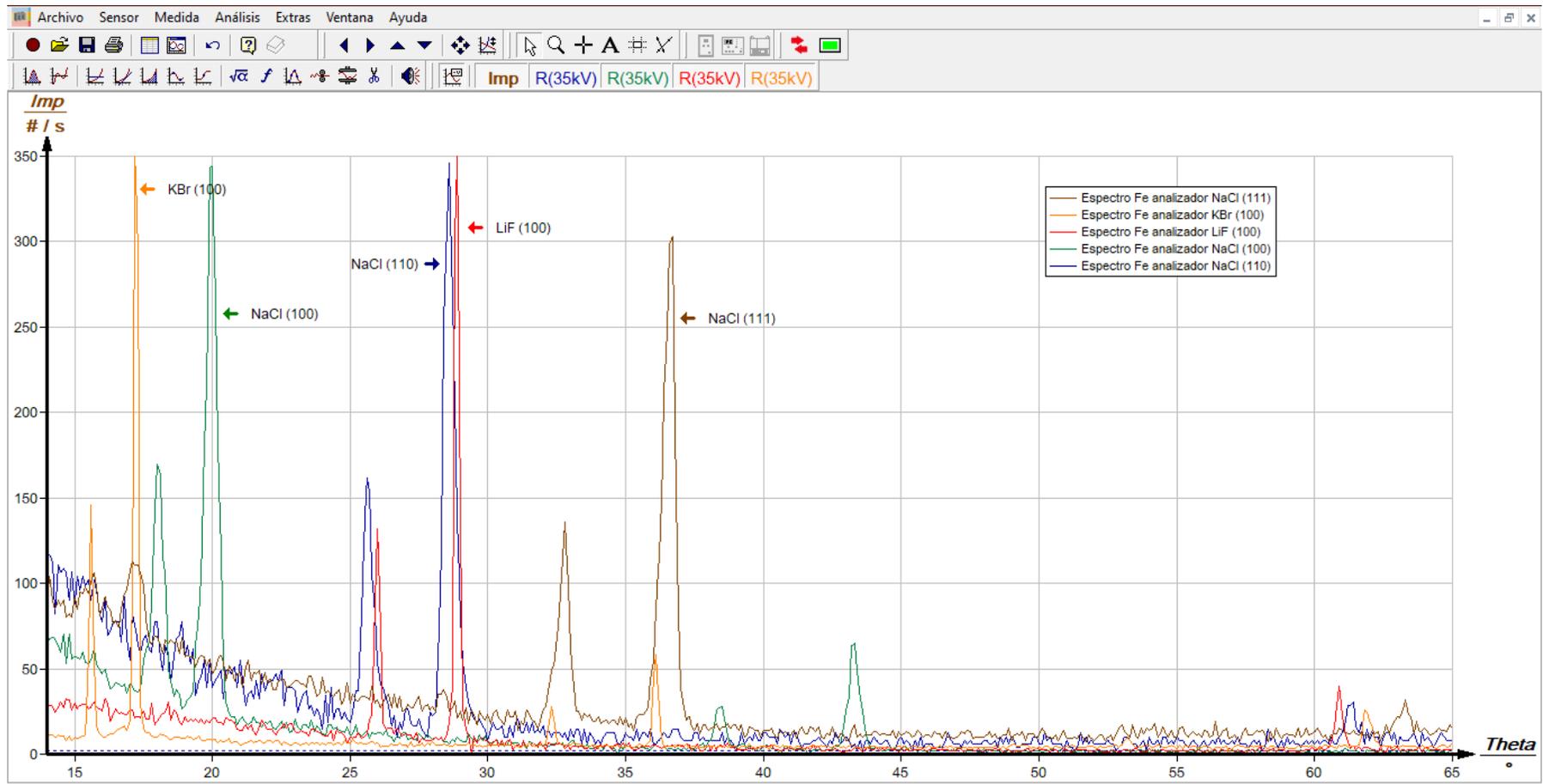


Figura 17. Espectros de emisión del Hierro obtenidos experimentalmente usando los monocristal de LiF (100), KBr (100), NaCl (100), NaCl (110) y NaCl (111). Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

4.3. Población y muestra

Dada la naturaleza de la investigación no correspondió determinar población y muestra porque no se realizó un tratamiento estadístico de datos.

4.4. Lugar de estudio y período desarrollado

El proyecto se desarrolló en el Laboratorio de Difractometría de rayos X de la Facultad de Ciencias Naturales y Matemática de la Universidad Nacional del Callo y fue ejecutado en un período de 12 (doce) meses, comprendidos del 01.09.2019 al 31.08.2020.

4.5. Técnicas e instrumentos para la recolección de la información

4.5.1 Técnica usada para la recolección de la Información

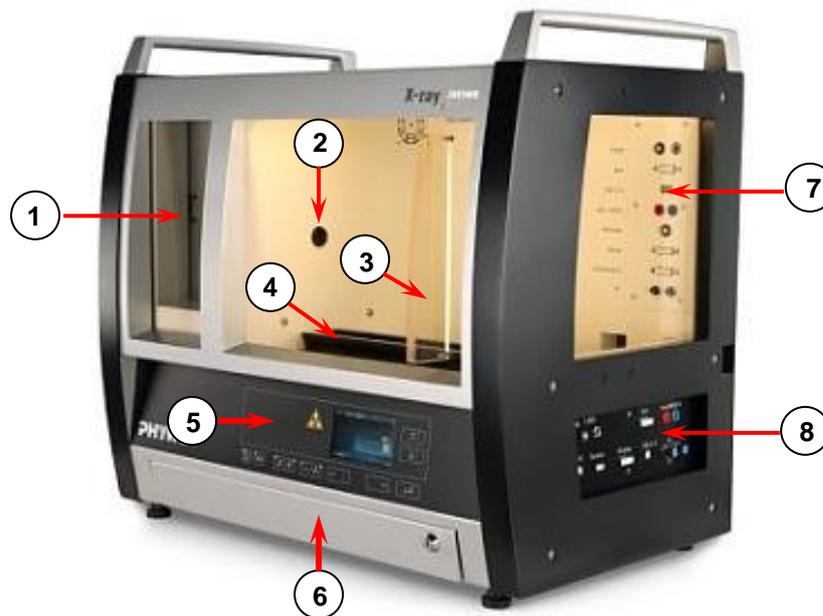
La técnica usada en este trabajo de investigación fue la *espectroscopia de rayos X*, que consistió en hacer incidir radiación blanca, proveniente de un tubo de rayos X, sobre un monocristal analizador, el cual fue rotado en un determinado rango angular con la finalidad de obtener el espectro característico de emisión de los rayos X, cuyos valores de longitudes de onda correspondientes a las líneas $K\alpha$ y $K\beta$ dependían del elemento químico que constituía el blanco del ánodo del tubo de rayos X. La medición de los ángulos de Bragg de estas líneas directamente del espectro obtenido, la distancia interplanar del monocristal usado y el orden de la difracción, permitió determinar las energías de las transiciones electrónicas producidas por los rayos X que les correspondían a cada una de las líneas características del espectro.

4.5.2 Instrumentos usados para la recolección de la Información

El instrumento usado para la recolección de la información fue un equipo XR 4.0 PHYWE, cuya fuente de energía la proporcionaron tres módulos intercambiables de tubos de rayos X con ánodos que poseían blancos de

diferentes elementos tales como, Cobre, Molibdeno y Fierro, que se insertaron sucesivamente en la unidad durante el desarrollo de la parte experimental.

La Figura 18 muestra los elementos funcionales y de control del equipo XR 4.0 PHYWE. La unidad poseía una fuente de alto voltaje que permitía operar los tubos de rayos X de Cobre, Molibdeno y Fierro, y a ella se conectó el goniómetro donde se montaron los monocristales analizadores LiF (100), KBr (100), NaCl (100), NaCl (110) y NaCl (111).



- | | |
|--------------------------------------|--------------------------------|
| ① Compartimiento del Tubo de rayos X | ⑤ Panel de control |
| ② Abertura de salida de los rayos X | ⑥ Cajón de accesorios |
| ③ Puerta corrediza | ⑦ Panel interior de conexiones |
| ④ Banco óptico | ⑧ Panel exterior de conexiones |

Figura 18. Equipo XR 4.0 PHYWE y sus elementos funcionales. Adaptado de PHYWE Series of Publications, TESS extert, Laboratory Experiments, 2016, Copyrigh 2016 por PHYWE Systeme GmbH & Co.

La Figura 19, muestra los elementos funcionales del panel de control del equipo XR 4.0 PHYWE que permiten, entre otras funciones, auto-calibrar el goniómetro y modificar los valores de operación de voltaje y corriente del tubo de rayos X en el caso de la operación manual del equipo.



- | | |
|---------------------------------------|-----------------------------------|
| ① Indicador de radiación | ⑥ Selección de función de menú |
| ② Encendido/apagado de iluminación | ⑦ Selección de función de menú |
| ③ Encendido/apagado de audio impulsos | ⑧ Confirmación opción selección |
| ④ Bloqueo/desbloqueo de puerta | ⑨ Cursor de desplazamiento abajo |
| ⑤ Conectar/desconectar radiación | ⑩ Cursor de desplazamiento arriba |

Figura 19. Panel de control del equipo XR 4.0 PHYWE. Adaptado de PHYWE Series of Publications, TESS extert, Laboratory Experiments, 2016, Copyright 2016 por PHYWE Systeme GmbH & Co.

Los tubos de rayos X son los dispositivos que producían la radiación X de diferentes longitudes de onda y energías, dependiendo del material del blanco del ánodo. Consistían de dos electrodos encerrados en una válvula de vidrio al vacío. El electrodo negativo o cátodo poseía un filamento de Tungsteno que, al ser calentado por una corriente, emitía electrones que era acelerados hacia el electrodo positivo o ánodo cuando se establecía una gran diferencia de potencial entre los dos electrodos. Los electrones provenientes del cátodo incidían sobre el ánodo, en una zona denominada el blanco, donde eran desacelerados dando lugar a la producción de los rayos X, ver Figura 20.

Los tubos de rayos X que se han usado en este proyecto venían montados de fábrica en una carcasa de acero formando un módulo y para evitar daños por sobrecalentamiento, cada tubo estaba encerrado en un cilindro de vidrio Duran que tenía tuberías laterales por donde ingresaba aire, proveniente de un ventilador, para su enfriamiento.

Cada módulo estaba equipado con un enchufe para su conexión al alto voltaje y otro enchufe para hacer circular corriente con la finalidad de calentar el filamento del cátodo del tubo. Los parámetros de operación del tubo se establecieron a través de los enchufes correspondientes del dispositivo. Dos pasadores de metal ubicados a los lados del tubo, indicados como (1) en la Figura 20, liberaban un micro-interruptor de seguridad que sólo se desbloqueaba para el funcionamiento del tubo de rayos X cuando la puerta corrediza se encontraba correctamente cerrada.

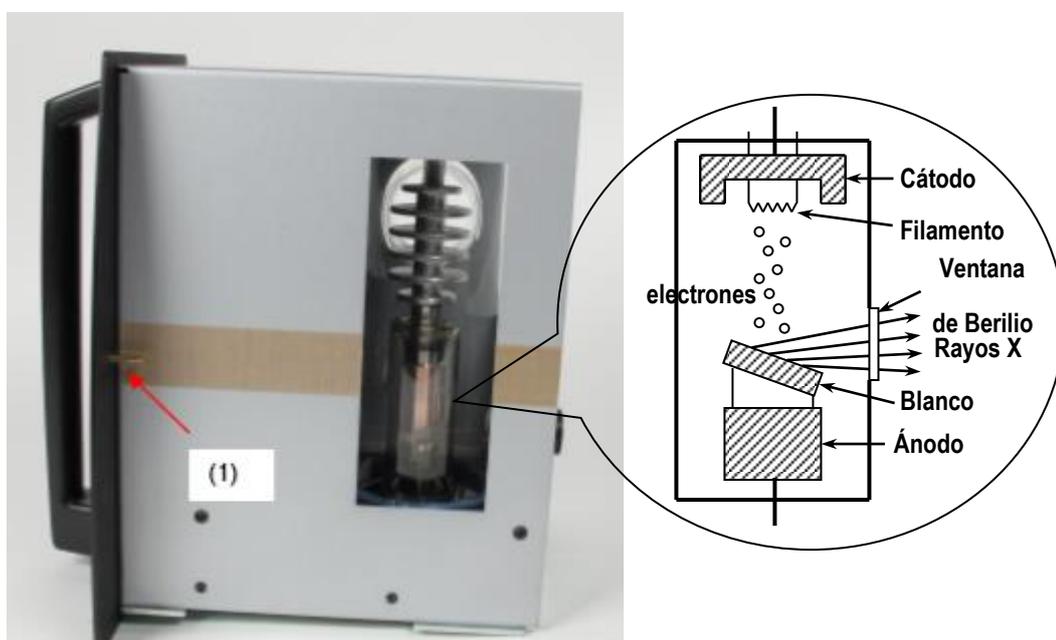


Figura 20. El tubo de rayos X y sus elementos funcionales. Adaptado de PHYWE Series of Publications, TESS extert, Laboratory Experiments, 2016, Copyrigh 2016 por PHYWE Systeme GmbH & Co.

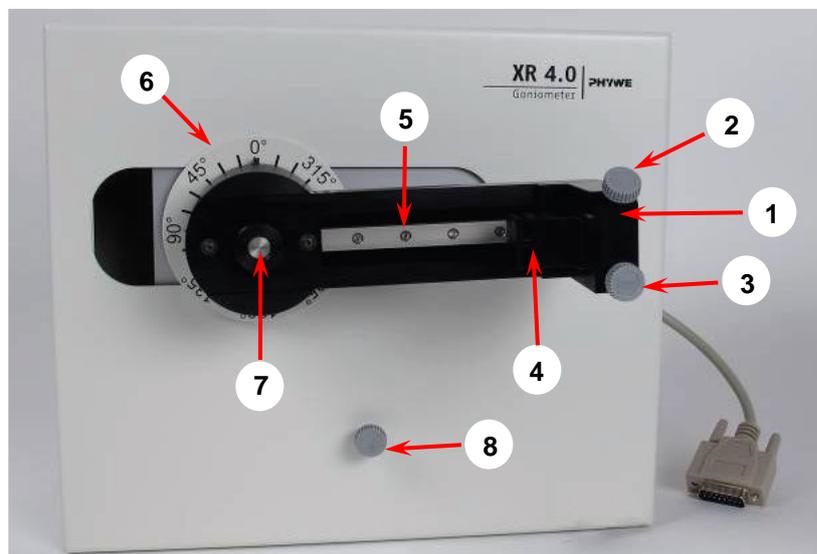
Las especificaciones técnicas de los tubos de rayos X que fueron usados en el proyecto son las siguientes:

Ángulo del blanco	: 19°
Valores máximos de operación	: 35 kV/1 mA
Voltaje de prueba	: 50 kV
Dimensiones	: 26,7 × 14,8 × 20,3 cm
Líneas características Cobre	: K α : 8,03 KeV (154,2 pm)
	: K β : 8,90 keV (139,2 pm)

Líneas características Molibdeno : $K\alpha$: 17,43 KeV (71,2 pm)
 $K\beta$: 19,60 keV (63,4 pm)

Líneas características Hierro : $K\alpha$: 6,40 KeV (194 pm)
 $K\beta$: 7,06 keV (176 pm)

La Figura 21 muestra los elementos funcionales del goniómetro, el cual era un dispositivo que permitía el montaje del detector de rayos X y el monocristal y, asimismo, su rotación en un rango de -10° a $+170^\circ$. Poseía dos motores paso a paso - uno para el porta-muestra y otro para el detector - que funcionaban independientemente o acoplados.



- | | |
|-------------------------------------|-------------------------------------|
| ① Soporte del detector de rayos X | ⑤ Barra guía del detector |
| ② Tornillo de fijación del detector | ⑥ Escala angular del detector |
| ③ Tornillo de fijación a la guía | ⑦ Conectores del monocristal |
| ④ Soporte de diafragma del detector | ⑧ Tornillo de fijado del goniómetro |

Figura 21. El goniómetro y sus elementos funcionales. Adaptado de PHYWE Series of Publications, TESS extert, Laboratory Experiments, 2016, Copyrigh 2016 por PHYWE Systeme GmbH & Co.

El sistema de detección de la radiación fue un tubo contador Geiger-Müller, como el que se muestra en la Figura 22. Consistía de un tubo cilíndrico metálico que contenía un hilo metálico delgado a lo largo de su eje, los cuales

constituían los electrodos. El espacio entre el tubo y el hilo estaba aislado y lleno de un gas inerte a baja presión, y podía establecerse entre ellos una gran diferencia de potencial.

Cuando una partícula cargada penetraba en el tubo se desprendía electrones de los átomos del gas que llenaba el tubo, los que fueron atraídos hacia el hilo debido a su voltaje positivo, ganaban energía y colisionaban con otros átomos del gas liberando más electrones, hasta producir una avalancha que daba origen a un pulso de corriente que se podía detectar. Este pulso de corriente, se podía medir como un evento contable en forma de un pulso de voltaje desarrollado a través de una resistencia eléctrica externa, haciendo así más sencillo el procesamiento electrónico.



Figura 22. El Contador Geiger-Müller. Adaptado de PHYWE Series of Publications, TESS extert, Laboratory Experiments, 2016, Copyrigh 2016 por PHYWE Systeme GmbH & Co.

Las especificaciones técnicas del tubo contador Geiger-Müller usado en el proyecto se dan a continuación:

Voltaje de operación	: 500V	Longitud del Plateau	: 200V
Tiempo muerto	: 100 μ s	Densidad de la ventana	: 3 mg/cm ²
Diámetro de la carcasa	: 22 mm	Diámetro del tubo contador	: 15 mm
Longitud del tubo	: 76 mm		

El juego de monocristales usados para la ejecución del proyecto se muestra en la Figura 23 y sus especificaciones técnicas se detallan en el siguiente cuadro:

Monocristal	Orientación	Distancia interplanar (pm)	Dimensiones (mm)
Li F	100	201,4	10 x 12
K Br	100	329,0	10 x 12
Na Cl	100	282,0	3 x 15 x 15
Na Cl	110	398,8	3 x 15 x 15
Na Cl	111	325,6	3 x 15 x 15

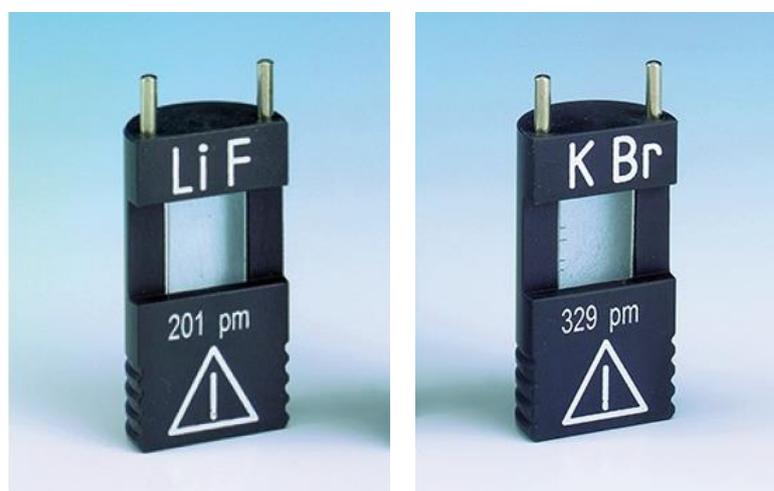


Figura 23. Juego de Monocristales. Adaptado de PHYWE Series of Publications, TESS extert, Laboratory Experiments, 2016, Copyrigh 2016 por PHYWE Systeme GmbH & Co.

4.6. Análisis y procesamiento de datos

Con el programa *measure 4.6.15.3*, se pudieron determinar los órdenes de difracción n y las posiciones angulares θ de los picos de intensidad en los

espectros de emisión de rayos X de los elementos, como se indica a continuación.

1. Se abrió el espectro de emisión de rayos X del Cobre, obtenido con el monocristal LiF (100), con el programa *measure 4.6.15.3* y con el botón *Seleccionar* se seleccionó el área para el análisis de los picos, como muestra la Figura 24.

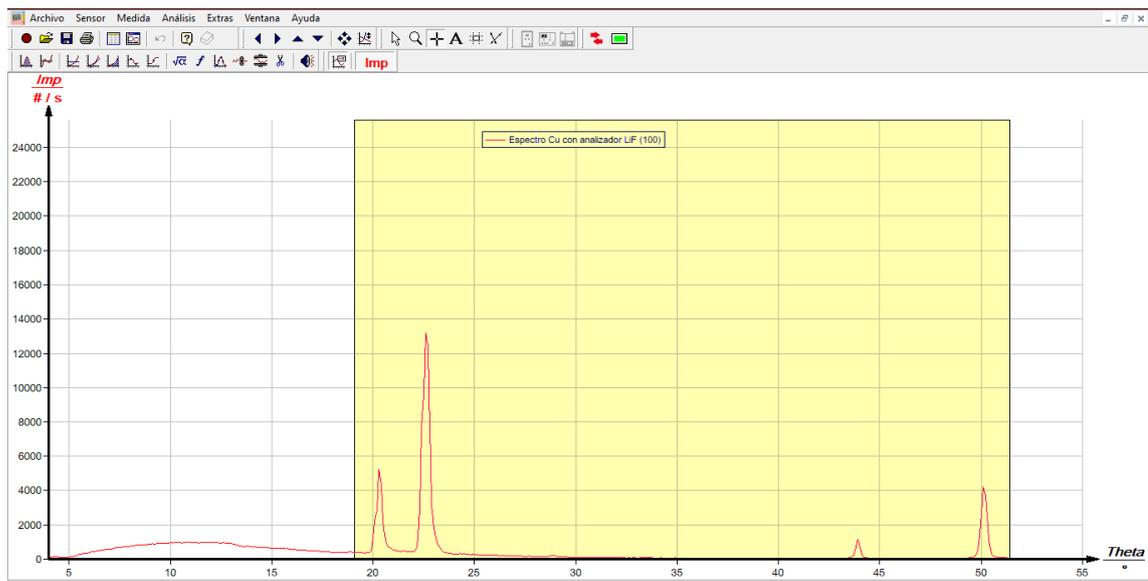


Figura 24. Área seleccionada del espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de LiF (100). Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

2. En el menú *Análisis*, se seleccionó la función *Análisis de pico* para abrir la ventana de diálogo *Análisis de pico*, que se muestra en la Figura 25, en la que se registraron los valores de las posiciones angulares de los máximos de los picos de intensidad y sus correspondientes valores de altura de pico expresadas en #/s.

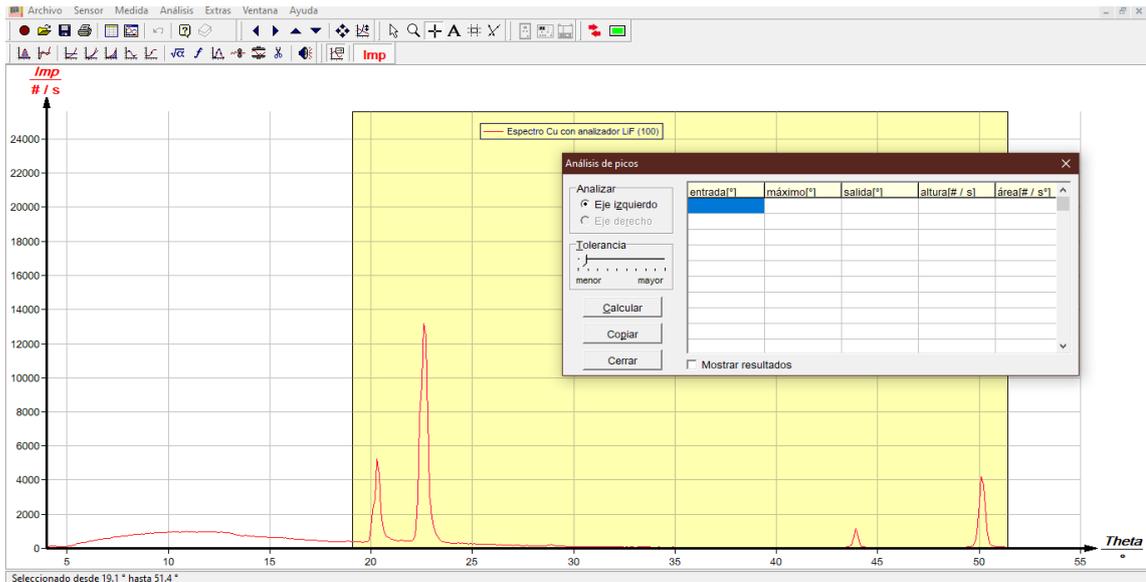


Figura 25. Área seleccionada del espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de LiF (100) mostrando la ventana de diálogo *Análisis de picos*. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

- Se seleccionó un valor de *Tolerancia* y se hizo clic en el botón *Calcular*. Se seleccionó *Mostrar resultados* y después se hizo clic en el botón *Cerrar*, como se muestra en la Figura 26. Si no se calculaban todos los picos deseados o existían demasiados picos, se reajustaba convenientemente el valor la *Tolerancia*.

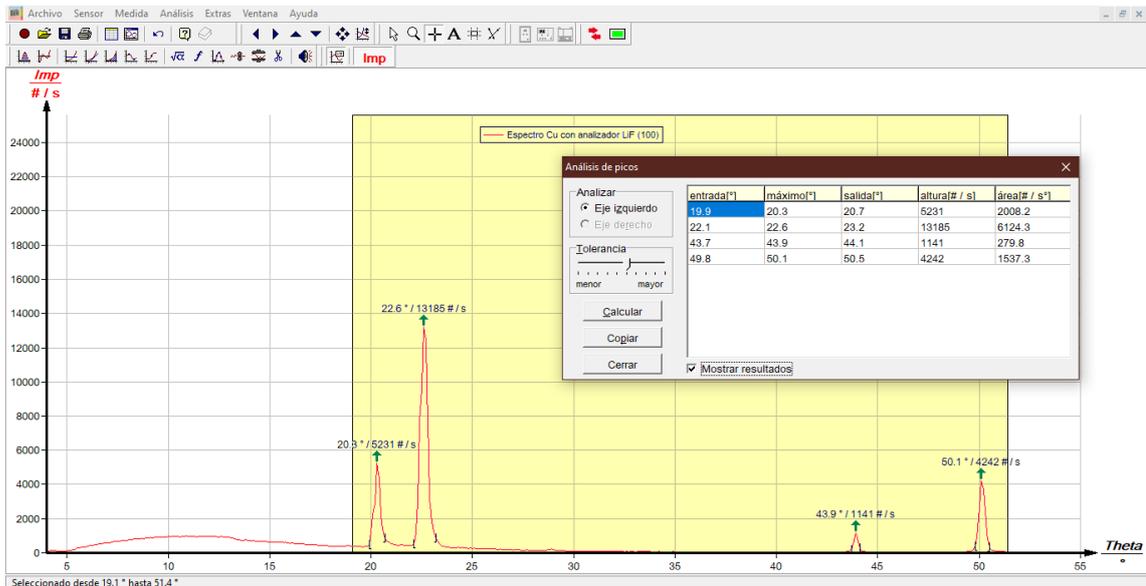


Figura 26. Área seleccionada del espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de LiF (100) mostrando la ventana de diálogo *Análisis de picos* y los resultados obtenidos. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

4. Para los valores experimentales de las posiciones angulares θ que se obtuvieron, se determinó el orden de difracción n haciendo uso de la ecuación (12) correspondiente a la ley de Bragg.
5. Se hizo clic en el botón *Leyenda*  de la barra de botones de acceso directo y se ubicó el cursor en la posición del espectro en la que se deseaba introducir los textos referidos a los órdenes de difracción; esto es, $n = 1$, $n = 2$, etc. Una vez definidos los textos en la ventana de diálogo *Leyenda*, se hizo clic en el botón *Aplicar* y después en el botón *OK*, los que se muestran en la Figura 27.

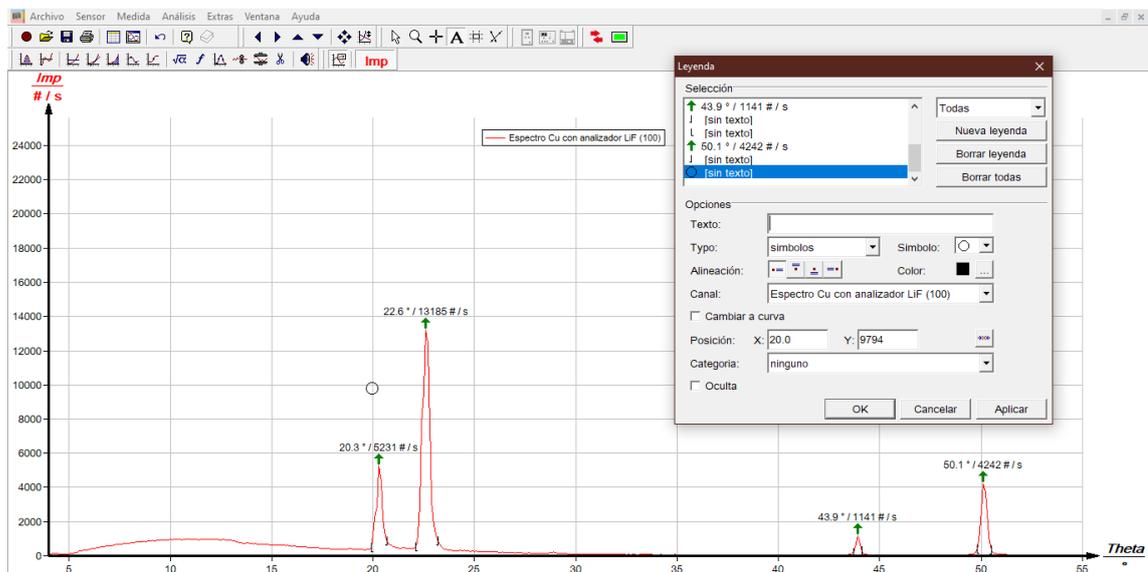


Figura 27. Espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de LiF (100) mostrando la ventana de diálogo *Leyenda*. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

6. Los valores experimentales correspondientes a los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$, en concordancia con los órdenes de difracción, se mostraron en el espectro de emisión del Cobre obtenido usando el monocristal de LiF (100), según se muestra en la Figura 28.

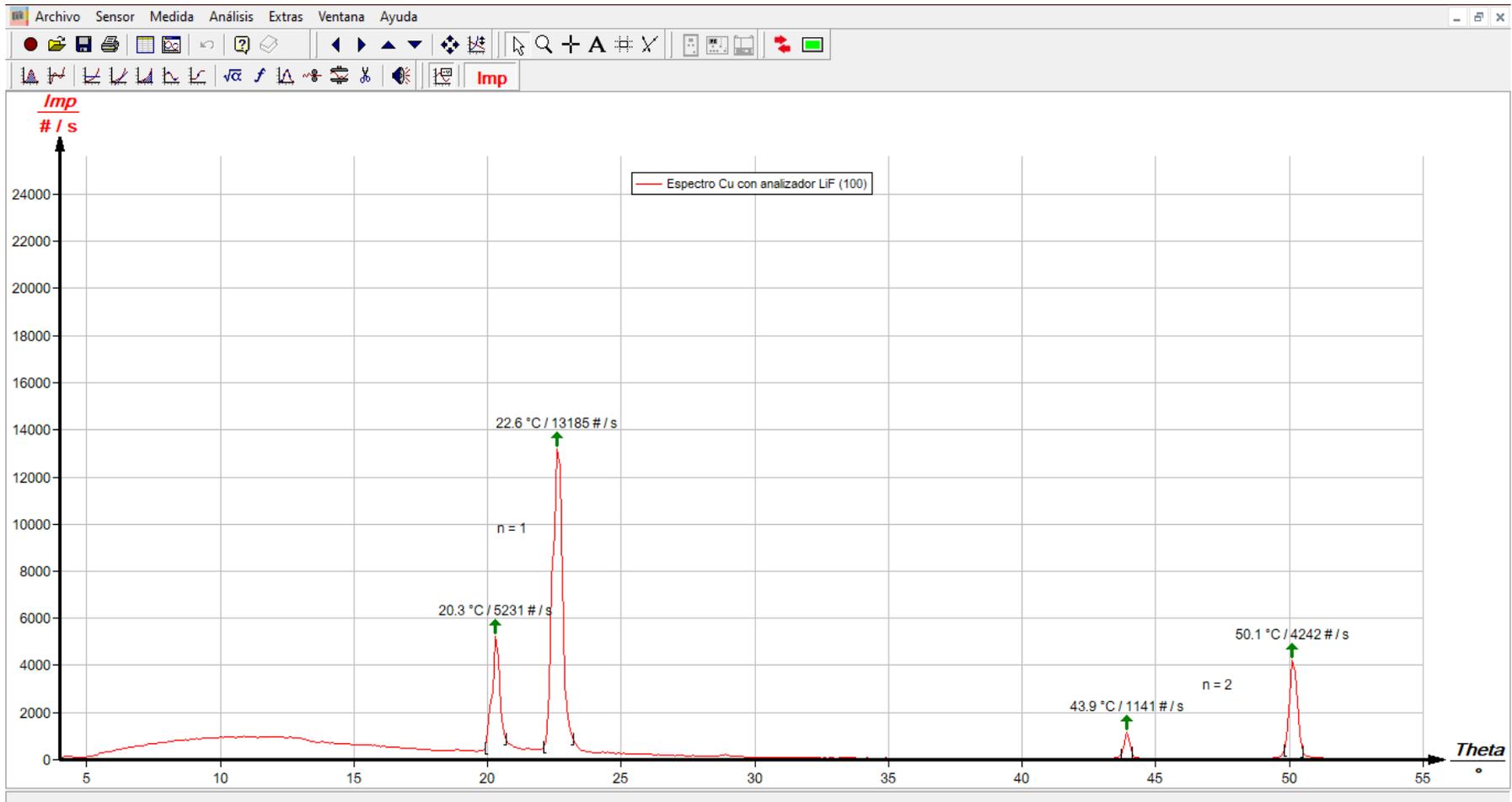


Figura 28. Espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de LiF (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$ y $n = 2$. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

7. Se repitió el procedimiento para obtener todos los espectros de emisión de rayos X del Cobre evaluados, usando los otros monocristales analizadores: KBr (100), NaCl (100), NaCl (110) y NaCl (111), los que se muestran en el Apéndice 2 como Figura 29, Figura 30, Figura 31 y Figura 32.
8. A continuación, se abrieron sucesivamente los espectros de emisión de rayos X del Molibdeno, obtenidos con los monocristales LiF (100), KBr (100), NaCl (100) y NaCl (110), y se repitió el procedimiento para obtener estos espectros evaluados, los que se muestran en el Apéndice 2 como Figura 33, Figura 34, Figura 35 y Figura 36.
9. Finalmente, se abrieron sucesivamente los espectros de emisión de rayos X del Fierro, obtenidos con los monocristales LiF (100), KBr (100), NaCl (100), NaCl (110) y NaCl (111), y se repitió el procedimiento para obtener estos espectros evaluados, los que se muestran en el Apéndice 2 como Figura 37, Figura 38, Figura 39, Figura 40 y Figura 41.

CAPÍTULO V: RESULTADOS

5.1. Resultados descriptivos

1. Usando los valores de los ángulos de Bragg θ obtenidos directamente de los espectros evaluados de emisión de rayos X del **Cobre**, que se muestran en la Figura 28, Figura 29, Figura 30, Figura 31 y Figura 32, los órdenes de difracción y las distancias interplanares de los monocristales analizadores LiF (100), KBr (100), NaCl (100), NaCl (110) y NaCl (111), se aplicó la ecuación (13) para obtener las energías de transición electrónica correspondientes a las líneas características K_{α} y K_{β} del Cobre, las que se muestran en la Tabla 1.

Según (Ciullo, 2014) y (Spiegel & Stephens, 2009), el valor medio de la energía de transición electrónica para la emisión de los rayos X característicos K_{α} del Cobre, se obtuvo del promedio de todos los valores de energía correspondientes a las líneas K_{α} de la Tabla 1, obteniéndose el valor **8,031 keV**. El valor medio de la energía de transición electrónica para la emisión de los rayos X característicos K_{β} del Cobre, se obtuvo del promedio de todos los valores de energía correspondientes a las líneas K_{β} de la Tabla 1, obteniéndose el valor **8,887 keV**.

Debido a la poca resolución del goniómetro ($0,1^{\circ}$) sólo fue posible determinar el valor medio de la energía que le corresponde a las líneas $K_{\alpha 1}$ y $K_{\alpha 2}$, que corresponden a las transiciones $L_3 \rightarrow K$ y $L_2 \rightarrow K$, respectivamente, del diagrama de niveles de energías del Cobre que se muestra en la Figura 4. Para resolver la energía para cada línea se pudo haber seleccionado los espectros de emisión de rayos X del Cobre más convenientes y observar para qué orden de difracción se presentaba el desdoblamiento de la línea K , lo que, evidentemente, reduciría el número de datos experimentales, aumentando el error experimental. En el caso del Cobre, los espectros de emisión de rayos X obtenidos usando los

monocristales de NaCl (111) y KBr (100) para el orden de difracción $n = 4$ se pudieron haber usado.

Tabla 1. *Energías de transición electrónica del Cobre*

Cristal	Línea	θ (°)	seno θ	n	d (m)	E (keV)
LiF (100)	K α	22,60	0,384295323	1	$2,014 \times 10^{-10}$	8,007
	K β	20,30	0,346935652	1		8,869
	K α	50,10	0,767165152	2		8,022
	K β	43,90	0,693401828	2		8,875
KBr (100)	K α	13,60	0,235142113	1	$3,295 \times 10^{-10}$	7,998
	K β	12,20	0,211324796	1		8,900
	K α	28,00	0,469471563	2		8,012
	K β	25,10	0,424199423	2		8,867
	K α	44,60	0,702153053	3		8,036
	K β	39,40	0,634730513	3		8,889
	K α	69,20	0,934825676	4		8,048
	K β	57,70	0,845261833	4		8,900
NaCl (100)	K α	15,90	0,273959219	1	$2,820 \times 10^{-10}$	8,022
	K β	14,40	0,248689887	1		8,837
	K α	33,30	0,549022818	2		8,005
	K β	29,70	0,495458668	2		8,871
	K α	55,20	0,821149209	3		8,029
	K β	47,90	0,741975841	3		8,885
NaCl (110)	K α	22,60	0,384295323	2	$3,988 \times 10^{-10}$	8,087
	K β	20,30	0,346935652	2		8,958
	K α	50,50	0,771624583	4		8,055
	K β	44,10	0,695912797	4		8,932
NaCl (111)	K α	13,70	0,236838146	1	$3,256 \times 10^{-10}$	8,036
	K β	12,40	0,214735327	1		8,863
	K α	28,30	0,474088209	2		8,029
	K β	25,40	0,428935133	2		8,875
	K α	45,30	0,710799474	3		8,033
	K β	40,00	0,642787610	3		8,883
	K α	71,20	0,946649260	4		8,042
	K β	58,80	0,855364260	4		8,901

Fuente: elaboración propia

2. Usando los valores de los ángulos de Bragg θ obtenidos directamente de los espectros evaluados de emisión de rayos X del **Molibdeno**, que se muestran en la Figura 33, Figura 34, Figura 35 y Figura 36, los órdenes de difracción y las distancias interplanares de los monocristales analizadores LiF (100), KBr (100), NaCl (100) y NaCl (110), se aplicó la ecuación (13) para obtener las energías de transición electrónica correspondientes a las líneas características K_{α} y K_{β} del Molibdeno, las que se muestran en la Tabla 2.

Según (Ciullo, 2014) y (Spiegel & Stephens, 2009), el valor medio de la energía de transición electrónica para la emisión de los rayos X característicos K_{α} del Molibdeno, se obtuvo del promedio de todos los valores de energía correspondientes a las líneas K_{α} de la Tabla 2, obteniéndose el valor **17,426 keV**. El valor medio de la energía de transición electrónica para la emisión de los rayos X característicos K_{β} del Molibdeno, se obtuvo del promedio de todos los valores de energía correspondientes a las líneas K_{β} de la Tabla 2, obteniéndose el valor **19,552 keV**.

Debido a la poca resolución del goniómetro ($0,1^{\circ}$) sólo fue posible determinar el valor medio de la energía que le corresponde a las líneas $K_{\alpha 1}$ y $K_{\alpha 2}$, que corresponden a las transiciones $L_3 \rightarrow K$ y $L_2 \rightarrow K$, respectivamente, del diagrama de niveles de energías del Molibdeno que se muestra en la Figura 5. Para resolver la energía para cada línea se pudo haber seleccionado los espectros de emisión de rayos X del Molibdeno más convenientes y observar para qué orden de difracción se presentaba el desdoblamiento de la línea K , lo que, evidentemente, reduciría el número de datos experimentales, aumentando el error

experimental. En el caso del Molibdeno, ningún espectro de emisión de rayos X obtenido se pudo haber usado.

Tabla 2. Energías de transición electrónica del Molibdeno

Cristal	Línea	θ (°)	seno θ	n	d (m)	E (keV)
LiF (100)	K α	10,20	0,177084740	1	$2,014 \times 10^{-10}$	17,376
	K β	9,20	0,159881188	1		19,246
	K α	20,80	0,355106962	2		17,330
	K β	18,50	0,317304656	2		19,395
	K α	32,10	0,531398580	3		17,371
	K β	28,20	0,472550765	3		19,535
	K α	44,90	0,705871571	4		17,437
	K β	39,50	0,636078220	4		19,350
KBr (100)	K α	6,30	0,109734311	1	$3,295 \times 10^{-10}$	17,139
	K β	5,60	0,097582900	1		19,274
	K α	12,60	0,218143241	2		17,243
	K β	11,20	0,194234351	2		19,366
	K α	19,00	0,325568154	3		17,331
	K β	16,90	0,290702194	3		19,409
	K α	25,60	0,432085749	4		17,411
NaCl (100)	K α	7,20	0,125333234	1	$2,820 \times 10^{-10}$	17,534
	K β	6,40	0,111468932	1		19,715
	K α	14,60	0,252069358	2		17,436
	K β	13,00	0,224951054	2		19,538
	K α	22,20	0,377840787	3		17,448
	K β	19,60	0,335451570	3		19,653
	K α	30,20	0,503019947	4		17,475
	K β	26,70	0,449318999	4		19,564
NaCl (110)	K α	10,10	0,175366726	2	$3,988 \times 10^{-10}$	17,722
	K β	8,90	0,154710386	2		20,089
	K α	20,70	0,353474844	4		17,585
	K β	18,30	0,313992456	4		19,796
	K α	32,10	0,531398580	6		17,546
	K β	28,10	0,471011881	6		19,795

Fuente: elaboración propia.

3. Usando los valores de los ángulos de Bragg θ obtenidos directamente de los espectros evaluados de emisión de rayos X del **Fierro**, que se muestran en la Figura 37, Figura 38, Figura 39, Figura 40 y Figura 41, los órdenes de difracción y las distancias interplanares de los monocristales analizadores LiF (100), KBr (100), NaCl (100), NaCl (110) y NaCl (111), se aplicó la ecuación (13) para obtener las energías de transición electrónica correspondientes a las líneas características K_{α} y K_{β} del Fierro, las que se muestran en la Tabla 3.

Según (Ciullo, 2014) y (Spiegel & Stephens, 2009), el valor medio de la energía de transición electrónica para la emisión de los rayos X característicos K_{α} del Fierro, se obtuvo del promedio de todos los valores de energía correspondientes a las líneas K_{α} de la Tabla 3, obteniéndose el valor **6,407 keV**. El valor medio de la energía de transición electrónica para la emisión de los rayos X característicos K_{β} del Fierro, se obtuvo del promedio de todos los valores de energía correspondientes a las líneas K_{β} de la Tabla 3, obteniéndose el valor **7,058 keV**.

Debido a la poca resolución del goniómetro ($0,1^{\circ}$) sólo fue posible determinar el valor medio de la energía que le corresponde a las líneas $K_{\alpha 1}$ y $K_{\alpha 2}$, que corresponden a las transiciones $L_3 \rightarrow K$ y $L_2 \rightarrow K$, respectivamente, del diagrama de niveles de energías del Fierro que se muestra en la Figura 6. Para resolver la energía para cada línea se pudo haber seleccionado los espectros de emisión de rayos X del Fierro más convenientes y observar para qué orden de difracción se presentaba el desdoblamiento de la línea K , lo que, evidentemente, reduciría el número de datos experimentales, aumentando el error experimental. En el caso del Fierro, el espectro de emisión de rayos X obtenido usando el monocristal de LiF (100) para el orden de difracción $n = 2$ se pudo haber usado.

Tabla 3. Energías de transición electrónica del Hierro

Cristal	Línea	θ (°)	seno θ	n	d (m)	E (keV)
LiF (100)	K α	28,90	0,483282383	1	$2,014 \times 10^{-10}$	6,367
	K β	26,00	0,438371147	1		7,019
	K α	74,10	0,961741310	2		6,399
	K β	60,90	0,873772223	2		7,043
KBr (100)	K α	17,20	0,295708050	1	$3,295 \times 10^{-10}$	6,360
	K β	15,60	0,268919821	1		6,994
	K α	36,10	0,589196357	2		6,384
	K β	32,30	0,534352349	2		7,039
	K α	61,80	0,881303452	3		6,402
	K β	53,20	0,800731371	3		7,046
NaCl (100)	K α	20,00	0,342020143	1	$2,820 \times 10^{-10}$	6,425
	K β	18,00	0,309016994	1		7,111
	K α	43,30	0,685818353	2		6,409
	K β	38,50	0,622514637	2		7,060
	K β	69,00	0,933580426	3		7,062
NaCl (110)	K α	28,60	0,478691858	2	$3,988 \times 10^{-10}$	6,492
	K β	25,60	0,432085749	2		7,193
	K β	61,40	0,877982975	4		7,080
NaCl (111)	K α	17,10	0,294040325	1	$3,256 \times 10^{-10}$	6,473
	K β	15,70	0,270600446	1		7,034
	K α	3,70	0,597625147	2		6,370
	K β	32,80	0,541708210	2		7,027
	K α	63,30	0,893371388	3		6,391
	K β	54,20	0,811063819	3		7,040

Fuente: elaboración propia

5.2. Resultados Inferenciales

Puesto que no se ha realizado un tratamiento estadístico de datos para los espectros obtenidos experimentalmente del Cobre, Molibdeno y Hierro, no se han analizados éstos más allá de los resultados presentados en la sección anterior con el fin de poder tomar decisiones y realizar predicciones.

5.3. Otro tipo de resultados

La desviación estándar mínima de un conjunto de N números x_1, x_2, \dots, x_N se denota como σ y se define como:

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}{N}} \quad (14)$$

donde $(x_i - \bar{x})$ representa la desviación de cada uno de los números x_i respecto al valor medio \bar{x} . Esta medida de dispersión puede calcularse mediante un programa de hoja de cálculo, como MS EXCEL. (Spiegel & Stephens, 2009) y (Gil, 2016).

Aplicando la ecuación (14) a los valores de la Tabla 1 que corresponden a las energías para la transición electrónica K_α del Cobre, se encuentra que: $\sigma = 0,022$, lo que se puede asumir como el error absoluto de la medida experimental. Luego: $E_{K_\alpha} = (8,031 \pm 0,022)$ keV. El error relativo de la medida es $0,0027$.

Aplicando la ecuación (14) a los valores de la Tabla 1 que corresponden a las energías para la transición electrónica K_β del Cobre, se encuentra que: $\sigma = 0,028$, lo que se puede asumir como el error absoluto de la medida experimental. Luego: $E_{K_\beta} = (8,887 \pm 0,028)$ keV. El error relativo de la medida es $0,0031$.

Aplicando la ecuación (14) a los valores de la Tabla 2 que corresponden a las energías para la transición electrónica K_α del Molibdeno, se encuentra que: $\sigma = 0,137$, lo que se puede asumir como el error absoluto de la medida

experimental. Luego: $E_{K\alpha} = (17,426 \pm 0,137) \text{ keV}$. El error relativo de la medida es 0,0078 .

Aplicando la ecuación (14) a los valores de la Tabla 2 que corresponden a las energías para la transición electrónica K_{β} del Molibdeno, se encuentra que: $\sigma = 0,550$, lo que se puede asumir como el error absoluto de la medida experimental. Luego: $E_{K\beta} = (19,552 \pm 0,550) \text{ keV}$. El error relativo de la medida es 0,0281 .

Aplicando la ecuación (14) a los valores de la Tabla 3 que corresponden a las energías para la transición electrónica K_{α} del Fierro, se encuentra que: $\sigma = 0,040$, lo que se puede asumir como el error absoluto de la medida experimental. Luego: $E_{K\alpha} = (6,407 \pm 0,040) \text{ keV}$. El error relativo de la medida es 0,0062 .

Aplicando la ecuación (14) a los valores de la Tabla 3 que corresponden a las energías para la transición electrónica K_{β} del Fierro, se encuentra que: $\sigma = 0,048$, lo que se puede asumir como el error absoluto de la medida experimental. Luego: $E_{K\beta} = (7,058 \pm 0,048) \text{ keV}$. El error relativo de la medida es 0,0068 .

Evidentemente, la distribución de los valores experimentales respecto al valor medio es la clave para una interpretación satisfactoria de las mediciones. La mejor medida de la amplitud de la distribución es la desviación estándar y cuánto más estrecha sea la distribución, el valor de la media será el valor más representativo de la distribución. (Baird, 1991) y (Ciullo, 2014).



CAPÍTULO VI: DISCUSIÓN DE RESULTADOS

6.1. Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados

En el proyecto de investigación se formuló la Hipótesis General que establecía que las reglas de selección de la mecánica cuántica evidenciaban las transiciones energéticas K en los espectros de emisión de rayos X; lo que permitió formular las siguientes Hipótesis Específicas:

1. Los espectros de emisión de rayos X permiten determinar las energías de las líneas características.
2. El número de órdenes de difracción en los espectros de emisión de rayos X depende de la distancia interplanar del monocristal analizador usado.

Se pudo observar que a partir de los ángulos de Bragg θ , determinados directamente de los espectros evaluados de emisión de rayos X de los elementos Cobre, Molibdeno y Fierro, los ordenes de difracción, los valores de las distancias interplanares d de los monocristales usados y la aplicación de la ecuación (13), se han podido determinar las energías de transición electrónica correspondientes a las líneas características K_{α} y K_{β} de los espectros de los referidos elementos - que se muestran en la Tabla 1, la Tabla 2 y la Tabla 3, respectivamente. Esto, evidentemente, demuestra la primera hipótesis específica.

Asimismo, de los valores de la Tabla 1, la Tabla 2 y la Tabla 3 también se pudo observar que el número de órdenes de difracción n en los espectros de emisión de rayos X de los elementos Cobre, Molibdeno y Fierro era mayor cuánto mayor era la distancia interplanar d del monocristal analizador usado, lo que demuestra la segunda hipótesis específica.

Por otro lado, (Brouwer, 2010) y (Tilley, 2013) habían establecido que las transiciones permitidas que los electrones podían experimentar desde el estado inicial al estado final se especificaban por las tres reglas de selección de la

mecánica cuántica: (1) El cambio en el número cuántico principal n debía ser ≥ 1 ; (2) El cambio en el número cuántico azimutal ℓ sólo podía ser ± 1 ; (3) El cambio en el número cuántico de momento angular j sólo podía ser ± 1 o 0.

Un análisis a los diagramas de niveles de energía de los elementos de las Figura 4, la Figura 5 y la Figura 6 (PHYWE, 2016), en relación a las reglas de selección de la mecánica cuántica, se muestra en la Tabla 4.

Tabla 4. *Análisis del diagrama de niveles de energía de los Elementos en relación a los números cuánticos.*

Elemento	Transición K desde	Δn	$\Delta \ell$	Δj	Posibilidad
Cu	M _{2/3}	$3 - 1 = 2$	$1 - 0 = 1$	$1/2 - 1/2 = 0$ $3/2 - 1/2 = 1$	Si
	M ₁	$3 - 1 = 2$	$0 - 0 = 0$	$1/2 - 1/2 = 0$	No
	L ₃	$2 - 1 = 1$	$1 - 0 = 1$	$3/2 - 1/2 = 1$	Si
	L ₂	$2 - 1 = 1$	$1 - 0 = 1$	$1/2 - 1/2 = 0$	Si
	L ₁	$2 - 1 = 1$	$0 - 0 = 0$	$1/2 - 1/2 = 0$	No
Mo	M ₂	$3 - 1 = 2$	$1 - 0 = 1$	$1/2 - 1/2 = 0$	Si
	M ₁	$3 - 1 = 2$	$0 - 0 = 0$	$1/2 - 1/2 = 0$	No
	L ₃	$2 - 1 = 1$	$1 - 0 = 1$	$3/2 - 1/2 = 1$	Si
	L ₂	$2 - 1 = 1$	$1 - 0 = 1$	$1/2 - 1/2 = 0$	Si
	L ₁	$2 - 1 = 1$	$0 - 0 = 0$	$1/2 - 1/2 = 0$	No
Fe	M _{2/3}	$3 - 1 = 2$	$1 - 0 = 1$	$1/2 - 1/2 = 0$ $3/2 - 1/2 = 1$	Si
	M ₁	$3 - 1 = 2$	$0 - 0 = 0$	$1/2 - 1/2 = 0$	No
	L ₃	$2 - 1 = 1$	$1 - 0 = 1$	$3/2 - 1/2 = 1$	Si
	L ₂	$2 - 1 = 1$	$1 - 0 = 1$	$1/2 - 1/2 = 0$	Si
	L ₁	$2 - 1 = 1$	$0 - 0 = 0$	$1/2 - 1/2 = 0$	No

Fuente: elaboración propia

Los resultados mostraron que sólo eran posibles las transiciones que cumplían las tres reglas de selección: $\Delta n \geq 1$; $\Delta \ell = \pm 1$ y $\Delta j = 0$ ó ± 1 . Esto es, las reglas de selección de la mecánica cuántica evidenciaban las transiciones energéticas K en los espectros de emisión de rayos X de los elementos, lo que demuestra la hipótesis general.

6.2. Contrastación de los resultados con otros estudios similares

En la Tabla 5, se muestran los valores determinados experimentalmente de las energías de transición electrónica correspondientes a las líneas características K_{α} y K_{β} de los espectros de emisión de rayos X de los elementos Cobre, Molibdeno y Fierro y los valores experimentales presentados en la Referencia 1 (PHYWE, 2016) y, asimismo, los valores aceptados para estas energías de transición que se proporcionan en la Referencia 2 (Koch, 2006).

Tabla 5. *Valores experimentales y aceptados de las energías de transición electrónica de los elementos.*

Elemento	Línea	Energía (keV)		
		Experimental	Referencia 1	Referencia 2
Cobre	K_{α}	8,031	8,010	8,041
	K_{β}	8,887	8,862	8,905
Molibdeno	K_{α}	17,426	17,244	17,444
	K_{β}	19,552	19,338	19,608
Fierro	K_{α}	6,407	6,391	6,400
	K_{β}	7,058	7,046	7,038

Fuente: elaboración propia.

Tomando en cuenta que las tasas de conteo que permiten los registros experimentales de las curvas de los espectros de emisión de rayos X de los elementos Cobre, Molibdeno y Fierro constituyen eventos aleatorios, el análisis de los resultados muestra que los valores obtenidos experimentalmente de las

energías de transición electrónica para estos elementos corresponden aproximadamente a los valores determinados en la Referencia 1 (PHYWE, 2016), pero muestran una muy buena correspondencia con los valores aceptados proporcionados en la Referencia 2 (Koch, 2006).

6.3. Responsabilidad ética

En la ejecución del proyecto se ha cumplido a cabalidad lo establecido en el reglamento general de investigación, el reglamento de propiedad intelectual y el reglamento de participación de los docentes en proyectos de investigación aprobados por la Universidad Nacional del Callao. No se han falsificado o inventado datos o resultados total o parcialmente, ni se han plagiado datos, resultados, tablas, cuadros de otros autores o investigadores. Se ha cumplido con citar las referencias o fuentes bibliográficas, datos, resultados e información general de otros autores o investigadores, respetando sus derechos de autoría y de propiedad intelectual.

CONCLUSIONES

A partir del análisis de los resultados experimentales obtenidos de los espectros de emisión de rayos X de los elementos Cobre, Molibdeno y Fierro, se han podido establecer las siguientes conclusiones:

1. Los espectros de emisión de rayos X de los elementos Cobre, Molibdeno y Fierro permitieron determinar las energías de transición electrónica correspondientes a las líneas características $K\alpha$ y $K\beta$ de los espectros, demostrando la primera hipótesis específica formulada en el proyecto de investigación.
2. Los valores determinados experimentalmente de las energías de transición electrónica propios de las líneas características $K\alpha$ y $K\beta$ de los elementos Cobre, Molibdeno y Fierro muestran una muy buena correspondencia con los valores aceptados proporcionados en la referencia 2 (Koch, 2006), lo que evidencia un muy buen trabajo experimental.
3. El número de órdenes de difracción en los espectros de emisión de rayos X de los elementos Cobre, Molibdeno y Fierro dependen de la distancia interplanar del monocristal analizador usado, lo que demostró la segunda hipótesis específica formulada en el proyecto de investigación.
4. El análisis a los diagramas de niveles de energía de los elementos Cobre, Molibdeno y Fierro mostró que las reglas de selección de la mecánica cuántica evidenciaban las transiciones energéticas K en los espectros de emisión de rayos X de estos elementos, lo que demostró la hipótesis general.

RECOMENDACIONES

1. Debido a la poca resolución del goniómetro ($0,1^\circ$) sólo fue posible determinar, con muy buena aproximación, el valor medio de la energía que le corresponde a las líneas $K_{\alpha 1}$ y $K_{\alpha 2}$, que corresponden a las transiciones $L_3 \rightarrow K$ y $L_2 \rightarrow K$, respectivamente, del diagrama de niveles de energías del Cobre que se muestra en la Figura 11. Para resolver la energía para cada línea se pudo haber seleccionado los espectros de emisión de rayos X del Cobre más convenientes y observar para qué orden de difracción se presentaba el desdoblamiento de la línea K, lo que, evidentemente, reduciría el número de datos experimentales, aumentando el error experimental. En el caso del Cobre, los espectros de emisión de rayos X obtenidos usando los monocristales de NaCl (111) y KBr (100) para el orden de difracción $n = 4$ se pudieron haber usado.
2. Puesto que los valores de las energías de transición electrónica dependen del ángulo de Bragg medidos del espectro experimental, se recomienda realizar un cálculo previo de estos ángulos usando la ecuación (2.4).
3. Para obtener una mayor cantidad de datos experimentales a partir de los espectros de emisión de rayos X del Cobre, se recomienda usar monocristales analizadores del orden de 3×10^{-10} m a 4×10^{-10} m.
4. Para verificar la validez de un espectro de energías de un elemento, se recomienda hacer uso de las reglas de selección de la mecánica cuántica para comprobar las transiciones electrónicas posibles.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Alonso, M. & Finn, E. (1971). *Física. Volumen III: Fundamentos Cuánticos y Estadísticos*. Barcelona. Fondo Educativo Interamericano, S. A.
- Aranda, B. (s.f.). *Estructura de los Materiales Cristalinos*. Recuperado de:
<https://www.yumpu.com/es/document/view/14205437/tema-1-estructura-de-los-materiales-cristalinos>
- Baird, D. (1991). *Experimentación: Una Introducción a la teoría de mediciones y al diseño de experimentos*. Segunda Edición. México D. F. Prentice-Hall Hispanoamericana, S. A.
- Brouwer, P. (2010). *Theory of XRF*. 3th ed. Almelo. PANalytical B. V.
- Ciullo, G. (2014). *Introduzione al Laboratorio di Fisica. Misure e Teoria delle Incertezze*. Milan. Springer-Verlag Italia.
- Cullity, B. & Stock, S. (2014). *Elements of X-Ray Diffraction*. 3th ed. Essex. Pearson Education Limited.
- Gil, S. (2016). *Experimentos de física, de bajo costo, usando TIC's*. Buenos Aires. Universidad Nacional de San Martín.
- Jenkins, R. & De Vries, J. (1973). *Practical X-ray Spectrometry*. 2nd ed. New York. Springer-Verlag New York Inc.
- Koch, E. (2006). *International Tables for Crystallography. Volume C. Mathematical, physics and chemical tables*. Netherlands, Springer.
- Martínez, A. (2009). *La Mecánica Cuántica: La espectroscopía de rayos-X*. Recuperado de:
<http://la-mecanica-cuantica.blogspot.com/2009/08/11/la-espectroscopía-de-rayos-X.html>.
- measure 4.6.15.3: 64 bits. PHYWE Systeme [disco compacto]. Alemania: Phywe Systeme GMBH & Co, c2014. Programa computacional.
- Olmo, M. & Nave, R. (s.f.). *Hydrogen Schrodinger Equation – Hyperphysics*. Recuperado de:
<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbasees/quantum/hydazi.html>.
- Phillips, A. C. (2003). *Introduction to Quantum Mechanics*. West Sussex. John Wiley & Sons Ltd.



- PHYWE Series of Publications. (2016). *TESS expert, Laboratory Experiments, X-ray experiments*, 4th ed. Göttingen.
- Spiegel, M. & Stephens, L. (2009). *Estadística*. Cuarta Edición. México D. F. McGraw-Hill/Interamericana Editores, S. A. de C. V.
- Tilley, R. (2013). *Understanding Solids*. 2nd ed. West Sussex. John Wiley & Sons Ltd.
- Velásquez, O. (2011). *Tarea Reglas se selección*. Recuperado de:
<https://sisoyyomismo.wordpress.com/2011/09/26/tarea-reglas-se-seleccion/>.
- Wichmann, E. (1986). *Física Cuántica*. Barcelona. Editorial Reverté, S. A.
- Young, H. & Freedman, R. (2013). *Física Universitaria con Física Moderna*. Volumen 2. Décimo tercera edición. México D. F. Pearson Educación de México, S. A. de C. V.

VIII. ANEXOS

Anexo 1. Matriz de Consistencia

Anexo 2. Espectros de emisión de rayos X obtenidos

- 2.1 Espectro de emisión del Cobre usando el monocristal de KBr (100)
- 2.2 Espectro de emisión del Cobre usando el monocristal de NaCl (100)
- 2.3 Espectro de emisión del Cobre usando el monocristal de NaCl (110)
- 2.4 Espectro de emisión del Cobre usando el monocristal de NaCl (111)
- 2.5 Espectro de emisión del Molibdeno usando el monocristal de LiF (100)
- 2.6 Espectro de emisión del Molibdeno usando el monocristal de KBr (100)
- 2.7 Espectro de emisión del Molibdeno usando el monocristal de NaCl (100)
- 2.8 Espectro de emisión del Molibdeno usando el monocristal de NaCl (110)
- 2.9 Espectro de emisión del Fierro usando el monocristal de LiF (100)
- 2.10 Espectro de emisión del Fierro usando el monocristal de KBr (100)
- 2.11 Espectro de emisión del Fierro usando el monocristal de NaCl (100)
- 2.12 Espectro de emisión del Fierro usando el monocristal de NaCl (110)
- 2.13 Espectro de emisión del Fierro usando el monocristal de NaCl (111)

Anexo 3. Longitudes de onda y energías para las radiaciones características



Anexo 1. Matriz de Consistencia

Título del Proyecto de Investigación: “TRANSICIONES ENERGÉTICAS K EN ESPECTROS DE EMISIÓN DE RAYOS X: DETERMINACIÓN EXPERIMENTAL Y SU EVIDENCIA SEGÚN LAS REGLAS DE SELECCIÓN”

PROBLEMA	OBJETIVOS	HIPÓTESIS	VARIABLES	METODOLOGÍA
<p>Problema General</p> <p>¿Las reglas de selección evidencian las transiciones energéticas K en los espectros de emisión de rayos X obtenidos experimentalmente?</p>	<p>Objetivo General</p> <p>Determinar experimentalmente las transiciones energéticas K en espectros de emisión de rayos X y evidenciarlas mediante las reglas de selección.</p>	<p>Hipótesis General</p> <p>Las reglas de selección evidencian las transiciones energéticas K en los espectros de emisión de rayos X.</p>	<p>Variable Dependiente</p> <p>Transiciones energéticas K en los espectros de emisión de rayos X.</p> <p>Variable Independiente</p> <p>Reglas de selección</p>	<p>Nivel de Investigación</p> <p>Investigación descriptiva y correlacional.</p> <p>Tipo de Investigación</p> <p>Investigación aplicada, cuantitativa y transversal.</p>
<p>Problemas Específicos</p> <p>¿Los espectros de emisión de rayos X permitirán determinar las energías de las líneas características?</p> <p>¿El número de órdenes de difracción en los espectros de emisión de rayos X dependerá de la distancia interplanar del monocristal analizador usado?</p>	<p>Objetivos Específicos</p> <p>Determinar las energías de las líneas características en los espectros de emisión de rayos X.</p> <p>Observar la dependencia del número de órdenes de difracción en los espectros de emisión de rayos X con la distancia interplanar del monocristal analizador.</p>	<p>Hipótesis Específicas</p> <p>Los espectros de emisión de rayos X permiten determinar las energías de las líneas características.</p> <p>El número de órdenes de difracción en los espectros de emisión de rayos X depende de la distancia interplanar del monocristal analizador usado.</p>	<p>Diseño de la Investigación</p> <p>Experimental. Consiste en obtener el comportamiento de la tasa de conteo detectada respecto al ángulo de incidencia de un haz de rayos X sobre un monocristal analizador para obtener espectros de emisión K de rayos X de diversos materiales con la finalidad de observar sus líneas características y, a partir de ellas, determinar sus valores de energía.</p>	

Anexo 2.1

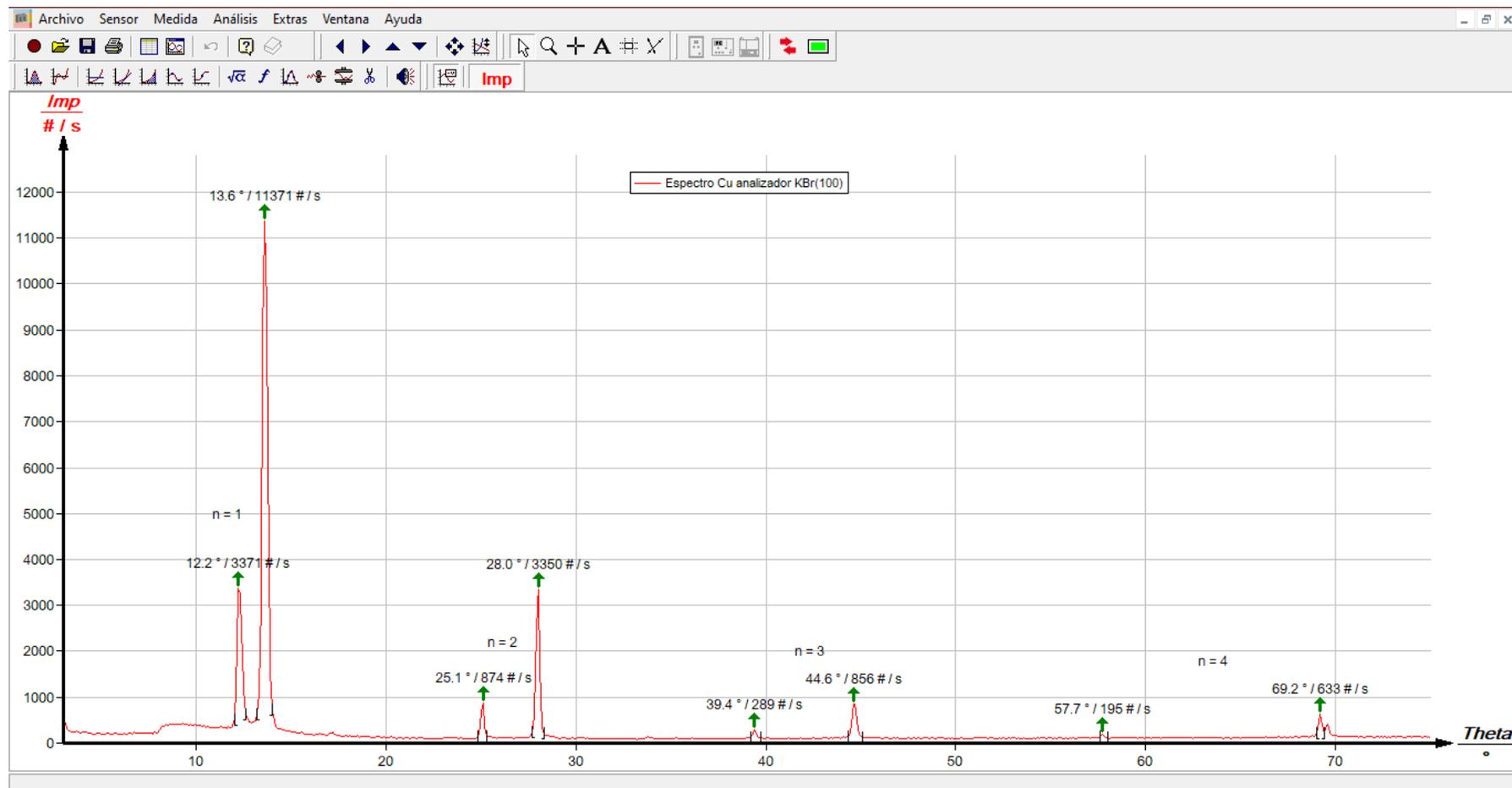


Figura 29. Espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de KBr (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ y $n = 4$. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

Anexo 2.2

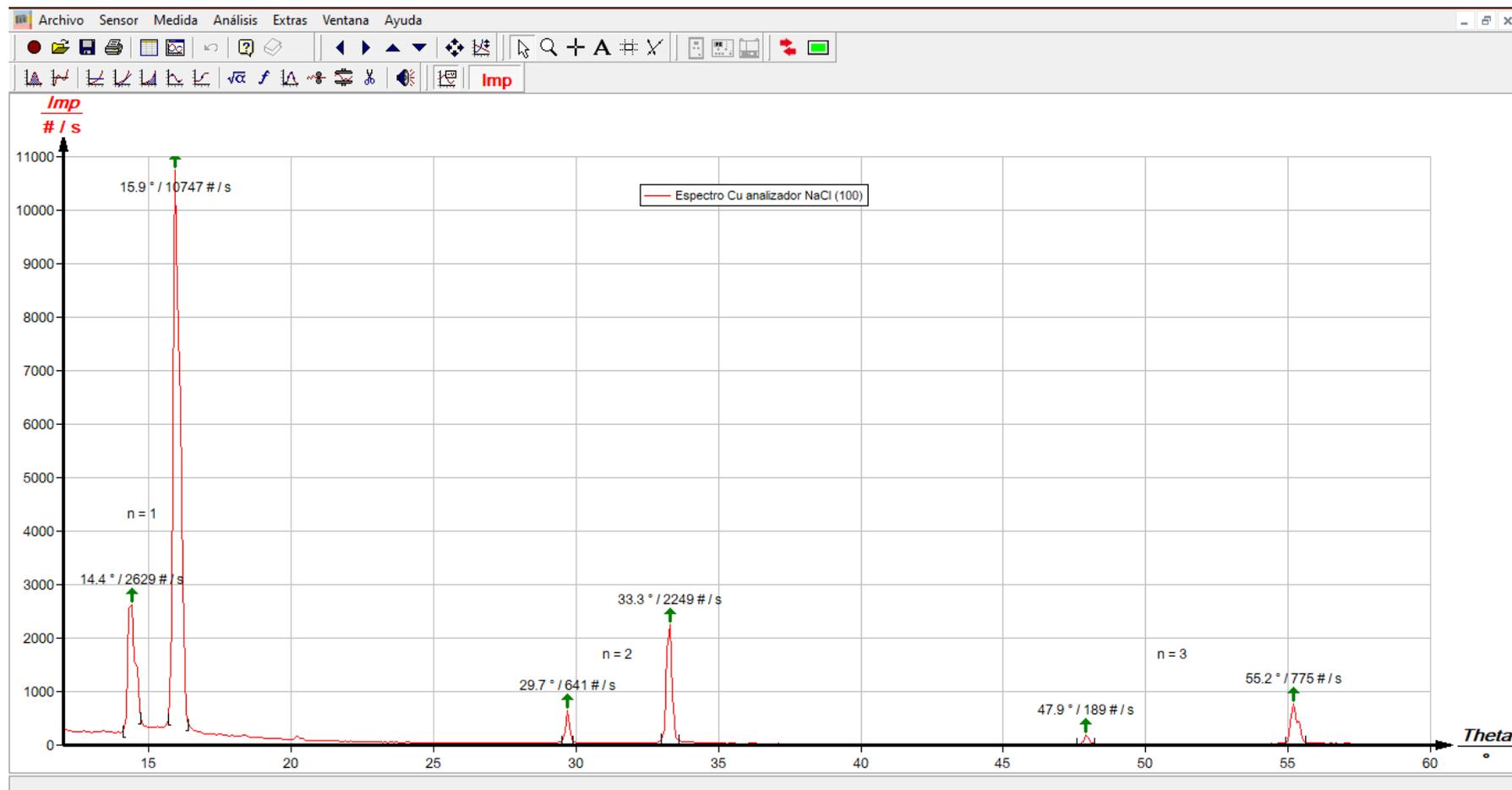


Figura 30. Espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$ y $n = 3$. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

Anexo 2.3

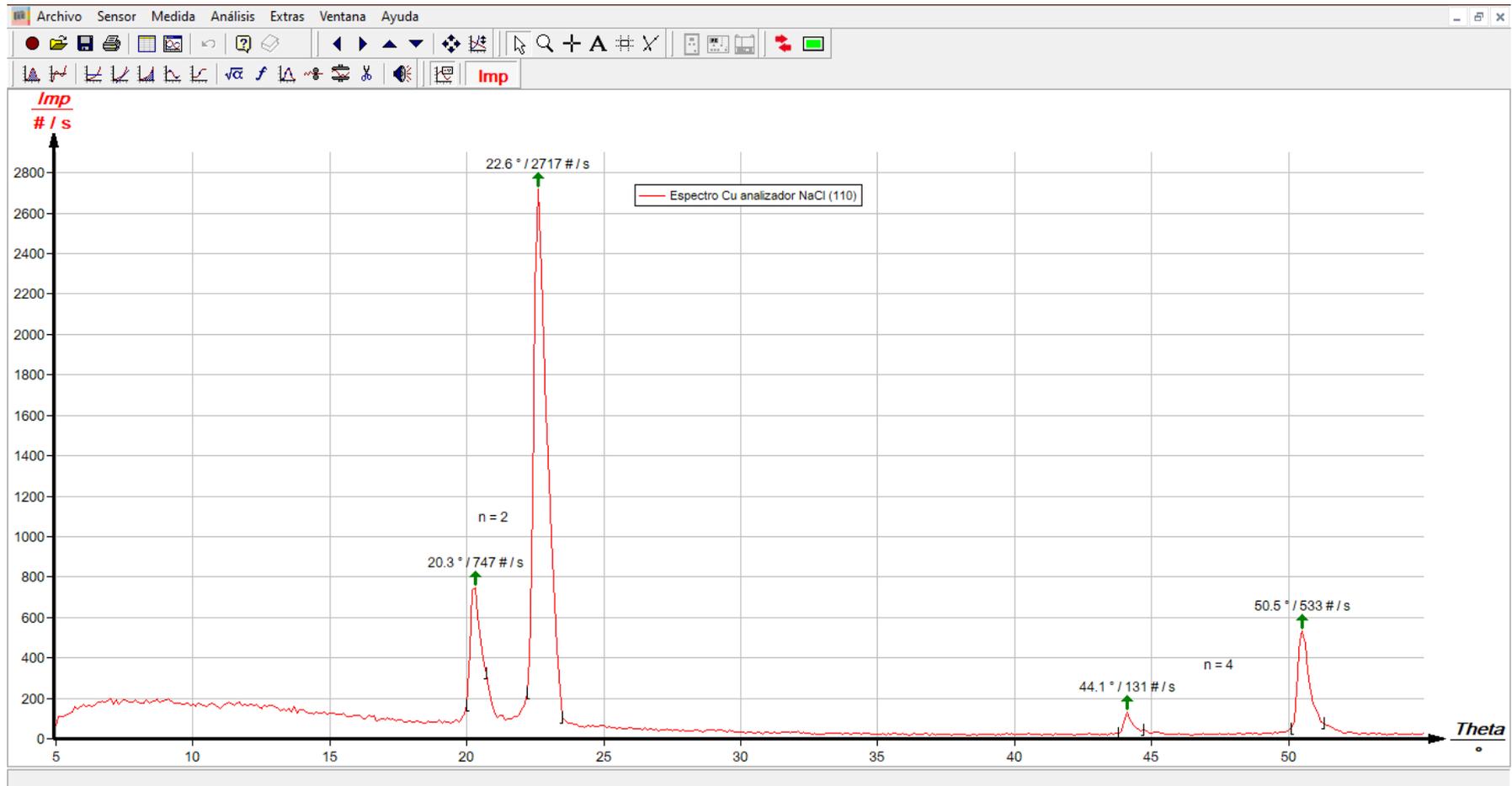


Figura 31. Espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (110) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 2$ y $n = 4$. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

Anexo 2.4

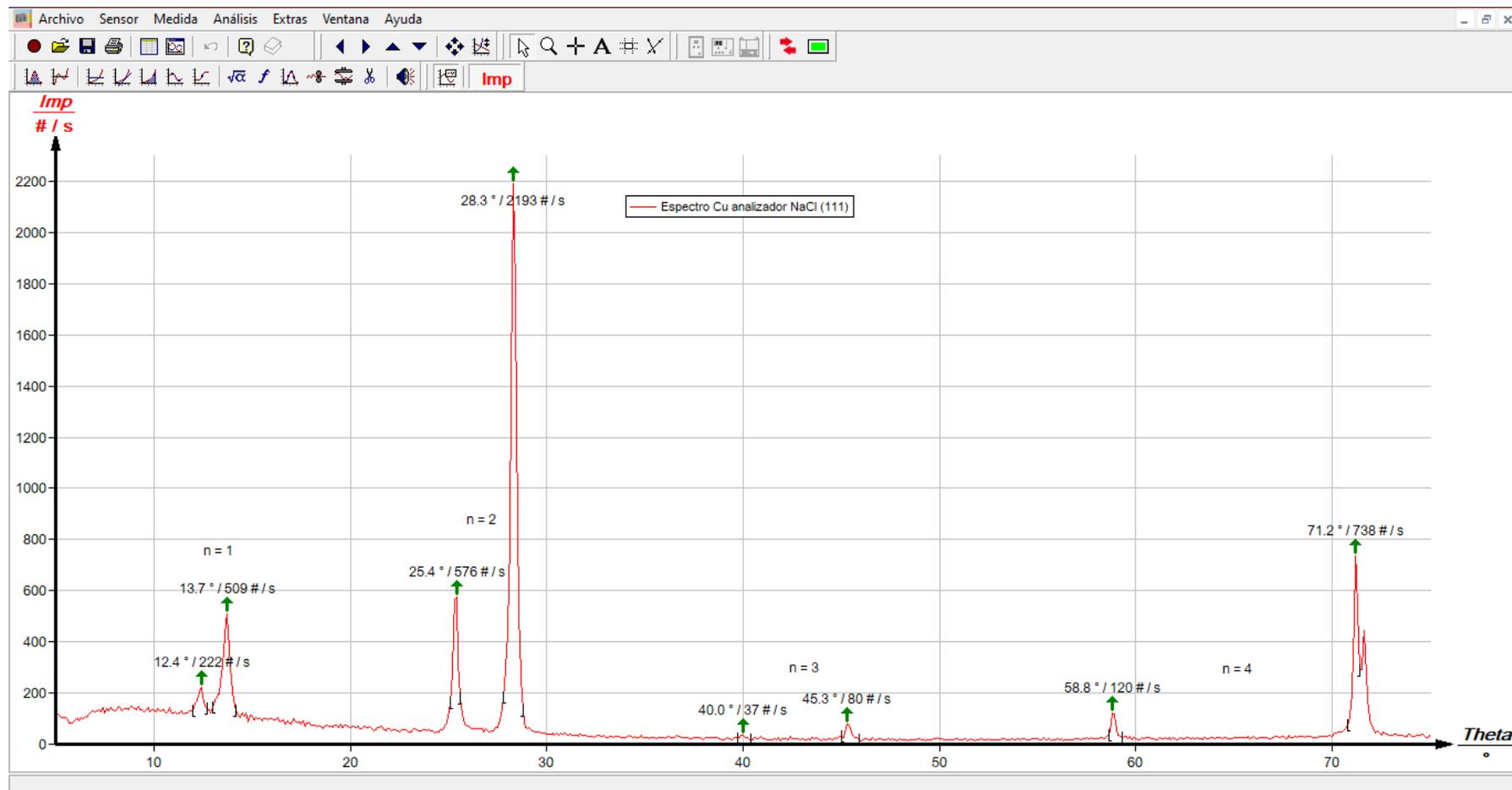


Figura 32. Espectro de emisión del Cobre obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (111) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ y $n = 4$. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

Anexo 2.5

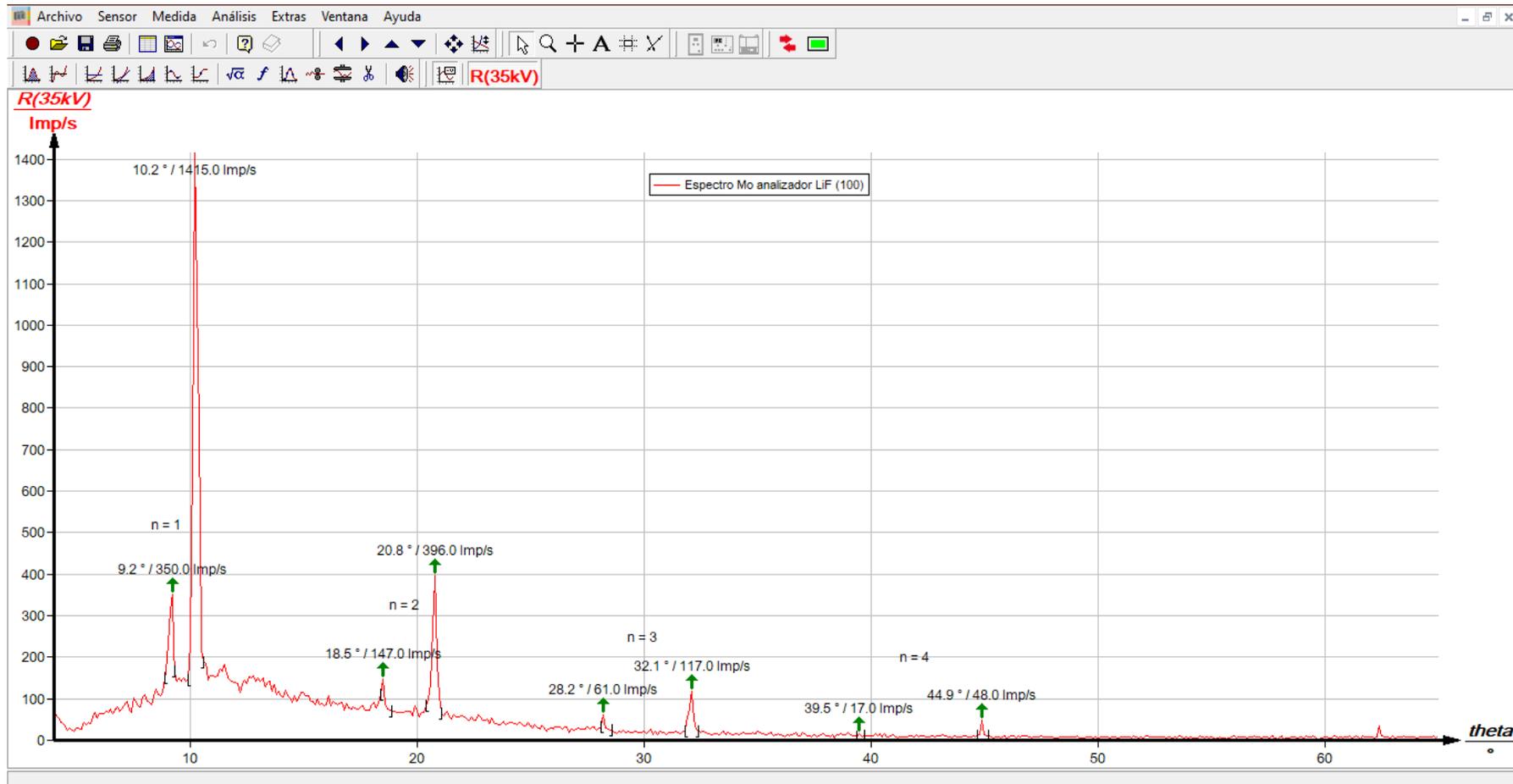


Figura 33. Espectro de emisión del Molibdeno obtenido experimentalmente usando el monocristal de LiF (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ y $n = 4$. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

Anexo 2.6

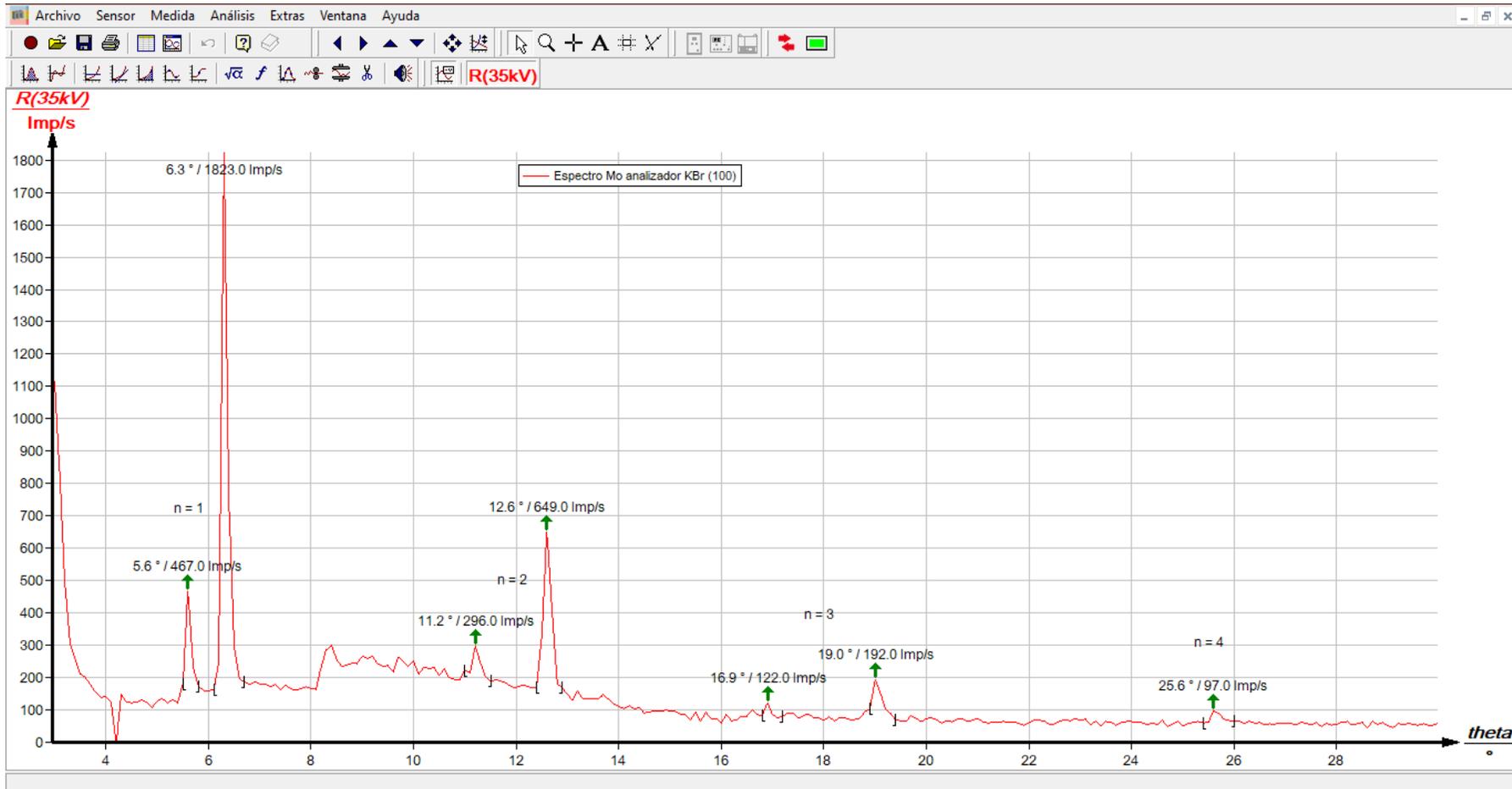


Figura 34. Espectro de emisión del Molibdeno obtenido experimentalmente usando el monocristal de KBr (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ y $n = 4$. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

Anexo 2.7

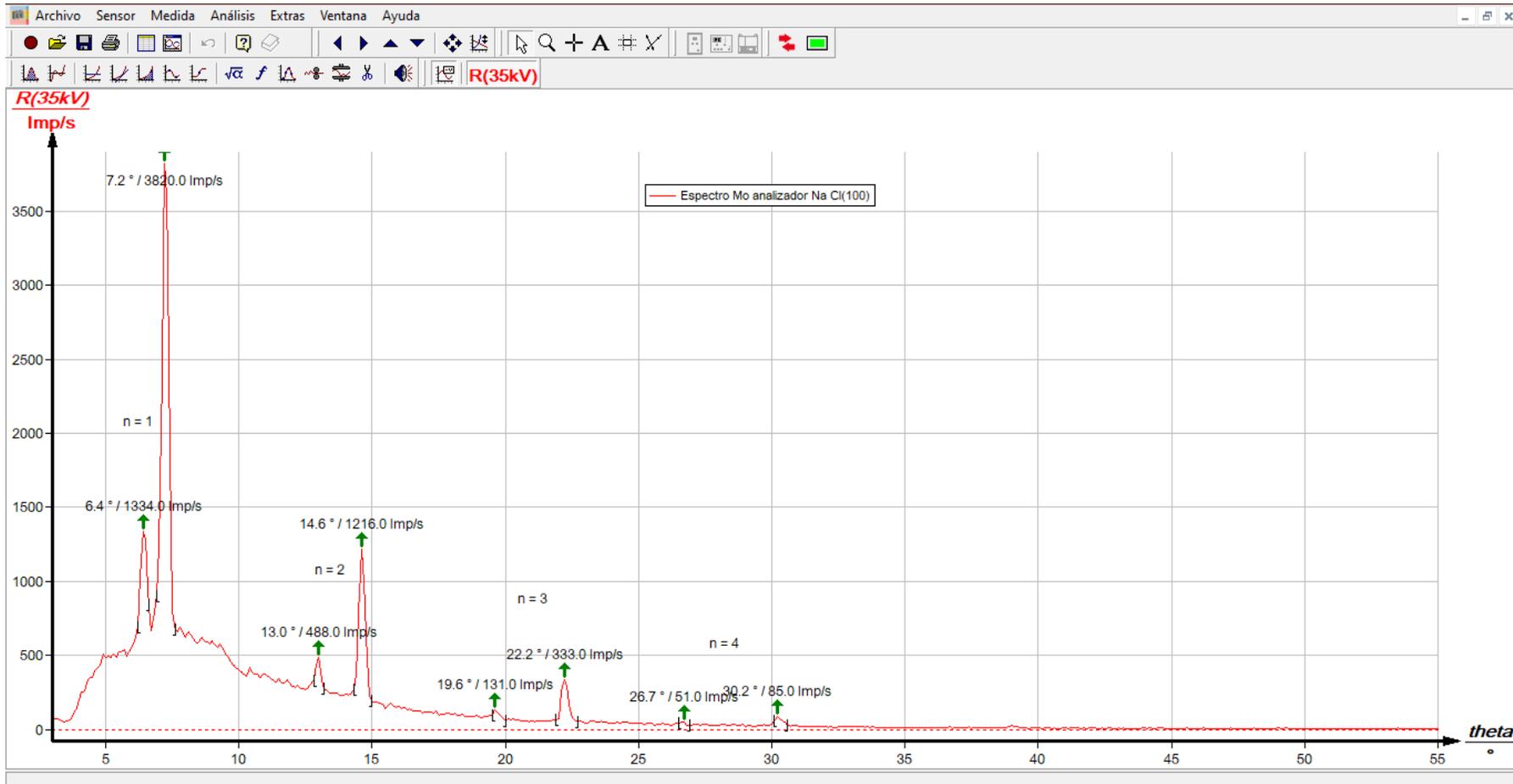


Figura 35. Espectro de emisión del Molibdeno obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ y $n = 4$. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

Anexo 2.8

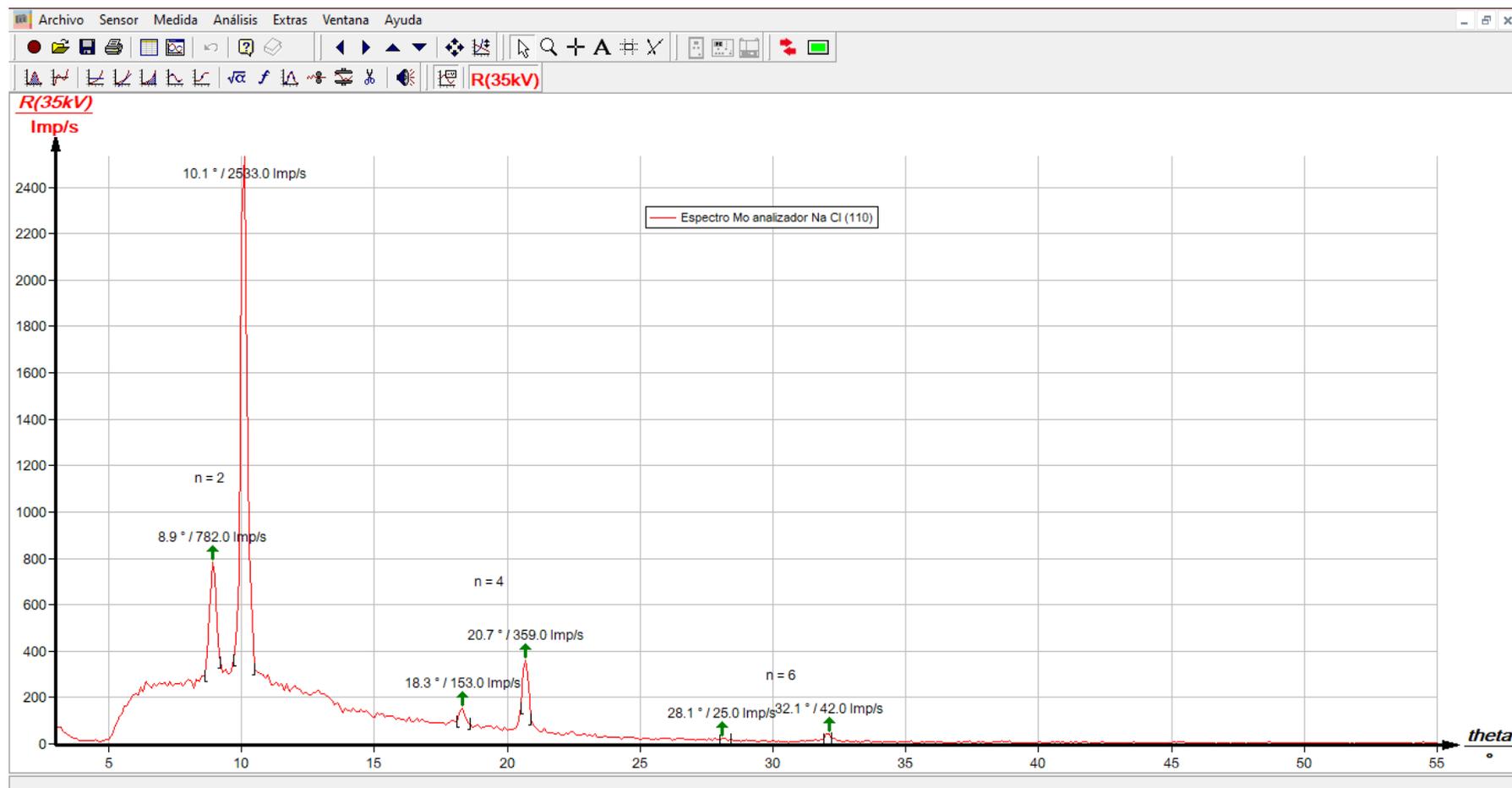


Figura 36. Espectro de emisión del Molibdeno obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (110) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 2$, $n = 4$ y $n = 6$. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

Anexo 2.9

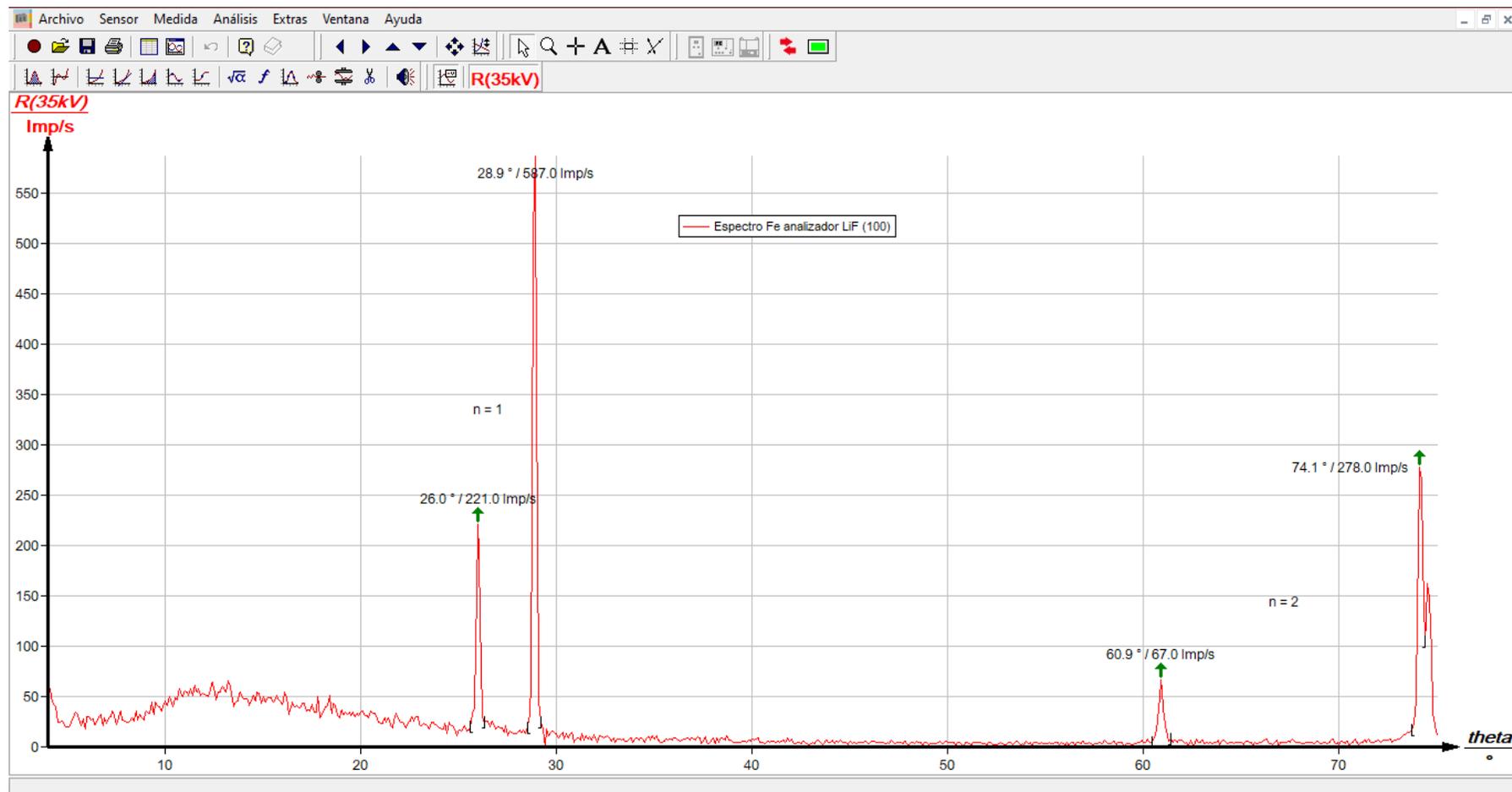


Figura 37. Espectro de emisión del Hierro obtenido experimentalmente usando el monocristal de LiF (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$ y $n = 2$. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora

Anexo 2.10

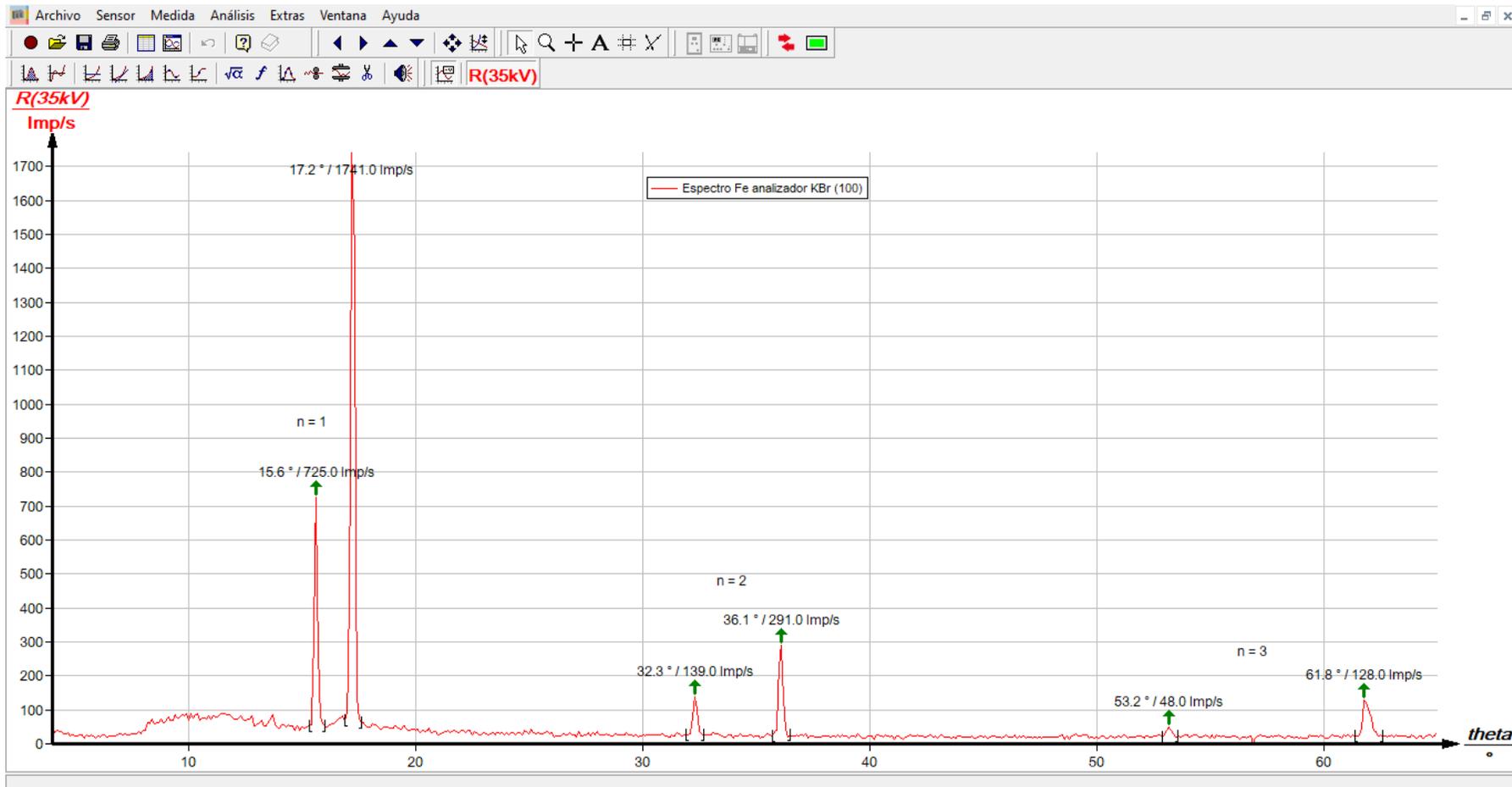


Figura 38. Espectro de emisión del Hierro obtenido experimentalmente usando el monocristal de KBr (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$ y $n = 3$. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

Anexo 2.11

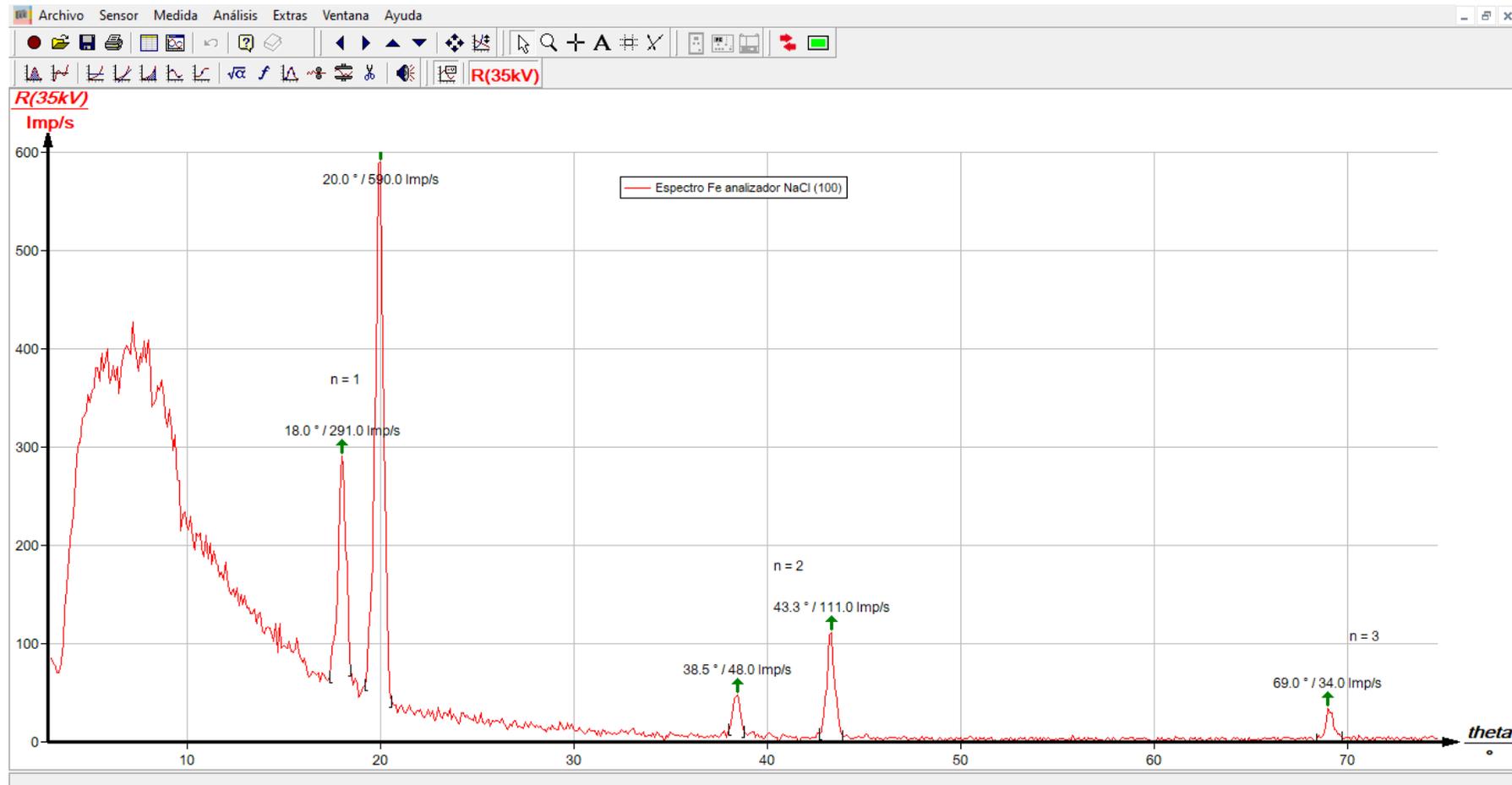


Figura 39. Espectro de emisión del Hierro obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (100) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$ y $n = 3$. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

Anexo 2.12

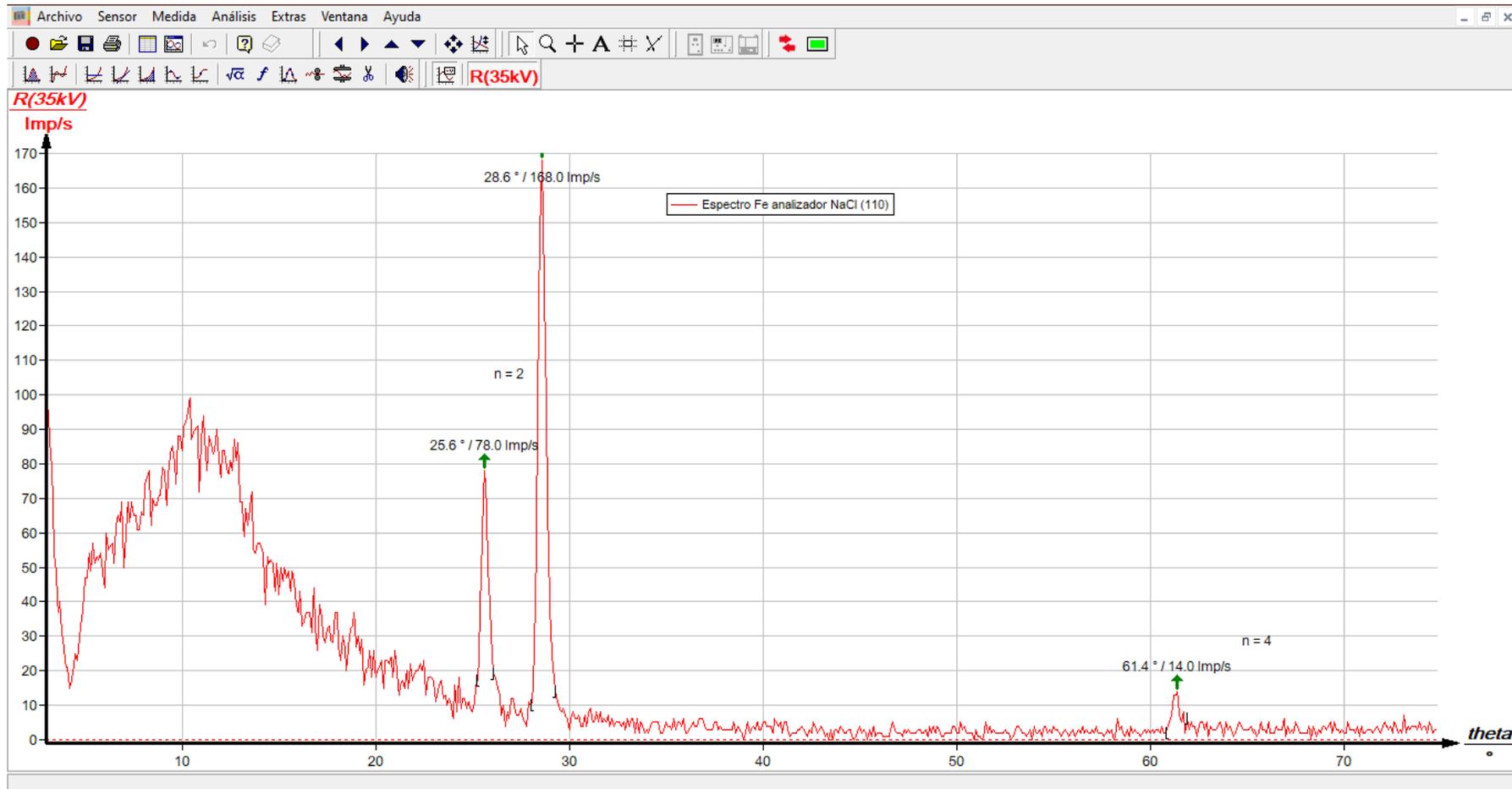


Figura 40. Espectro de emisión del Hierro obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (110) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 2$ y $n = 4$. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

Anexo 2.13

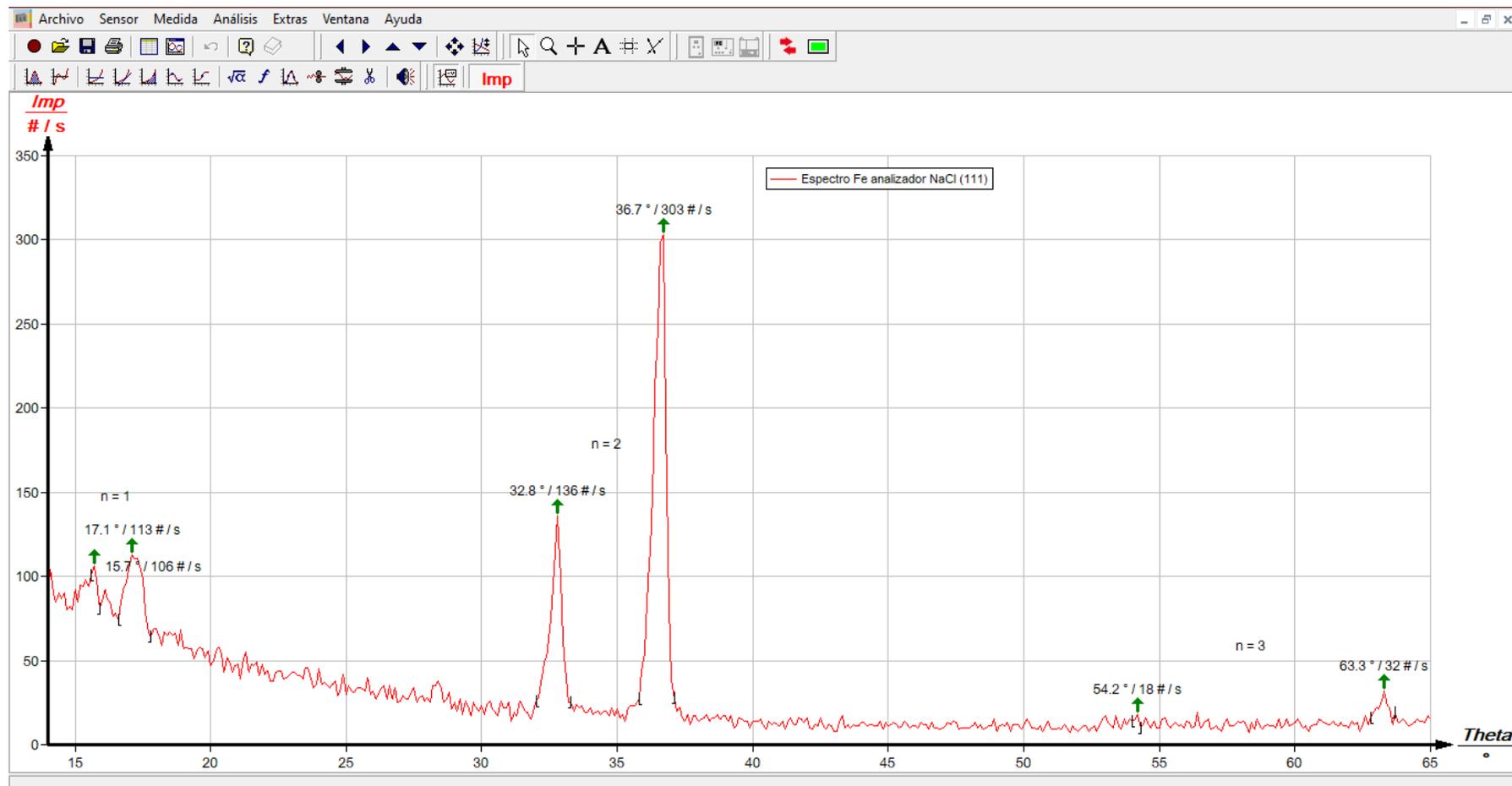


Figura 41. Espectro de emisión del Hierro obtenido experimentalmente usando el monocristal de NaCl (111) mostrando los ángulos de Bragg de los picos de intensidad $K\alpha$ y $K\beta$ correspondientes a los órdenes de difracción $n = 1$, $n = 2$ y $n = 3$. Captura de imagen desde la pantalla del monitor de la computadora.

Anexo 3.

**LONGITUDES DE ONDA Y ENERGÍAS PARA LAS RADIACIONES
CARACTERÍSTICAS**

Radiación	λ (Å)	E (keV)
Ag $K\bar{\alpha}$	0,5608	22,103
$K\beta_1$	0,4970	24,942
Pd $K\bar{\alpha}$	0,5869	21,125
$K\beta_1$	0,5205	23,819
Rh $K\bar{\alpha}$	0,6147	20,169
$K\beta_1$	0,5456	22,724
Mo $K\bar{\alpha}$	0,7107	17,444
$K\beta_1$	0,6323	19,608
Zn $K\bar{\alpha}$	1,4364	8,631
$K\beta_1$	1,2952	9,572
Cu $K\bar{\alpha}$	1,5418	8,041
$K\beta_1$	1,3922	8,905
Ni $K\bar{\alpha}$	1,6591	7,472
$K\beta_1$	1,5001	8,265
Co $K\bar{\alpha}$	1,7905	6,925
$K\beta_1$	1,6208	7,629
Fe $K\bar{\alpha}$	1,9373	6,400
$K\beta_1$	1,7565	7,038
Mn $K\bar{\alpha}$	2,1031	5,895
$K\beta_1$	1,9102	6,490
Cr $K\bar{\alpha}$	2,2909	5,412
$K\beta_1$	2,0848	5,947
Ti $K\bar{\alpha}$	2,7496	4,509
$K\beta_1$	2,5138	4,932

Fuente: Adaptado de Koch, E. (2006). *International Tables for Crystallography. Volume C. Mathematical, physics and chemical tables*. Netherlands, Springer

