

Raios-X. Denominamos raios-X, descobertos por Wilhelm Conrad Roentgen (1845-1923) em 1895, a emissões eletromagnéticas cujos comprimentos de onda são da ordem de grandeza do ångström e cujas energias variam entre alguns keV e algumas centenas de keV. A geração desta energia eletromagnética se deve à transição de elétrons nos átomos, ou à desaceleração de partículas carregadas. E, como toda energia eletromagnética, em vista de sua natureza ondulatória, os raios-X sofrem processos similares àqueles sofridos pela luz, como interferência, polarização, refração, difração, reflexão, entre outros. E embora de comprimento de onda menor do que o da luz, a natureza eletromagnética dos raios-X é idêntica à da luz, ou seja, feixes de raios-X são também constituídos de fótons.

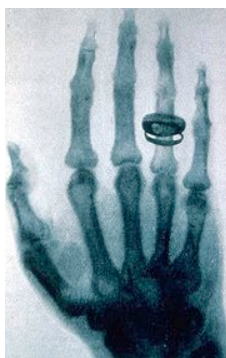


Figura 1: imagem obtida por Röntgen utilizando feixes de raios-X.

Tubo de Crookes. Os raios catódicos são radiações onde os elétrons emergem do pólo negativo de um eletrodo, chamado cátodo, e se propagam na forma de um feixe de partículas negativas (feixe de elétrons) aceleradas em direção a um pólo positivo (ânodo). Este efeito ocorre devido à diferença de potencial existente entre os pólos negativo e positivo no interior de um tubo contendo gás rarefeito e também devido ao efeito termo-iônico, de emissão de elétrons, ocasionado pelo aquecimento do metal que constitui o cátodo. O dispositivo, descrito de forma breve acima, e que possibilita a produção de raios catódicos, chama-se tubo de Crookes e foi desenvolvido por William Crookes (1839-1919). No tubo de Crookes, os raios catódicos produzem a ionização do gás ao atravessá-lo, causando efeitos de luminescência nas paredes de vidro do tubo.

Descoberta dos Raios-X. Wilhelm Conrad Röntgen (1845-1923) descobriu em 1895 os Raios X, quando estudava o fenômeno de luminescência produzido por raios catódicos num tubo de Crookes. Ele desejava saber se raios catódicos propagam-se para fora do tubo de Crookes; a resposta a essa indagação não era possível de ser visualizada a olho nu (e nem com os precários equipamentos disponíveis à época) devido à intensa luminosidade dos raios catódicos. Ao final da tarde do dia 8 de Novembro de 1895, Röntgen estava determinado a testar uma idéia que possibilitaria, segundo ele, esta visualização. Ele envolveu então um tubo de Crookes com uma espécie de capa de papelão, de cor preta, e ficou observando o tubo enquanto aplicava descargas elétricas entre os eletrodos do equipamento. Quando Röntgen ligou o tubo, acostumado que era à visão no escuro, percebeu que uma placa de um material fluorescente chamado platino-cianeto de bário, colocada casualmente perto do tubo, brilhou. Röntgen então desligou

o tubo e o brilho emitido pelo material fluorescente, de forma praticamente instantânea, desapareceu. Ele novamente ligou o tubo, e o efeito de fluorescência voltou a aparecer. Estava claro para ele que este efeito de fluorescência era devido à emissão de algum tipo de radiação produzida pelo tubo de raios catódicos. Mas ele também estava convencido que os raios catódicos não se propagavam para a parte exterior do tubo e, portanto, não poderiam estar provocando esse fenômeno. E o mais surpreendente então ocorreu: o brilho luminescente persistia mesmo quando Rontgen colocava um livro ou uma folha de alumínio entre o tubo e a placa de bário. Röntgen interpretou esse fenômeno como sendo devido a um novo tipo de radiação que seria originada a partir da colisão dos raios catódicos com a parede de vidro do tubo. Desconhecendo a natureza de tais raios, denominou-os raios-X. Apesar da denominação da radiação passar a levar, na Alemanha, o seu nome (raios de Röntgen) ele sempre preferiu a designação de raios-X. Wilhlem Conrad Röntgen recebeu o primeiro Prêmio Nobel de Física em 1901. Seis semanas depois da descoberta, convidou sua esposa para ir ao laboratório e realizar uma imagem dos ossos de sua mão esquerda com seu anel de casamento claramente visível, gerando uma das mais famosas imagens da história da fotografia. Para isto fez com que a radiação atravessasse a mão de sua esposa atingindo uma placa fotográfica.

Produção de Raios-X. O choque do feixe de elétrons com o ânodo (alvo) produz dois tipos de espectros de raios-X: um espectro contínuo, que resulta da desaceleração do elétron durante a penetração no ânodo (efeito de bremsstrahlung), e outro, discreto, denominado de raio-X característico do material do ânodo. O espectro de raios-X resulta portanto da superposição de um espectro contínuo e de uma série de linhas espectrais características do material do ânodo.

Radiação de Freamento (Bremsstrahlung). Elétrons acelerados ou desacelerados podem interagir com átomos em um alvo de muitas maneiras distintas. Há um tipo de processo, onde os elétrons são desacelerados pela interação com os núcleos com a emissão de fótons de energia

$$E = h\nu = K_i - K_f \quad (1)$$

onde K_i e K_f representam as energias cinéticas inicial e final do elétron. Assim, a brusca desaceleração de uma carga eletrônica gera a emissão de um pulso de radiação eletromagnética. Radiação produzida por mecanismos deste tipo é denominada de Bremsstrahlung (radiação de freamento). Elétrons podem produzir inúmeros fótons em processos deste tipo antes de atingirem o repouso. Evidentemente, o fóton mais energético produzido em tais processos corresponde ao caso em que o elétron perca toda a sua energia cinética em uma simples interação, produzindo um fóton cuja energia máxima, é

$$E_{\text{máxima}} = h\nu_{\text{máxima}} \quad (2)$$

tal que sua frequência máxima corresponde a

$$h\nu_{\text{máxima}} = hc/\lambda_{\text{mínimo}} \approx \text{algumas centenas de keV} \quad (3)$$

O processo de bremsstrahlung produz radiação com um espectro contínuo, que apresenta uma frequência ou comprimento de onda de corte que depende do potencial de aceleração.

Espectro de Raios-X Característico. É também possível que os elétrons incidentes excitam os átomos contidos no alvo metálico do tubo de raios-X. Ademais, dependendo da intensidade do potencial de aceleração, os elétrons incidentes podem ter energia suficiente para arrancarem elétrons dos átomos alvo. Se um elétron pertencente a uma camada atômica mais interna for arrancado, o átomo estará em um estado excitado e elétrons de camadas mais externas sofrerão transições atômicas para as camadas mais internas, emitindo radiação no processo. E como as diferenças de energia entre as camadas mais externas e as mais internas são expressivas, a radiação emitida corresponde a faixa de energias de raios-X. Se elétrons da camada K ($n=1$) forem emitidos, elétrons de estados de energia mais altos sofrem transições de modo que, ao final do processo, o átomo retorne ao seu estado fundamental, com os estados de mais baixas energias sendo sistematicamente ocupados, de acordo com o Princípio de Pauli. Neste processo, séries de linhas espectrais discretas de raios-X, correspondentes a uma série de transições, ocorrem, sendo estas linhas espectrais denominadas respectivamente, (ver figura 2) no caso em que $n=1$, por

$$K_{\alpha}, K_{\beta}, K_{\gamma} \dots \quad (4)$$

No caso em que elétrons sejam removidos da camada L ($n=2$), uma nova série de linhas, denominada de série L, é produzida

$$L_{\alpha}, L_{\beta}, L_{\gamma} \dots \quad (5)$$

Similarmente, transições da camada M ($n=3$) produzem a série M

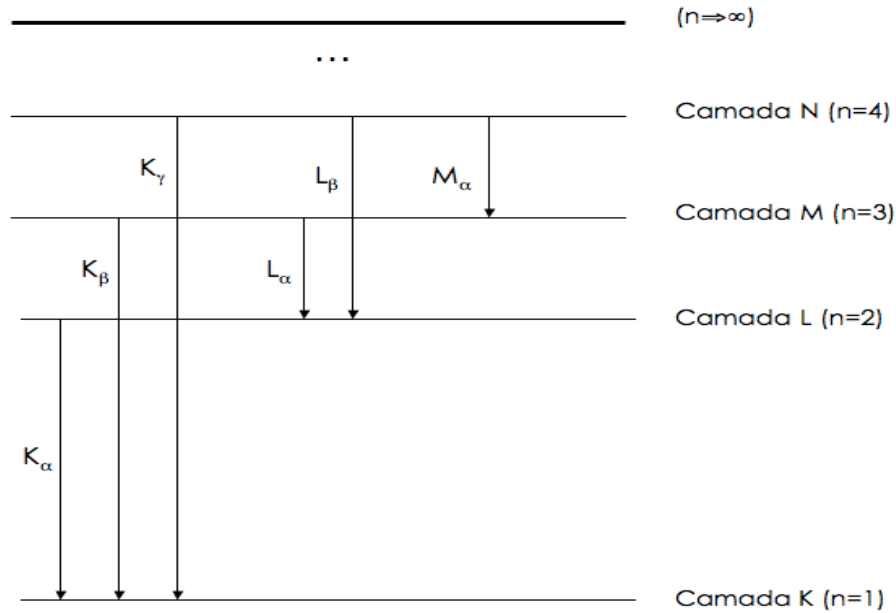
$$M_{\alpha}, M_{\beta}, M_{\gamma} \dots \quad (6)$$

e assim por diante (ver figura 2). Quando o espectro de excitação de átomos de muitos elétrons, devido ao bombardeamento por elétrons, é observado, nota-se a superposição de um espectro suave, de fundo, devido à radiação, contínua, de bremsstrahlung, juntamente com um espectro mais intenso, discreto, produzido pelas transições atômicas do tipo $K_{\alpha}, K_{\beta}, K_{\gamma} \dots$, como mostrado na figura 3. As curvas contínuas apresentam em comum o fato de que há um comprimento de onda mínimo ($\lambda_{\text{mínimo}}$) abaixo do qual não se observa a emissão de raios-X, valor este que não depende do material do ânodo (lembrar efeito fotoelétrico). A observação mais detalhada do espectro de raios-X revela porém uma profusão de linhas espectrais, espaçadas de maneira próxima, que resultam do desdobramento de níveis de energia denominado de estrutura fina (ver figura 4).

Estrutura Fina. Como vimos anteriormente, o chamado acoplamento spin-órbita caracteriza o acoplamento entre o momento magnético de spin do elétron com o campo magnético nuclear atômico. O acoplamento spin-órbita pode ser expresso em termos dos vetores spin e momentum angular orbital do elétron, \mathbf{L} e \mathbf{S} , na forma:

LISTA TEMÁTICA E DE PROBLEMAS No. 7 - Transições Eletrônicas: Raios-X. Aparelho de Raios-X. Produção de Bremsstrahlung. Produção de Espectro de Raios-X Característico. Relação de MOSELEY (HENRY GWIN JEFFREYS MOSELEY (1887-1915)). Absorção de Raios-X. Efeito AUGER (PIERRE VICTOR AUGER(1899-1993)). Fluorescência de Raios-X.

$$E_{sN} = - \mu_s \cdot \mathbf{B}_N = - [- (e/2m) \mathbf{S}] \cdot \chi_{NL} \mathbf{L} = \kappa_{LS} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (7)$$



Transições atômicas de raios-X sem estrutura fina.

Figura 2.

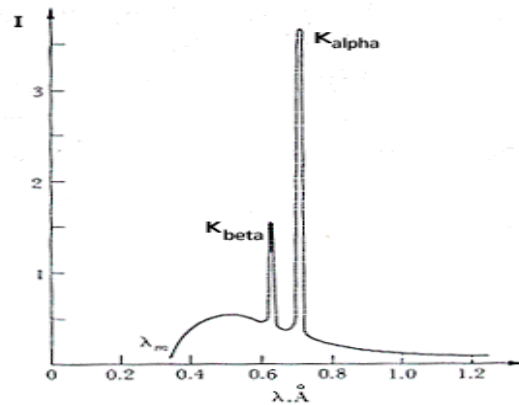


Figura 3

A interação spin-órbita produz assim um tipo de acoplamento semelhante ao do efeito Zeeman, produzindo desdobramentos, em cada nível de energia com $L \neq 0$, em dois sub-níveis, correspondendo estes sub-níveis aos valores da componente do vetor \mathbf{S} na direção de quantização z , S_z , valores estes permitidos pela relação

$$S_z = m_s \hbar \quad ; \quad m_s = s, s-1 = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \quad ; \quad |\mathbf{S}| = [\sqrt{s(s+1)}] \hbar = [\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}] \hbar = [\sqrt{3/2}] \hbar \quad (8)$$

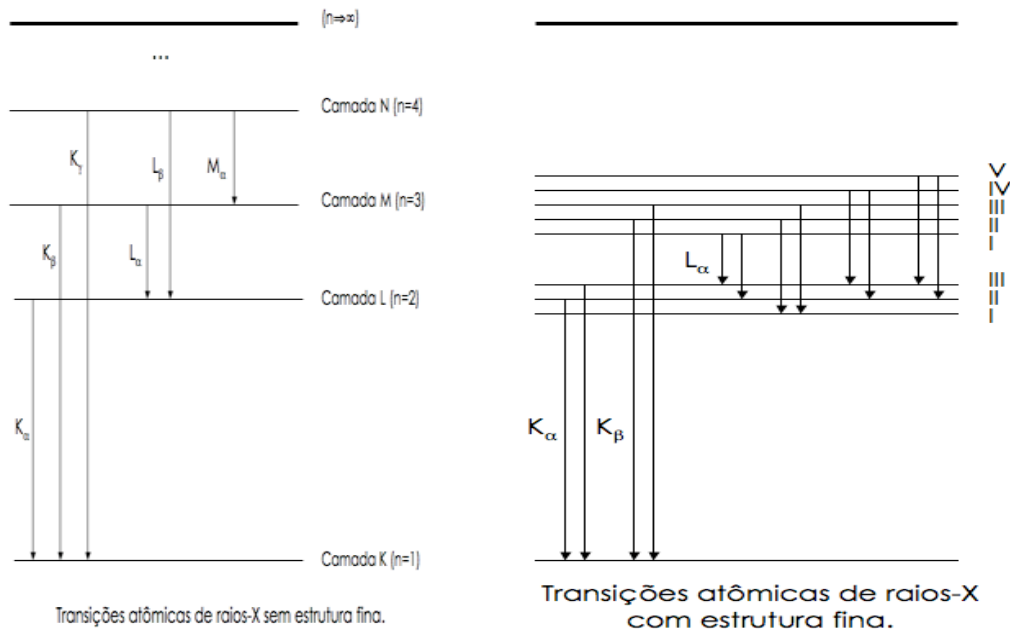


Figura 4

É importante lembrar que as duas orientações do spin \mathbf{S} são referidas, comumente, utilizando a nomenclatura inglesa, na forma spin up ($m_s = 1/2$) e spin down ($m_s = -1/2$). Portanto, há mais níveis atômicos de energia disponíveis para os estados eletrônicos do que aqueles que foram considerados anteriormente no átomo de hidrogênio. Em consequência disso, haverá linhas adicionais no espectro de hidrogênio que não foram anteriormente consideradas. A figura 5 exemplifica estes aspectos. Estas linhas adicionais, chamadas de estrutura fina, podem ser observadas por meio de um espectrômetro, tal que sua resolução possibilite que separações da ordem de alguns ângström em comprimento de onda possam ser observadas. As transições entre estas linhas de emissão resultam portanto da estrutura fina atômica e obedecem as regras de seleção:

$$\Delta J = 0, \pm 1 ; \Delta L = \pm 1; \quad (9)$$

ou seja, transições que não obedecem estas regras de seleção são ditas "proibidas": ou seja, não são observadas no espectro. Essas duas regras devem ser satisfeitas simultaneamente. O fato de que as variações de ΔJ e ΔL são limitadas, em módulo, à zero e à unidade vem do fato de que o fóton tem momentum angular intrínseco igual a $1\hbar$. Como o momentum angular total deve ser conservado no processo de transição, uma variação de momentum angular total do átomo deve ser compensada pela variação correspondente do momentum angular (spin) do fóton, pois como

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (10)$$

então

$$\Delta \mathbf{J} = \Delta \mathbf{L} + \Delta \mathbf{S} \quad (11)$$

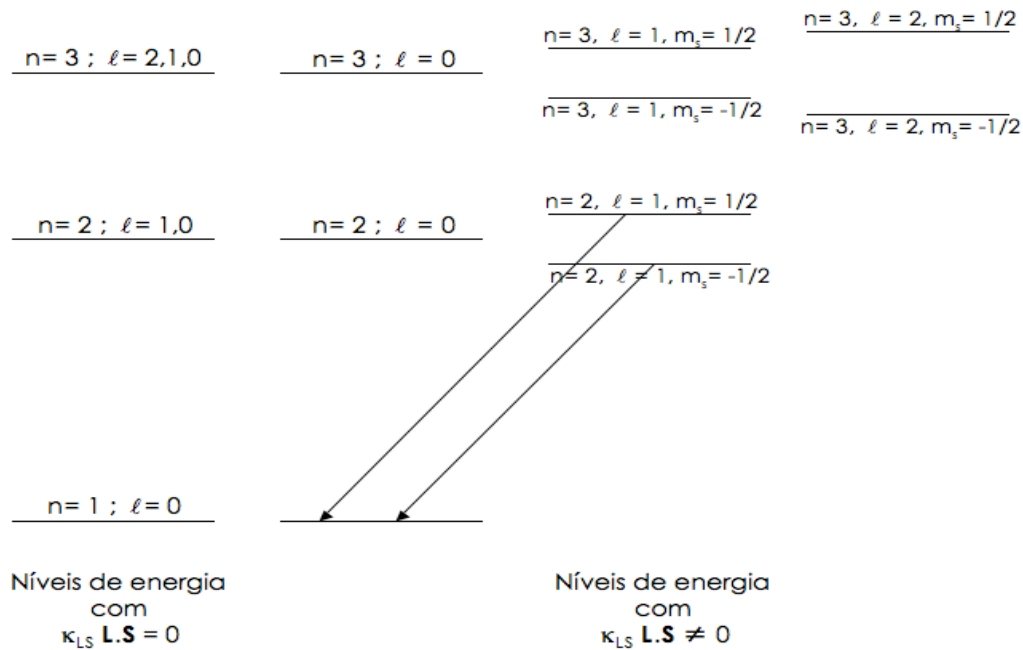


Figura 5

Consideremos dois casos que correspondem à duas situação extremas e que possibilitam a visualização das regras de seleção acima apresentadas. Em vista de que $|\Delta S| = 1$, se $|\Delta J| = 0$, então $|\Delta L| = 1$ e no caso em que $|\Delta L| = 0$, então $|\Delta J| = 1$. Porém a situação em que $|\Delta L| = 0$ não é fisicamente possível; a regra $\Delta L = \pm 1$ vem do fato de que a emissão de radiação de dipolo elétrico, que decorre de uma oscilação do momento de dipolo elétrico da distribuição de carga do átomo, somente ocorre quando os dois estados atômicos, inicial e final, têm paridades diferentes, ou seja, distintos valores de momentum angular. A seguir demonstramos a veracidade esta assertiva.

Dipolo Elétrico Oscilante. O sistema mais simples capaz de irradiar ondas eletromagnéticas é o dipolo elétrico oscilante. O valor esperado do momento dipolar $q\langle x \rangle$, de uma partícula cuja função de onda é dada por Ψ , pode expresso na forma

$$q\langle x \rangle = q \int \Psi^* x \Psi dx \quad (12)$$

No caso em que a função de onda corresponda a um estado estacionário, o valor esperado acima será independente do tempo. No caso porém em que o valor esperado acima corresponda a uma mistura de estados como, por exemplo

$$q\langle x \rangle = q f_0 \cos(\omega_{mn} t) \int \psi_m^* x \psi_n dx \quad (13)$$

em que f_0 representa uma função de amplitude constante, a função $q(x)$ terá termos oscilantes, com freqüência de oscilação dada por ω_{mn} . Nesta expressão, a integral

$$\int \psi_m^* \times \psi_n dx \quad (14)$$

é chamada de elemento de matriz. A integral acima é nula nos casos em que $m = n$, ou seja, nos casos em que ambos os estados tenham idêntica paridade e é diferente de zero nos casos em $m \neq n$. A descoberta da estrutura fina do átomo de hidrogênio concedeu o Nobel de Física à Willis Eugene Lamb em 1955.

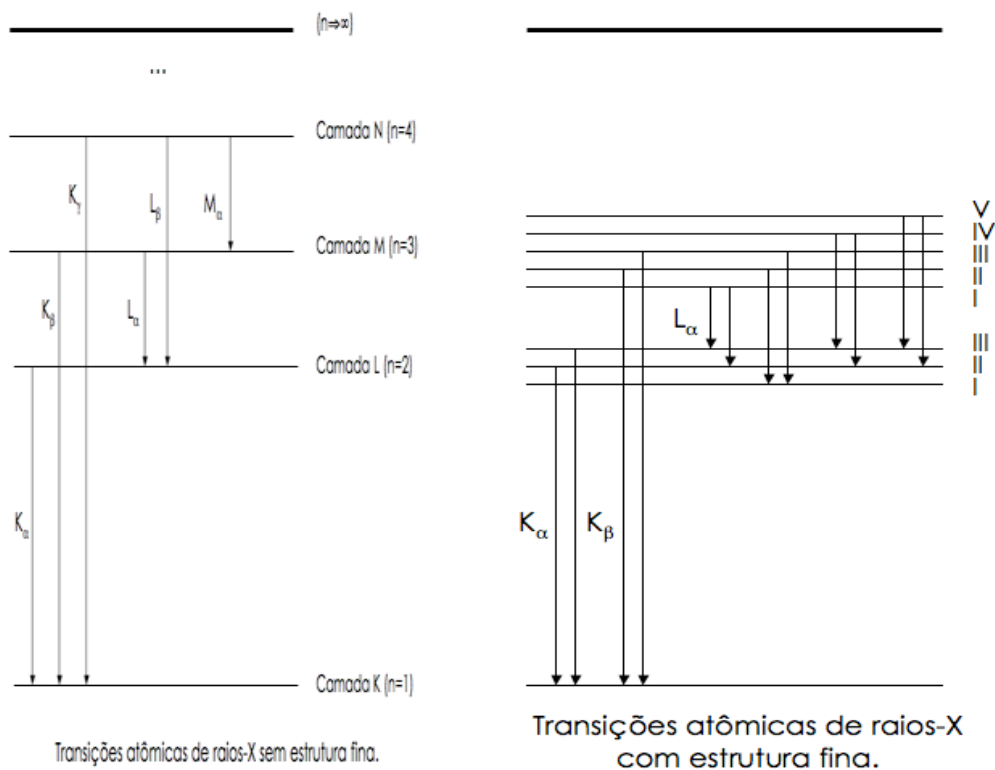


Figura 6

Relação de Moseley. Henry Gwyn Jeffreys Moseley (1887-1915) descobriu, em 1913, que as freqüências ν observadas para emissão de raios-X correspondentes às séries K e L podia ser descrita pela expressão

$$\nu^{1/2} = A(Z - Z_0) \quad (15)$$

onde Z representa o número atômico do material alvo e onde A e Z_0 são duas constantes que dependem da transição particular observada. Para a série K, foi encontrado experimentalmente que $Z_0 = 1$, enquanto que os distintos valores de A variam de maneira

LISTA TEMÁTICA E DE PROBLEMAS No. 7 - Transições Eletrônicas: Raios-X. Aparelho de Raios-X. Produção de Bremsstrahlung. Produção de Espectro de Raios-X Característico. Relação de MOSELEY (HENRY GWIN JEFFREYS MOSELEY (1887-1915)). Absorção de Raios-X. Efeito AUGER (PIERRE VICTOR AUGER(1899-1993)). Fluorescência de Raios-X.

suave ao considerar-se as diferentes linhas de transição K_{α} , K_{β} , K_{γ} ... Para a série L, $Z_0 = 7,4$ e novamente variações suaves de A são encontradas quando se considera as linhas das transições correspondentes L_{α} , L_{β} , L_{γ} ... A forma da expressão acima pode ser encontrada utilizando um modelo do tipo do modelo de Bohr (ver problema 6 desta lista). Em particular, os resultados encontrados correspondem a $A_{K_{\alpha}} = 4,97 \times 10^7 \text{Hz}^{1/2}$ e $A_{K_{\beta}} = 2,14 \times 10^7 \text{Hz}^{1/2}$. Estes valores apresentam boa concordância com os resultados experimentais. E embora a teoria de Bohr descreva sistema atômicos em que os elétrons não interagem entre si, suas previsões para a emissividade de raios-X apresentam boa concordância com os dados experimentais de sistemas atômicos fortemente interagente. A razão para tal reside no fato de que quando um sistema atômico sofre uma transição de fase de um estado gasoso (fracamente interagente) para um estado solidificado (fortemente interagente), por exemplo, os elétrons das camadas mais internas permanecem em estados que são pouco modificados neste processo de transição. E são exatamente estes os elétrons que sofrem transições atômicas que produzem raios-X. Como resultado, o espectro de emissão de raios-X pouca ou nenhuma alteração sofre neste processo de transição de fase. De modo que as previsões do modelo de Bohr continuam válidas.

Absorção de Raios-X. Quando um feixe de raios-X passa por um material, alguns dos fótons do feixe podem ser absorvidos pelo material e são removidos do feixe. Os processos primariamente responsáveis pelo efeito de absorção de fótons em um material, de maneira geral, são: efeito fotoelétrico, espalhamento Compton e produção de pares. Uma vez que os raios-X tem energias máximas da ordem de algumas centenas de keV, não podem produzir pares elétron-pósitron, que requerem um excesso de energia de 1000keV. Assim, o feixe sofrerá redução por apenas os dois primeiros processos, sendo o efeito fotoelétrico o mecanismo dominante.

Redução da Intensidade da Radiação Eletromagnética ao Passar Através de um Material.

A intensidade da radiação eletromagnética que incide sobre um material é reduzida porque fótons do feixe incidente podem ser removidos ou espalhados para direções distintas daquela observada. Isto ocorre, em geral, devido à combinação de diferentes processos físicos como o efeito Compton, o efeito fotoelétrico e a produção de pares. A intensidade da redução obedece a uma lei exponencial do tipo:

$$I = I_0 e^{-\mu x} \quad (16)$$

onde I_0 representa a intensidade da radiação incidente no material, μ denota o coeficiente de absorção linear, que é característico do material absorvedor e x é a espessura ou largura do material. A grandeza μ , que depende do material, varia com a energia ou comprimento de onda da radiação; isto ocorre porque diferentes interações predominam para diferentes energias, mas, para uma dada energia dos fótons, esta quantidade é considerada em geral como constante. A lei exponencial acima pode ser derivada, para um feixe monocromático, da seguinte maneira.

Para uma dada energia, como o fluxo de fótons que incide sobre o material é reduzido, devido aos diferentes processos físicos citados, então o número infinitesimal de colisões, dN , que ocorrem entre os fótons incidentes e os átomos do material, em um distância também infinitesimal, dx , é diretamente proporcional às seguintes grandezas:

- à magnitude do fluxo incidente de fótons, N , porque quanto mais fótons incidem sobre o material, maior a probabilidade de que ocorram colisões destes fótons com os átomos do material;
- à quantidade infinitesimal dN_A de átomos do material contidos na distância infinitesimal dx , pois quanto maior a quantidade de átomos contidos nessa região, maior a probabilidade de que ocorram colisões.
- dN_A é por sua vez proporcional a dx , porque, dada uma certa densidade linear elementar de átomos do material, α , então $\alpha = dN_A / dx$, supondo-se que α é uma constante; então $dN_A = \alpha dx$.

A expressão matemática que relaciona estas grandezas tem como constante de proporcionalidade o coeficiente de absorção linear, μ , tal que:

$$dN = -\mu N dx, \quad (17)$$

sendo o sinal de menos introduzido nesta expressão para representar a redução do fluxo de fótons ao atravessar o material. Desta expressão resulta então, ao integrá-la:

$$\int_{N_0}^N \frac{dN}{N} = -\mu \int_0^x dx, \text{ ou seja, } \ln(N) \Big|_{N_0}^N = \ln N - \ln N_0 = \ln\left(\frac{N}{N_0}\right) = -\mu x, \text{ ou ainda } N = N_0 e^{-\mu x}. \quad (18)$$

Finalmente, tendo em vista que a intensidade de um feixe monocromático é proporcional a N , resulta então a lei exponencial acima considerada.

Problemas

1. Um tubo de TV opera com um potencial de aceleração de 20 kV. Qual é o comprimento de onda do fóton de raio-X mais energético produzido no aparelho de TV? Solução: 0,62Å.
2. Determine o comprimento de onda da linha K_α do molibdênio ($Z = 42$). Solução: 0,709Å.
3. Na relação de Moseley, qual dos valores de A é maior, aquele que corresponde a uma transição K_α ou aquele associado a uma transição K_β ? Solução: para K_β .
4. Um experimento determina as linhas K_α de quatro elementos. Os resultados obtidos são: para o Fe: 1,95Å; para o Co: 1,79Å; para o Ni: 1,66Å; para o Cu: 1,54Å. Determine o número atômico de cada um dos elementos. Solução: 26,27,28,29.
5. Um feixe de elétrons incide sobre um alvo de Mo ($Z=42$). As energias de ligação dos elétrons do caroço no Mo são dadas na tabela abaixo. Calcule os comprimentos de onda das transições possíveis.

Camada	K	L _I	L _{II}	L _{III}	M _I	M _{II}	M _{III}	M _{IV}	M _V
Elétron	1s	2s	2p	2p	3s	3p	3p	3d	3d
Energia de Ligação	20	2,866	2,625	2,520	0,505	0,410	0,393	0,230	0,227

LISTA TEMÁTICA E DE PROBLEMAS No. 7 - Transições Eletrônicas: Raios-X. Aparelho de Raios-X. Produção de Bremsstrahlung. Produção de Espectro de Raios-X Característico. Relação de MOSELEY (HENRY GWIN JEFFREYS MOSELEY (1887-1915)). Absorção de Raios-X. Efeito AUGER (PIERRE VICTOR AUGER(1899-1993)). Fluorescência de Raios-X.

keV									
-----	--	--	--	--	--	--	--	--	--

6. Usando o modelo do átomo de Bohr, determine a relação de Moseley.
7. Explique o significado do termo: crista (ou limiar) de absorção de uma série de linhas. No urânio ($Z=92$), a crista para absorção da série K é $0,107\text{\AA}$ é a linha K_{α} corresponde a $0,126\text{\AA}$. Determine o comprimento de onda do limiar de absorção da série L. Solução: $0,709\text{\AA}$.
8. Um material cuja crista de absorção K é $0,15\text{\AA}$ é irradiado com raios-X de $0,10\text{\AA}$. Qual é o valor máximo da energia cinética dos fotoelétrons que são emitidos da camada K? Solução: $41,3\text{keV}$.
9. Quando raios-X de $0,50\text{\AA}$ colidem com um material, se observa que os fotoelétrons da camada K se movem em um círculo de raio igual a 23mm em um campo magnético de $2 \times 10^{-2}\text{T}$. Qual é a energia de ligação dos elétrons da camada K? Solução: $6,2\text{keV}$.
10. Explique o significado do efeito Auger. O que são elétrons Auger? No Zn ($Z=30$), as energias de ionização (de ligação) das camadas K e L são, respectivamente, $9,659\text{keV}$ e $1,021\text{keV}$. Determine as energias cinéticas dos elétrons Auger emitidos da camada L por raios-X cujas linhas de absorção correspondem a K_{α} . Solução: $7,617\text{keV}$.
11. Que percentual de radiação X incidente passa através de $5,0\text{mm}$ de um material cujo coeficiente de absorção linear é $\mu=0,07\text{mm}^{-1}$? Um feixe monocromático de fótons incide em um material. Se a intensidade incidente é reduzida por um fator 2 ao atravessar $8,0\text{mm}$ deste material, qual é o valor do coeficiente de absorção?
12. Encontre a *largura à meia-altura* de do alumínio se $\mu=0,044\text{mm}^{-1}$. (A *largura à meia-altura* é a largura do material que reduz a intensidade do feixe de fótons à metade de seu valor original de incidência.) Qual é a razão entre a intensidade reduzida e a intensidade incidente de um feixe de fótons após atravessar um material cuja largura é igual a duas vezes a largura à meia-altura?
13. Que largura de alumínio ($\mu_{\alpha}=0,044\text{mm}^{-1}$) é equivalente a uma largura de $6,0\text{mm}$ de chumbo ($\mu_{\alpha}=5,8\text{mm}^{-1}$)? O coeficiente de absorção de um material é dado por $\mu=0,061\text{mm}^{-1}$. Se a intensidade do feixe incidente for I_0 , calcule a largura de material necessária para reduzir o feixe a $I_0/3$.
14. Dado um material com $\mu=0,035\text{mm}^{-1}$ encontre a sua largura a meia-altura.
15. Deduza a lei exponencial de redução da intensidade de um feixe incidente de fótons ao atravessar um material. O coeficiente de absorção linear é realmente uma constante? Discuta esta questão.