

Radiación fluorescente en los estados de hibridación de los orbitales $2s-2p$ (zona Γ) de la estructura monoclinica de la moscovita por efecto de absorción de rayos X

Fluorescent radiation in the hybridization states of the $2s-2p$ orbitals (Γ zone) of the monoclinic structure of Muscovite due to the effect of X-ray absorption

Ómar Rodríguez Pinilla¹

Cómo citar:

Rodríguez Pinilla, Ó. (2021). Radiación fluorescente en los estados de hibridación de los orbitales $2s-2p$ (zona Γ) de la estructura monoclinica de la moscovita por efecto de absorción de rayos X. *Ingeciencia*, 6, 47-59

¹ Docente del Departamento de Ingeniería Electrónica de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Básicas de la Universidad Central. Correo: orodriguezp@ucentral.edu.co

Resumen

El presente artículo muestra los resultados teórico-experimentales del cálculo y la determinación de radiación fluorescente en los estados de hibridación de los orbitales 2s–2p (zona Γ), por efecto de absorción de un haz de rayos X incidente en la estructura monoclinica de una película de 3,6 micras de espesor de una muestra de moscovita. El modelo teórico de cálculo de la intensidad de emisión espectral se basa, inicialmente, en el proceso de ionización de los átomos del material por efecto de los rayos X objeto de estudio y el movimiento de una partícula cargada eléctricamente en una configuración perpendicular de campos eléctrico E y magnético B en la estructura reticular de la moscovita. Luego, se desarrolla el modelo cuántico, en la representación de Dirac, de la influencia de la densidad de estados energéticos de la red del cristal sobre la intensidad de las líneas espectrales de emisión fluorescente. El tubo de rayos X fue conectado a una fuente de 30KV y colimador de 1 mm de diámetro.

Palabras clave: campos electromagnéticos, conductividad eléctrica, operador Hamilton, permitividad eléctrica, voltaje.

Abstract

The theoretical-experimental results of the calculation and determination of fluorescent radiation in the hybridization states of the 2s–2p orbitals (Γ zone) are presented, due to the effect of absorption of an incident X-ray beam on the monoclinic structure of a 3.6 film microns thickness of a Muscovite sample. The theoretical model for calculating the intensity of spectral emission initially develops on the ionization process of the atoms of the material due to the effect of X-Rays, the object of study, and the movement of an electrically charged particle in a perpendicular configuration of electric fields E and magnetic B, in the lattice structure of Muscovite. After this, the development of the quantum model continues, in the Dirac representation, of the influence of the density of energy states of the crystal lattice on the intensity of the spectral lines of fluorescent emission. The X-Ray tube connected to a 30KV source and a 1mm diameter collimator.

Keywords: electromagnetic fields, electrical conductivity, electric permittivity, Hamilton operator, voltage.

Introducción

El modelo clásico teórico que describe el movimiento de un electrón en un sistema de campos perpendiculares entre sí se define como un sistema de ecuaciones acopladas en los ejes (x, z) (Panofski *et al.*, 2005):

$$\begin{cases} \frac{dv_x}{dt} = \left(\frac{eE_x}{m}\right) - v_z \left(\frac{eB_y}{m}\right) \\ \frac{dv_z}{dt} = -\left(\frac{eB_y}{m}\right) v_x \end{cases} \quad (1)$$

Con la representación

$$\begin{cases} w_c = \left(\frac{eB_y}{m}\right) \\ \alpha = \left(\frac{eE_x}{m}\right) \end{cases} \quad (2)$$

Definidas como frecuencia de ciclotrón y aceleración de la partícula.

La ecuación diferencial que representa la solución del sistema (1) es:

$$\frac{d}{dt} \left(v_x + iv_z - i \frac{\alpha}{w_c} \right) = -iw_c \left(v_x + iv_z - i \frac{\alpha}{w_c} \right) \quad (3)$$

Multiplicando esta ecuación (3) por la masa del electrón, se tiene la ecuación del comportamiento del impulso o momento de una partícula generada por los rayos X en el sistema de campos cruzados y, en particular, en la red monoclinica de la moscovita, tal que

$$\frac{d}{dt} \left(p_x + ip_z - im \frac{\alpha}{w_c} \right) = -iw_c \left(p_x + ip_z - im \frac{\alpha}{w_c} \right) \quad (5)$$

En la anterior expresión aparece un término interesante para analizar, el impulso electromagnético que adquiere el electrón en este sistema, como

$$p_{em} = m \frac{\alpha}{w_c} \quad (6)$$

El impulso mecánico del electrón, es decir, la suma de los impulsos en (x, z) , se ve afectado por el impulso electromagnético p_{em} a tal punto que en el momento en que estos dos impulsos lleguen a ser iguales en magnitud, la trayectoria del electrón se verá afectada significativamente por los campos propios de la red de la moscovita.

Reagrupando términos de la ecuación (5), se tiene lo siguiente:

$$\frac{d}{dt} (p_x + ip_z - ip_{em}) = -iw_c (p_x + ip_z - ip_{em}) = -iw_c (p_x + ip_o) \quad (7)$$

Este efecto se puede analizar, después de integrar la expresión (5), utilizando la transformación de

$$p_T = p_{in} e^{-\frac{i\varepsilon_c t}{\hbar}} \quad (8)$$

en la representación $p_T = p_x + ip_o$ y $p_{in} = p_x - im \frac{\alpha}{w_c}$, con $\varepsilon_c = \hbar w_f$ -energía por fluorescencia.

Ya con esta transformación sencilla de la mecánica cuántica, se puede operar la función (7) con la ayuda de la representación del modelo de estados “bra” y “ket” (Dirac, 1939) para utilizarla en la descripción cuántica del efecto de radiación fluorescente por absorción de energía de un haz de rayos X en la celda unitaria monoclinica de la moscovita (figura 2).

Los tres tipos principales de hibridación (combinación de orbitales de 2s con orbitales 2p) del $AlSi_3O_{10}$, base principal de la película, dan lugar a materiales diferentes. En la hibridación sp^2 , el orbital atómico 2s se mezcla con dos orbitales 2p para generar tres orbitales moleculares σ , dispuestos en forma trigonal (Novoselov *et al.*, 2004).

El parámetro de red o distancia entre dos átomos de Si - O consecutivos es de aproximadamente $a \approx 5.19 \text{ \AA}$.

Sus vectores de la red real y recíproca, según Guinea *et al.* (2009):

$$a_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}); a_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3}); b_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}); b_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3}) \quad (9)$$

Cuando un electrón entra acelerado por el campo eléctrico en la red de la moscovita (figura 2), y especialmente en la estructura híbrida (2s-2p) de la celda unitaria (formada por los átomos A [azul] y B [amarillo]), debe existir la probabilidad de emisión fluorescente.

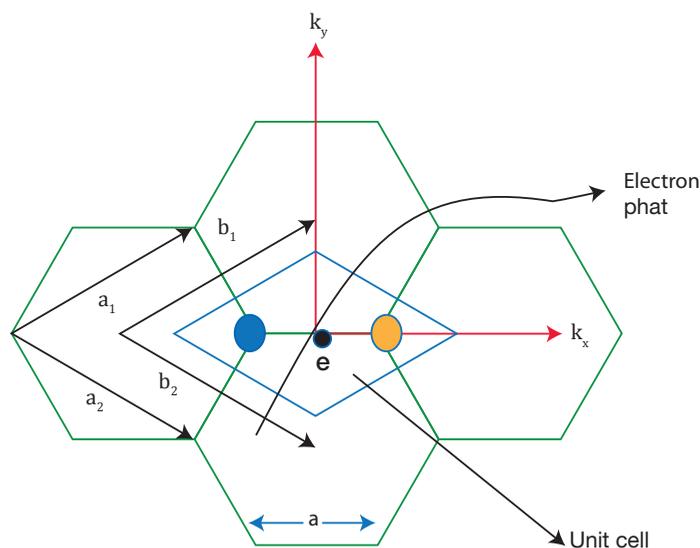


Figura 1. Esquema de la red real con sus vectores y la primera zona de Brillouin de la celda unitaria de la moscovita en el espacio recíproco.

Fuente: elaboración propia.

Los tres orbitales resultantes de la hibridación yacen en un mismo plano formando enlaces de tipo σ en un ángulo de 120° , mientras que el orbital 2p restante se encuentra ortogonal a estos conformando los llamados enlaces π . Estos últimos son los que determinan la estructura de bandas de este material.

Utilizando el modelo teórico propuesto por Feynman (Mermin *et al.*, 1965 y Devedraa Siingh *et al.*, 2015), el comportamiento cuántico de las posibles trayectorias que un portador de carga eléctrica podría elegir entre un punto x_a y x_b en una configuración de campo electromagnético es expresado como

$$\langle x_b; t_b | x_a; t_a \rangle = \langle x_b | \hat{H} | x_a \rangle = \int dx_1 \dots \int dx_j \langle x_b | x_{j+1} \rangle \langle x_{j+1} | p_{j+1} \rangle \langle p_{j+1} | \hat{H} | p_j \rangle \langle p_j | x_j \rangle \langle x_j | x_a \rangle \quad (10)$$

Extendiendo la ecuación (9) a la expresión de integral de operadores de impulso, se tiene que

$$\begin{aligned} \langle x_b; t_b | x_a; t_a \rangle &= \langle x_b | \hat{H}(t) | x_a \rangle \\ &= \int dx_1 \dots \int dx_j \langle x_b | x_{j+1} \rangle \langle x_{j+1} | p_{j+1} \rangle \langle p_{j+1} | \hat{H} | p_j \rangle \langle p_j | x_j \rangle \langle x_j | x_a \rangle \\ &= \int dx_1 \dots \int dx_j \int p_j dp_j e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \langle x_b | x_{j+1} \rangle \langle x_{j+1} | p_{j+1} \rangle \langle p_j | x_j \rangle \langle x_j | x_a \rangle \end{aligned}$$

Donde el hamiltoniano de interacción electromagnético es

$$\hat{H} = \left[\hbar \left(\frac{eBy}{m} \right) + \frac{1}{2m} (\hat{p}_x + i\hat{p}_o)^2 + \frac{1}{2m} \left(m \frac{\alpha}{w_c} \right)^2 \right] \quad (11)$$

El elemento matricial que distingue la acción del operador *momentum* sobre todas las posibles trayectorias del electrón, se define —según Rodríguez y Hernández (2019), Bloch *et al.* (1928, 1946)—, así:

$$\langle p_{j+1} | \hat{H} | p_j \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_c \tau + \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} \left(\frac{m\alpha}{w_c} \right)^2} \int p_j dp_j e^{-\frac{i}{\hbar} p_j^2 \frac{\tau}{2m}} \quad (12)$$

Por su parte, la energía del sistema puede ser expresada como:

$$U^* = -\frac{i}{\hbar} \epsilon_c \tau + \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} \left(\frac{m\alpha}{w_c} \right)^2 \quad (13)$$

Si se integra la ecuación (3), se tiene lo siguiente:

$$\langle p_{j+1} | \hat{H} | p_j \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_c \tau + \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} \left(\frac{m\alpha}{w_c} \right)^2} \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\tau}{2m} \right) \quad (14)$$

Usando los resultados de las integrales de posición, la ecuación (5) permite calcular el factor cuántico de fluctuación de las posibles trayectorias del haz en la red moscovita como

$$\langle x_b; t_b | x_a; t_a \rangle = \sqrt{\frac{2\pi m}{i\tau\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} U^*(x_j)\tau\right) \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\tau}{2m}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar 2\pi} (p_{j+1} - p_j)(x_b - x_a)w_j\tau^2\right) \quad (15)$$

De la expresión (15) se obtiene el factor cuántico de fluctuación de las posibles trayectorias para un haz de carga como

$$F = \sqrt{\frac{2\pi m}{i\tau\hbar}} \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\tau}{2m}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} U^*(x_j)\tau\right) \quad (16)$$

Ahora, en vez de operar el hamiltoniano a través del impulso, se puede hacer la transformación a la representación del operador Nabra, es decir:

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 + \hbar w_c + \frac{1}{2m} \left(m \frac{\alpha}{w_c}\right)^2\right] = \hbar w_c \left[-\frac{\hbar}{2mw_c} \nabla_x^2 + 1 + \frac{1}{2m\hbar w_c} \left(m \frac{\alpha}{w_c}\right)^2\right] \quad (17)$$

Haciendo la transformación a los siguientes operadores:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{q} = i \sqrt{\frac{\hbar}{mw_c}} \frac{\partial}{\partial x} \\ \hat{p} = \sqrt{1 + \frac{1}{2m\hbar w_c} \left(m \frac{\alpha}{w_c}\right)^2} \end{array} \right. \quad (18)$$

La transformación del hamiltoniano de la ecuación (16) será:

$$\hat{H} = \hbar w_c \left[-\frac{\partial^2}{\partial^2 q} + p^2\right] = \hbar w_c \left[\left(-\frac{\partial}{\partial q} + p\right)\left(\frac{\partial}{\partial q} + p\right) + 1\right] = \hbar w_c [(cc^+ + 1)] \quad (19)$$

Los anteriores operadores cc^+ utilizados en la ecuación (19) no son exactamente los operadores escalera, pero representan la probabilidad de crear estados adicionales de energía en la red de la moscovita en los enlaces híbridos (2s-2p), desde los cuales el electrón generado por ionización de material por efecto de los rayos X puede generar radiación fluorescente.

Mediante el factor de fluctuaciones de las posibles trayectorias del haz de electrones, primero, se pone de manifiesto la existencia de la frecuencia de radiación fluorescente producida por el campo magnético perpendicular a la red y, segundo, se puede establecer el comportamiento de la distribución de intensidades de emisión en la red estructural de una película de moscovita con espesor de 3,6 micras establecido en el presente artículo de investigación.

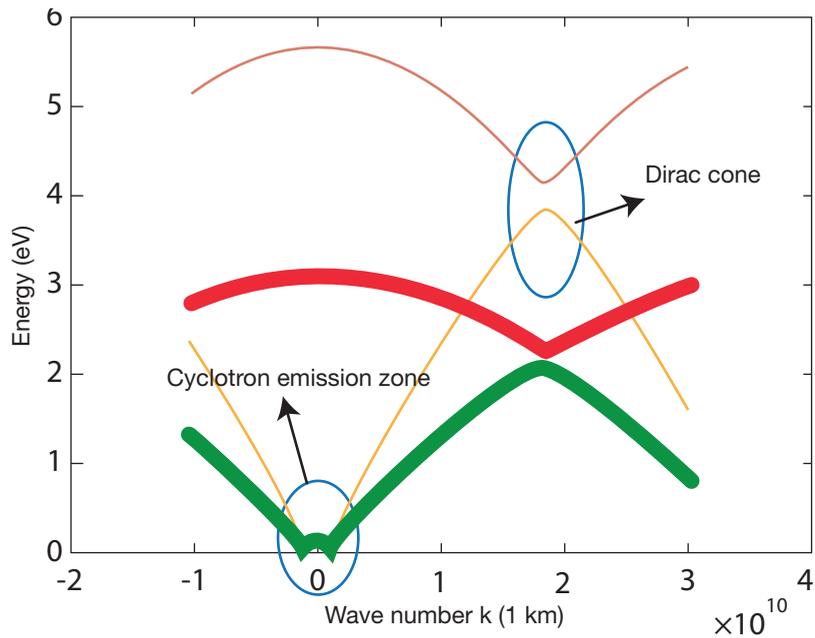


Figura 2. Se presenta la zona de radiación fluorescente en la estructura de bandas de la moscovita cerca del llamado cono de Dirac (1939).
Fuente: elaboración propia.

En la figura 3 se presenta la simulación en la zona de radiación fluorescente en la frecuencia de ciclotrón para un electrón en la estructura de bandas de la moscovita, producida cerca del llamado cono de Dirac y, en especial, en la zona de hibridación de los orbitales 2s–2p (zona Γ). Es probable que en esta región de la celda unitaria de la red de la muestra se presente la superposición de estados y, por ende, el entrelazamiento de las energías de la red y la de los portadores de carga (electrones acelerados por ionización de rayos X). Esto produce un espectro de emisión característico en el rango de los GHz.

Teniendo en cuenta lo anterior, el cálculo de las intensidades de cada línea espectral de emisión se evalúa, según Tarasenko *et al.* (2017), como:

$$F_j = I_j \frac{\lambda_j r_i^2}{\sqrt{32}} \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right) \quad (20)$$

Donde I_j es la intensidad de línea espectral; λ_j , la longitud de onda de la respectiva línea espectral; r_i , el radio de dispersión del haz producido por cada átomo de la red monoclinica de la moscovita en la trayectoria adquirida por los electrones generados por ionización por efecto del haz de rayos X.

Ahora, teniendo presente la estructura reticular de la moscovita, a través de las funciones de Bloch (8 y 9) se puede calcular la incidencia del potencial periódico de la red en la radiación de fluorescencia de los electrones acelerados en la estructura interna del material:

$$\psi(\mathbf{R} + \mathbf{r}) = \exp^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \psi(\mathbf{r}) g_g(\epsilon, \epsilon_F) \quad (21)$$

Para poder encontrar incidencia del potencial, se pueden expresar las funciones de Bloch como una superposición de estados bidimensionales, incluyendo los estados híbridos propios de la red y $g_g(\epsilon, \mathcal{E}_F)$ la densidad de estados energéticos.

$$\psi_j(r) = \sum_j^{N+1} c_{jk} \varphi_k(r-l) \quad (22)$$

En la representación de Dirac (1939), las funciones de Bloch

$$\begin{aligned} |\psi(R+r)\rangle &= |\exp^{ikR}\psi(r)g_g(\epsilon, \mathcal{E}_F)\rangle = |\psi_j(r)\exp^{ikR}g_g(\epsilon, \mathcal{E}_F)\rangle \\ &= \sum_j^{N+1} c_{jk} |\varphi_k(r-l)\rangle \exp^{ikR}g_g(\epsilon, \mathcal{E}_F) \end{aligned} \quad (23)$$

conducen a calcular los estados híbridos entrelazados de la red de la muestra, en los que posiblemente la radiación de fluorescencia, para los electrones acelerados en la red monoclinica de la moscovita, es producida por la incidencia de un haz de rayos X de energía 30KV. Esta representación permite calcular, con la ayuda de los operadores escalera, la creación de estados adicionales.

Aplicando los operadores de creación de estados híbridos descritos en la ecuación (18) sobre la función de Bloch, trae como consecuencia la expansión de la función a través de la densidad de estados energéticos en la banda de conducción, es decir:

$$\begin{aligned} cc^+ |\psi(R+r)\rangle &= cc^+ |\exp^{ikR}\psi(r)g_g(\epsilon, \mathcal{E}_F)\rangle = cc^+ |\psi_j(r)\exp^{ikR}g_g(\epsilon, \mathcal{E}_F)\rangle = \\ &cc^+ \sum_j^{N+1} c_{jk} |\varphi_k(r-l)\rangle \exp^{ikR}g_g(\epsilon, \mathcal{E}_F) \end{aligned} \quad (24)$$

La expresión encargada de demostrar la radiación de fluorescencia en la zona de enlaces híbridos en la red de la moscovita es precisamente el término

$$\frac{1}{2} [-i\delta_{lm}\hbar] \sum_j^{N+1} c_{jk} |\varphi_k(r-l)\rangle \exp^{ikR}g_g(\epsilon, \mathcal{E}_F) = I_j \frac{\lambda_j r^2}{\sqrt{32}} \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right) g_g(\epsilon, \mathcal{E}_F) \quad (25)$$

La ecuación (25), aparte de determinar la intensidad de emisión por ionización, también conduce a calcular el ancho de las líneas espectrales, lo que demostraría la relación momentánea de la estructura reticular de la película con el comportamiento del haz de electrones en estos estados híbridos.

Resultados experimentales

Para tratar de mostrar o identificar la probabilidad de radiación fluorescente por efecto de ionización del material bajo la incidencia de un haz de rayos X en la estructura reticular monoclinica de una película de moscovita, se procedió, primero, por el método de exfoliación mecánica, a obtener una película de 3,6 micras de espesor y luego a hacer pasar por ella un flujo de partículas de rayos X generado por una fuente de tensión de 30KV con colimador de 1 mm de diámetro.

Procedimiento experimental

Una vez obtenido el patrón de difracción de los rayos X en la película (figura 4), se procede a calcular las características estructurales de la muestra (tabla 1).

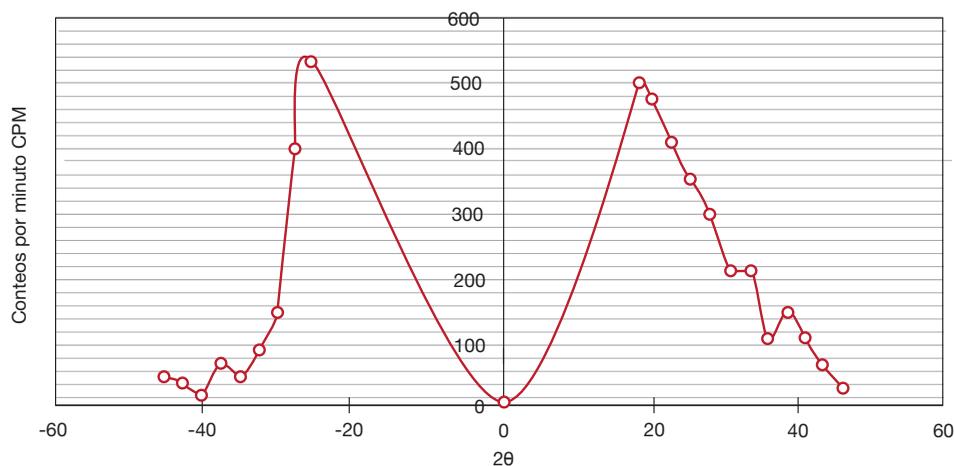


Figura 3. Patrón de difracción de un haz de rayos X, de energía 30KV a través de una película de moscovita de 3,6 μm de espesor, obtenido en el Laboratorio de Sensórica de la Universidad Central.

Fuente: elaboración propia.

Tabla 1. Parámetros estructurales característicos de la película de la moscovita

Ángulo de difracción θ	Distancia entre planos cristalinos d (m)	Parámetros de red (a,b,c) (m)
-22,5	-1,13413E-10	-1,22757E-10
-18,75	-2,70043E-10	-2,85178E-10
-16,25	-4,65298E-10	-4,84661E-10
-13,75	-7,30398E-10	-7,51947E-10
-12,5	-1,00262E-09	-1,02696E-09
8,75	1,71182E-09	1,73198E-09
16,25	1,0857E-09	1,13087E-09
18,75	1,08017E-09	1,14071E-09

Fuente: elaboración propia.

Los valores calculados, tanto de las distancias entre planos cristalinos como de los parámetros de red, fueron desarrollados teniendo en cuenta los ángulos de dispersión 2θ del haz de rayos X (figura 4), de ahí que muchos de ellos sean negativos.

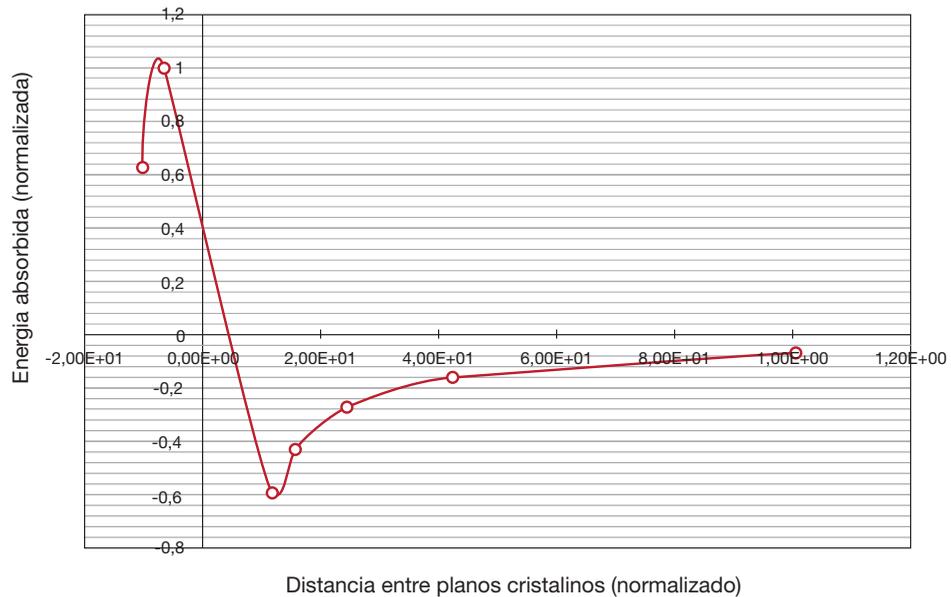


Figura 4. Comportamiento de la energía absorbida por la película de moscovita frente a un haz de rayos X, de energía 30KV. Los valores en los ejes de la gráfica están normalizados.
Fuente: elaboración propia.

El comportamiento de la energía absorbida por la película, frente a la radiación de los rayos X, muestra una tendencia de pendiente negativa o, en términos eléctricos, de reactancia, lo que conduce a pensar que existe una radiación fluorescente generada por los electrones acelerados en la red de la estructura monoclinica de la moskovita y, particularmente, para un ángulo de $(-17$ grados), como se puede apreciar en el comportamiento mismo de la corriente (figura 5). Esta zona se puede definir como zona de repolarización. Otro aspecto importante por resaltar en la figura 4 es el hecho de que la tendencia de la curva de energía absorbida por el cristal describe la superposición de estados energéticos de los orbitales híbridos. El pico inferior de la misma gráfica indica la fase refractiva de la película de la estructura de la moscovita, es decir, la banda reflexiva del material.

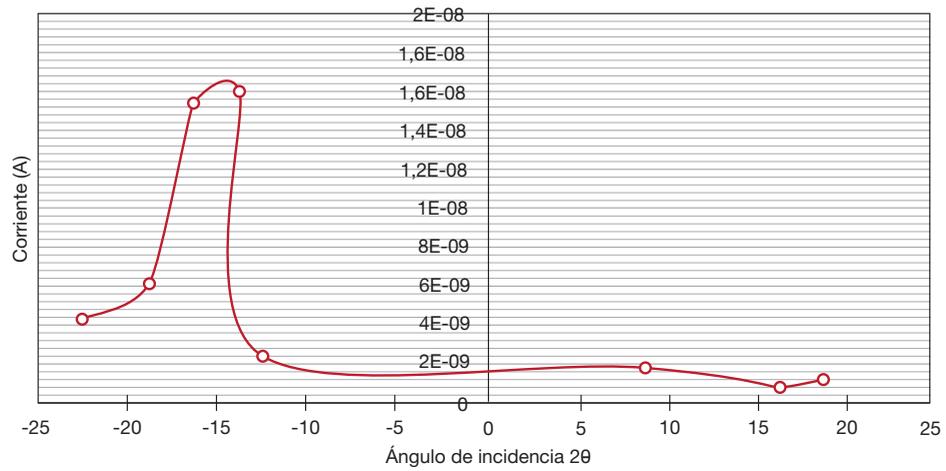


Figura 5. Comportamiento de la corriente generada al interior de la estructura monoclinica de la película de moscovita frente a un haz de rayos X.

Fuente: elaboración propia.

El registro de datos y el procedimiento experimental se realizó para 20 diferentes películas de moscovita con diferentes espesores. No obstante, el comportamiento de la energía absorbida y la corriente generadas al interior de sus estructuras tuvieron la misma tendencia (figura 5).

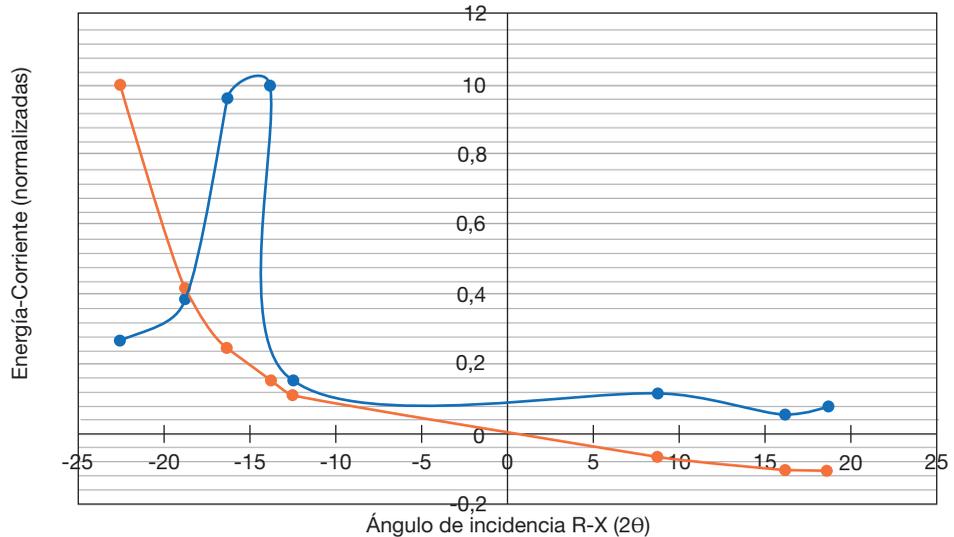


Figura 6. Comportamiento comparativo de la energía absorbida y la corriente generada al interior de la estructura monoclinica de la película de moscovita frente a la incidencia de un haz de rayos X.

Fuente: elaboración propia.

Datos estructurales

En el proceso de cálculo de las demás características estructurales de la película de moscovita, se encontraron las siguientes:

Tabla 2. Parámetros estructurales adicionales característicos de la película de moscovita

Índice de refracción n	Número de electrones promedio generados por ionización	Resistencia de la película R (Ohm)	Coefficiente de absorción másico ρ (kg/m)
1,589	6,81E+12	1,481E+07	1,6530E+06

Fuente: elaboración propia.

Conclusiones

El modelo teórico propuesto en el presente documento para el cálculo de la emisión fluorescente por generación de electrones debida a la incidencia de un haz de rayos X en la estructura monoclinica de una película de moskovita abre un camino interesante para conectar la parte experimental con la teoría de caracterización de materiales dieléctricos, con miras a desarrollar circuitos electrónicos en películas flexibles y transparentes y poder de esa manera construir sensores para diferentes aplicaciones.

Referencias

- Bloch, F. (1928). Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. *Z. Physik*, 52, 555–600.
- Bloch, F. Inducción nuclear. *Physical Review*, 70, 4604–73.
- Bulnes, J. D. (2009). Propagadores cuánticos calculados de acuerdo con el postulado de Feynman con caminos aproximados por polinomios. *Rev. Mex. Fis. E.*, 55(1), 34–43.
- Dirac, P. A. M. (1939). A new notation for quantum mechanics. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 35(3). 416418. <https://doi.org/10.1017/S0305004100021162>
- Guinea, F., Neto, A. C., Peres, N. M., Novoselov, K. S., & Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Reviews of modern physics*, 81(1), 109.
- Mermin, N. D. (1965). Thermal properties of the inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, 137, A1441–1443.
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V. Grigorieva, I. V., & Firsov, A. A. (2004). Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science* 306, 666–669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
- Panofski, W. K. H., & Phillips, M. (2005). *Classical electricity and magnetism*. Dover.

- Rodríguez Pinilla, O., & Hernández, W. (2019). Generation of UV Photons Produced by Lightning in Vacuum Conditions: Electrodinamic Model of Near Field. *EJERS, European Journal of Engineering Research and Science*, 4(9), 78-80.
- Siingh, D., Singh, R., Kumar, S., Dharmaraj, T., Singh, A. K., Patil, M., & Singh, S. (2015). Lightning and middle atmospheric discharges in the atmosphere. *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 134, 78-101. <https://doi.org/10.1016/j.jastp.2015.10.001>
- Tarasenko, V., Zhang, C., Baksht, E., Burachenko, A., Shao, T., Beloplotov, D., Lomaev, M., Yan, P., Kozyrev, A. & Semeniuk, N. (2016). Review of supershort avalanche electron beam during nanosecond-pulse discharges in some gases. *Matter and Radiation at Extremes*, 2(3), 105e116.