

ELEMENTOS DE CÁLCULO DOSIMÉTRICO PARA HADRONTERAPIA Y CAMPOS MIXTOS

Mauro Valente^{1,2*}

¹ CONICET, Av. Rivadavia 1917, Buenos Aires; Argentina

² Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria; Argentina

Primer Semestre de 2022



Facultad de Matemática, Astronomía y Física (FaMAF)
Universidad Nacional de Córdoba (U.N.C.)

*Contacto e-mail: valente@famaf.unc.edu.ar , URL: <http://liifamirx.famaf.unc.edu.ar/>

Prefacio

Elementos de cálculo dosimétrico para hadronterapia y campos mixtos es un curso, original y completamente elaborado por Mauro Valente en 2010, re-editado en 2011, 2012, 2014 y la presente versión 2022, con innovaciones y actualizaciones. El trabajo está dedicado a formalismos y metodologías para el área específica en física médica de transporte y colisión de hadrones y dosimetría avanzada. Es un trabajo con exposición de fundamentos teóricos y prácticos de aplicación destinados a ejercitar los contenidos formales en situaciones prácticas de interés para la física médica.

El contenido incluye elementos de interacción de radiación con la materia, tanto a nivel atómico como nuclear incorporando descripciones de procesos físicos y modelos de algunos mecanismos de interacción de interés para el ámbito de la física médica, como interacción de fotones, electrones, protones, iones más pesados y neutrones con material biológico. La modalidad de la exposición está enfocada en el estudio y caracterización de los efectos de la interacción de la radiación con material biológico.

El trabajo proporciona teoría, técnicas determinísticas y estocásticas y herramientas de cálculo para abordar el estudio de los procesos de transporte e interacción de radiaciones para modelar procedimientos de terapia de radiaciones, radio-diagnóstico y medicina nuclear con énfasis en dosimetría avanzada.

Se proporciona la base teórica y destrezas prácticas para comprender e implementar procedimientos de deconvolución dosimétrica de campos mixtos de radiación ionizante. Asimismo, se incursiona en aspectos básicos de radiobiología y procesamiento de imágenes para lograr la descripción completa de los procesos y efectos de la radiación en material biológico.

Esquema del programa

Primera parte: Formalismos y Fundamentos teóricos

1. Propiedades generales del núcleo.
2. Modelos nucleares.
3. Dispersión neutrón-protón, neutrón-neutrón y protón-protón en diferentes rangos energéticos.
4. Radioactividad natural.
5. Reacciones nucleares y decaimientos α , β y γ .
6. Interacción de partículas cargadas con material biológico.
7. Aceleradores de partículas y procesos de fisión y fusión nuclear.
8. Activación neutrónica.
9. Detectores de radiación.
10. Conceptos básicos de procesos estocásticos.
11. Rudimentos de programación en lenguaje F77 y uso de plataforma MatLab.
12. Simulación Monte Carlo aplicada al transporte de radiación.
13. Elementos básicos sobre técnicas de procesamiento de imágenes en ámbito médico.
14. Teoría dosimétrica en presencia de campos electromagnéticos externos.

Segunda parte: prácticos y aplicaciones

1. Datación arqueológica con técnicas de ^{14}C .
2. Transporte y depósito de energía para haces de protones.
3. Transporte y depósito de energía para haces de neutrones.
4. Cálculo de blindajes para radioprotección.
5. Detectores de radiación estudiados con técnicas Monte Carlo.
6. Dosimetría de haces mixtos: Aplicación a columnas térmicas y epitérmicas de neutrones de BNCT.
7. Producción y uso de radiofármacos.
8. Formación y procesamiento de imágenes de radiodiagnóstico.
9. Reconstrucción tomográfica.
10. Medicina nuclear: cámara gama, SPECT y PET.
11. Elementos de dosimetría interna.
12. Modelos radiobiológicos: LQ, TCP, NTCP y efecto de LET.
13. Efectos derivados de la presencia de campos electromagnéticos externos en sistemas dosimétricos, aplicaciones a MRI-LINAC *Image Guided RadioTherapy*, IGRT.

Carga horaria

Se prevé el dictado del curso durante un semestre completo y con una carga horaria semanal de 8 horas, distribuidas del siguiente modo: 4 horas semanales de teórico, 2 horas semanales dedicadas a la puesta en práctica de elementos computacionales y 2 horas semanales para prácticos y ejercitación. De este modo, se proyecta un cantidad de 32 horas mensuales (sobre una base de 28 días) y un total integral de 128 horas de cursado (sobre la base de 16 semanas lectivas).

Modalidad de examen

La modalidad de evaluación, propuesta y aprobada por la Secretaría de posgrado de FaMAF consta de 2 (dos) exámenes parciales relativos a la primera parte del curso (fundamentos teóricos), la profundización y presentación escrita y oral de un práctico de aplicación del curso y la realización de un examen final formal individual e integrador de los contenidos del curso, en modalidad escrita.

Índice

1.. Propiedades generales del núcleo atómico	9
1.1.. Evolución del modelo nuclear	9
1.2.. Evidencia experimental en el desarrollo histórico de la física nuclear	10
1.2.1.. Separación electromagnética de iones	10
1.2.2.. Abundancia natural de isótopos	10
1.3.. Separación de isótopos	11
1.4.. Estabilidad nuclear	11
1.5.. Características de las fuerzas nucleares	12
1.6.. Compendio de propiedades nucleares	13
1.7.. Masa y energía de ligadura nuclear	14
1.8.. Barrera de potencial nuclear	15
1.9.. Modelo nuclear de Von Weizsäcker	16
1.10.. Spin y momentos nucleares	17
1.11.. Ejercitación del Capítulo I	20
1.11.1.. Conceptos básicos de programación	20
1.11.2.. Haz de partículas cargadas en campo magnético	20
1.11.3.. Estabilidad y propiedades del núcleo	21
2.. Problema de dos cuerpos a baja energía para nucleones	23
2.1.. Deuterón en potencial central	23
2.2.. Scattering $n^0 - p^+$	24
2.3.. Scattering $p^+ - p^+$	26
2.4.. Comparación del modelo con datos experimentales	28
2.5.. Apéndice: Revisión de potenciales cuánticos	28
2.6.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo 3.	31
2.6.1.. Análisis de elementos de estadística y conceptos básicos de modelos nucleares	31
3.. Problema de dos cuerpos a energías intermedias	33
3.1.. Scattering $n^0 - p^+$ para energías entre 10 y 30 MeV	33
3.2.. Scattering $n^0 - p^+$ para energías superiores a 30 MeV	35
3.3.. Scattering $p^+ - p^+$ para altas energías	35
3.4.. Modelo de Yukawa de intercambio de piones	37
3.5.. Cálculo de Secciones Eficaces de interacción $n^0 - p^+$ a energías intermedias	38
3.6.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo refProblemadados- cuerposaenergiasintermedias	41
3.6.1.. Scattering de nucleones	41
4.. Corrimiento de fase como evidencia de scattering $n^0 - p^+$	42
4.1.. Ecuación integral del Scattering	42
4.2.. Ondas parciales en potencial $V(r)$ y corrimiento de fase	44
4.3.. Cálculo de la sección eficaz	45
4.4.. Estado fundamental del deuterio 3S_1	46
4.5.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo IV	47
4.5.1.. Corrimiento de fase y sección eficaz	47

5.. Tracking de partículas y transporte de radiación	48
5.1.. Repaso de colisión entre partículas cargadas	48
5.2.. Transporte de radiación y metodologías de integración numérica	48
5.2.1.. Técnicas numéricas Monte Carlo para evaluar integrales definidas	49
5.2.2.. Cantidades importantes en transporte de partículas	49
5.2.3.. Tracking y etapas en el modelado de transporte de radiación	50
5.3.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo V	51
5.3.1.. Cálculo de integrales definidas y tracking de partículas	51
6.. Radioactividad natural y decaimiento nuclear	52
6.1.. Teoría continua: una substancia	52
6.2.. Teoría continua y <i>Branching</i>	52
6.3.. Unidades de Radioactividad y aspectos dosimétricos	55
6.4.. Teoría general de Radioactividad	55
6.5.. Decaimiento nuclear alfa	56
6.5.1.. Estructura del espectro de emisión alfa	58
6.5.2.. Ligadura virtual	59
6.6.. Decaimiento nuclear beta	62
6.6.1.. Medición de energías de rayos β	63
6.6.2.. Teoría de la emisión β	64
6.6.3.. Teoría de Fermi de la Emisión β	64
6.6.4.. Decaimiento muónico	66
6.6.5.. Evidencia sobre Neutrino-Antineutrino	67
6.6.6.. Conservación de la paridad en emisión β	68
6.7.. Decaimiento nuclear Gamma	69
6.7.1.. Reglas de Selección y Probabilidad de transición Gamma	71
6.8.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo VI	73
6.8.1.. Radioactividad y decaimiento nuclear	73
7.. Reacciones nucleares y fuentes de neutrones	74
7.1.. Introducción y generalidades de reacciones nucleares	74
7.2.. Canales nucleares de reacción	76
7.3.. Relaciones energéticas	76
7.4.. Sección eficaz para neutrones	77
7.5.. El modelo de núcleo compuesto	79
7.6.. Núcleo compuesto y experimentos	80
7.7.. Teoría de dispersión de Breit-Wigner	80
7.8.. Estados nucleares de excitación	81
7.9.. Reacciones Foto-nucleares	83
7.10.. Reacciones nucleares con iones pesados	84
7.11.. Fuentes de neutrones	86
7.12.. Termalización (<i>slowing down</i>) de neutrones	86
7.13.. Fisión y fusión nuclear: conceptos básicos	88
7.14.. Reacciones nucleares inducidas por neutrones	89
7.14.1.. Energías bajas e intermedias para núcleos intermedios	89
7.14.2.. Energías bajas para núcleos pesados	89
7.14.3.. Energías intermedias para núcleos pesados	89
7.14.4.. Energías altas para núcleos pesados e intermedios	89
7.14.5.. Energías muy altas para núcleos pesados e intermedios	90
7.15.. Reacciones de iones pesados	90
7.16.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo VII	92

7.16.1.. Reacciones nucleares y fuentes de neutrones	92
8.. Interacción de partículas cargadas en material biológico	93
8.1.. Elementos de Radioquímica	93
8.2.. Relación energía-rango para haces de iones terapéuticos	94
8.3.. <i>Stopping Power</i> para haces de iones	96
8.4.. Relación entre energía y rango de CSDA	97
8.5.. Consideraciones dosimétricas para haces de iones pesados	99
8.6.. <i>Efecto densidad</i> en el transporte de partículas cargadas	100
8.7.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo VIII	103
8.7.1.. Interacción de iones con material biológico y detección de radiaciones	103
9.. Pérdida-depósito de energía en terapia con iones pesados	104
9.1.. Pérdida de energía de iones a nivel macroscópico	104
9.2.. Pérdida de energía de iones a nivel macroscópico	105
9.2.1.. Aproximación clásica del transporte continuo de partículas a través de la materia	105
9.2.2.. Convolución por rango de straggling	105
9.2.3.. Abordaje Monte Carlo para el transporte de iones	106
9.3.. Funciones de Bragg	106
9.4.. Pérdida de energía de iones a nivel microscópico	108
9.4.1.. Deposición de energía a nivel microscópico	109
9.5.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo IX	111
9.5.1.. Pérdida de energía y micro- y macro-dosimetría	111
10.. Detectores de radiación y sistemas de conteo	112
10.1.. Detectores gaseosos	112
10.2.. Detectores a base de semiconductores	114
10.3.. Centelladores	115
10.4.. Detección y conteo con detectores de estado sólido NaI(Tl) en forma de campana	119
10.5.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo X	122
10.5.1.. Detectores de radiación de uso médico	122
11.. Procesamiento digital de imágenes de radiodiagnóstico: elementos básicos	123
11.1.. Introducción: Calidad de imágenes	123
11.2.. Resolución espacial, contraste y ruido	123
11.3.. Elementos para la evaluación de calidad de imágenes	132
11.4.. Procesamiento digital de imágenes en medicina nuclear	133
11.4.1.. Visualización y selección de regiones de interés	133
11.4.2.. Suavizado de imágenes	135
11.4.3.. Detección de bordes y segmentación	135
11.4.4.. Reconstrucción tomográfica de imágenes médicas	136
11.5.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo XI	138
11.5.1.. Básico sobre procesamiento de imágenes médicas	138
12.. Ecuación de transporte de Boltzmann en presencia de campos electromagnéticos externos	139
12.1.. Tratamiento a primer orden de la ecuación de transporte de Boltzmann con campos externos: LBTE	139
12.1.1.. Desacoplamiento de la LBTE con campos externos	139
12.2.. Tratamiento de la LBTE sólo con campo magnético	140
12.3.. Discretización de la LBTE a primer orden con campo magnético	141

12.4..Modelo de Bielajew-Bouchard para incorporar la fuerza de Lorentz en transporte Monte Carlo	141
12.4.1.. Decomposición en dependencia de múltiples variables	141
12.4.2.. Formulación del modelo Bielajew-Bouchard independiente del tiempo . . .	142
12.5..Implicancias en la teoría de scattering múltiple	143
12.6..Teorema de Fano en presencia de campos electromagnéticos externos	144
13..Trabajo de aplicación: Elementos de tracking y simulación de haces de neutrones	146
13.1..Tracking y transporte de neutrones	147
13.2..Modelado Monte Carlo de transporte de neutrones	148
13.3..Fuente puntual monoenergética de neutrones con scattering isotrópico	148
13.4..Elementos básicos de programación y ejercitación de Aplicación I	149
13.4.1.. Transporte de neutrones en medio material	149
14..Trabajo de aplicación: Radioprotección	150
14.1..Radioprotección: Introducción	150
14.2..Modelo para blindajes para aparatos de RX en radiodiagnóstico	152
14.3..Cálculo blindajes para aparatos de RX en radiodiagnóstico	153
14.4..Trabajo de aplicación: Elementos de Radiodiagnóstico	154
15..Transporte y depósito de energía para haces de protones	155
15.1..Introducción	155
15.2..Trabajo de aplicación: Terapia con protones	174
16..BNCT: dosimetría de campo mixto	175
16.1..Introducción	175
16.2..Uso de técnica de cálculo Monte Carlo para BNCT	175
16.3..Información teórica y experimental	177
16.3.1.. La técnica dosimétrica FriXy	178
16.4..Trabajo de aplicación: BNCT y dosimetría de campo mixto	179
17..Detectores de radiación estudiados con técnicas Monte Carlo: Medicina nuclear	181
17.1..Introducción	181
17.2..Ejercicio: Estudio y caracterización de un detector tipo pozo	181
17.2.1.. Realizar los siguientes pasos del ejercicio:	181
18..Detectores de radiación estudiados con técnicas Monte Carlo: Dosimetría de radiaciones	183
18.1..Ejercicio: Estudio y caracterización de una cámara de ionización	183
18.1.1.. Realizar los siguientes pasos del ejercicio:	183
19..Efecto de campos electromagnéticos en el transporte de radiación ionizante para aplicaciones en física médica	184
19.1..Efecto del campo eléctrico en la generación de pares iónicos en dosímetro gaseoso	184
19.2..Efecto del campo magnético en la respuesta de cámaras de ionización	184

1.. Propiedades generales del núcleo atómico

El capítulo 1. presenta una distendida y oportuna introducción al ámbito de la física nuclear de interés para las aplicaciones del presente curso. Los principales conceptos y algunas propiedades nucleares se exponen en el marco natural de su desarrollo histórico, acompañando, de este modo, la evolución del pensamiento, concepciones e hipótesis de la comunidad científica respecto de la configuración atómica y nuclear. En este sentido, se resalta la importancia histórica de ciertos acontecimientos e ideas revolucionarias que aportaron a la mejor comprensión y desarrollo de la física nuclear moderna. También se introducen los conceptos de estado cuántico y energía de ligadura que se encuentran íntimamente relacionados con las fuerzas y potenciales nucleares y resultan de particular importancia para la comprensión de las configuraciones nucleares y sus estados energéticos.

1.1.. Evolución del modelo nuclear

La física nuclear se inicia con el descubrimiento del núcleo atómico por parte de Rutherford en 1911, cuando se enunciaron algunas propiedades básicas:

- El radio del núcleo es muy pequeño comparado con el radio del átomo, de hecho se mostró que, en buena aproximación, el núcleo puede ser considerado un carga puntual de dimensiones $\leq 10^{-13}m$.
- El núcleo atómico se encuentra cargado, cuyo valor de carga (Q) es un múltiplo entero de la carga del electrón (e), *i.e.*: $Q = Ze, Z \in N$.
- El núcleo atómico es extremadamente masivo comparado en electrones, a tal punto que prácticamente toda la masa del átomo se concentra en el núcleo.
- Debido a la neutralidad del átomo, resultó oportuno asumir que la carga nuclear equilibra exactamente la carga de los electrones que lo rodean. Por lo tanto, la carga del núcleo queda determinada por la cantidad de electrones en el átomo, siendo ésta la única propiedad del núcleo de relevancia para la física atómica y consecuentemente para la física de la materia.

La siguiente propiedad de importancia del núcleo es su masa, estudiada por Thompson, quien concluyó que la masa nuclear no está determinada por su carga, de hecho demostró la existencia de núcleos de idéntica carga pero diferentes masa (*isótopos*). Los estudios de Thompson permitieron establecer que la masa de cada isótopo es aproximadamente un múltiplo entero de la masa del protón. El entero mas próximo que satisface esta relación se lo conoce como número másico A .

La primera, y más sencilla, suposición consistió en hipotizar que el núcleo atómico estaría constituido por protones, lo cual resulta sin embargo, claramente contradictorio con la evidencia experimental de que prácticamente para todos los núcleos se había observado la relación $A \geq 2Z$. Por lo tanto, cobró sustento la idea de que debía existir otro tipo de partículas dentro del núcleo, además de los protones.

Posteriormente, una segunda hipótesis se impuso sobre la precedente, en este caso basada en el postulado de que el núcleo estaría formado por protones y electrones. Esta teoría resistió por muchos años hasta que Chadwick descubrió el neutrón en 1932, y consecuentemente Heisenberg propuso el modelo de núcleo compuesto por protones y neutrones, dando lugar al origen de lo que hoy se conoce como física nuclear moderna.

La cantidad de neutrones en un núcleo (N) está determinada por: $N = A - Z$, mientras la masa del neutrón es muy próxima a la del protón. En este sentido, tanto protones como neutrones son denominados “*nucleones*”.

Además, núcleos con el mismo número másico A , pero con diferente número atómico Z se denominan *isóbaros*; mientras que núcleos con el mismo número de neutrones ($N = A - Z$), pero diferente Z , se denominan *isótonos*. Una característica importante de los isótopos es que presentan similares propiedades químicas, y por lo tanto, resulta difícil sintetizarlos.

Ya que los neutrones son partículas neutras, se concluyó que las fuerzas internas que mantienen unidos los núcleos no son de naturaleza electromagnética, por lo tanto las “*fuerzas nucleares*” que mantienen unido al núcleo, a diferencia de aquellas de carácter atómico, no son atribuibles a la física clásica, según postulara

Wigner hacia 1933. Además, Wigner agregó el hecho que el rango de las fuerzas nucleares debería ser de muy corto alcance y de intensidad extremadamente mayor a las interacciones electrostáticas.

Heisenberg mostró contemporáneamente que las fuerzas nucleares deberían presentar una saturación, relacionado al hecho de que un nucleón no interactúa preponderantemente de igual modo con todos los restantes.

1.2.. Evidencia experimental en el desarrollo histórico de la física nuclear

Esta sección repasa los principales acontecimientos y aportes empíricos que permitieron comprender la física del núcleo así como la formulación de los modelos teóricos actualmente considerados válidos.

1.2.1.. Separación electromagnética de iones

El punto de partida han sido los métodos desarrollados para medir cargas eléctricas específicas (q/m) negativas formulados básicamente en términos de la interacción de partículas cargadas con campos magnéticos:

$$Bqv = \frac{mv^2}{R} \quad (1)$$

donde m es la masa y q la carga de la partícula que gira a velocidad v describiendo una circunferencia de radio R al ser sometida a la acción del campo magnético externo de intensidad B .

De este modo, fué posible determinar la carga específica del electrón (e/m_e) dando un valor de $1,7810^8 c/g$. Cabe destacar que la fórmula 1 es puramente clásica, siendo la expresión relativista (obtenida al expresar el *momentum* en términos relativistas)

$$B = \pm \frac{\sqrt{E_k^2 + 2mc^2 E_k}}{qcR} \quad (2)$$

donde E_k es la energía cinética en la fórmula 2.

Los métodos utilizados originariamente para calcular el valor de cargas específicas negativas fueron posteriormente extendidos para adaptarlos a la determinación de cargas positivas. Mientras la producción de cargas positivas pudo realizarse aprovechando los métodos de ionización de átomos por medio de bombardeo electrónico, sometimiento a altas temperaturas o descargas eléctricas, entre otros. Los iones positivos generados podían entonces ser acelerados por medio de potenciales negativos y pasar a través de analizadores eléctricos o magnéticos, utilizados para distinguir y focalizar los iones de igual carga específica. Debido al hecho que el valor de carga es un múltiplo entero de la carga del electrón, resulta que la separación de iones positivos depende esencialmente del valor de la masa, lo cual constituye la base de la gran precisión de estos métodos (espectrómetros y espectrógrafos de masa) para calcular la masa de iones positivos.

El método de focalización electromagnética permite distinguir elementos de igual q/m , dando lugar al fenómeno de “*dobeletes*” que consiste en la detección en puntos focales muy próximos, cuya distancia de separación puede emplearse para determinar de manera muy precisa las masas relativas. El grado de precisión permite incluso la medición de masas relativas entre átomos neutros e iones positivos formados por remoción de electrones. Las determinaciones de la masa obtenidas por medio de espectroscopía de masa se expresan en términos relativos a las masas de los átomos neutros, mientras que la masa del núcleo se obtiene por medio de la sustracción de la masa correspondiente a los electrones.

1.2.2.. Abundancia natural de isótopos

Los análisis con espectroscopía de masa permiten establecer la cantidad de átomos de una dada masa. De este modo, es posible establecer la *abundancia porcentual* de isótopos para cada elemento en estado natural, además puede calcularse la *abundancia relativa* definida como la cantidad relativa de cada constituyente respecto del isótopo más abundante.

Los estudios de espectros de masa muestran comportamientos muy diferentes patrones de abundancia entre los distintos elementos naturales. Para elementos como el estaño, se observan 10 isótopos, mientras el oro presenta una única línea espectral, siendo una característica general que elementos de número atómico impar presentan una o dos líneas, mientras para valores pares raramente se encuentran sólo una o dos líneas.

La evidencia experimental por espectroscopía de masa muestra que, con algunas raras excepciones, la composición isotópica de un dado elemento resulta independiente del lugar donde fué tomada la muestra que se analiza, incluso hierro de meteoritos han mostrado la misma composición isotópica que muestras de hierro terrestres.

Si bien se requiere de cosmología para explicar la abundancia isotópica, pueden enunciarse ciertas premisas empíricas:

1. Nucleidos de número atómico par y cantidad par de neutrones son los más abundantes en la naturaleza. La configuración “par-par” de nucleidos constituye la mayoría de los elementos de la corteza terrestre.
2. Configuraciones “par-impar” o “impar-par” se presentan en abundancia moderada en la naturaleza.
3. La configuración “impar-impar” es extremadamente rara en la naturaleza, conociéndose solo 5 casos: ${}^1_1\text{H}^2$, ${}^3_3\text{Li}^6$, ${}^5_5\text{B}^{10}$, ${}^7_7\text{N}^{14}$ y ${}^{23}_{11}\text{V}^{50}$.

1.3.. Separación de isótopos

La posibilidad de separar un elemento en sus diferentes componentes isotópicas conlleva gran interés y se trata generalmente de un proceso muy complicado. En principio, cualquier propiedad dependiente de la masa atómica puede ser utilizada para aplicar mecanismos de separación, sin embargo solo unos pocos dan resultados satisfactorios.

Técnicas por espectrometría de masa resultan ser el mejor método para la separación completa, sin embargo la cantidad de producto resulta muy baja (poca) eficiencia. Técnicas de difusión gaseosa son también empleadas a fin de la separación de isótopos aprovechando la ley de Graham (ecuación 3), que establece que la tasa de difusión es función del peso molecular está dada por:

$$n \propto \frac{1}{\sqrt{M}} \quad (3)$$

donde n es la cantidad de moléculas que difunden y M es la masa molecular del gas.

Por lo tanto, el grado de separación es muy bajo para gases de alto peso molecular. Además, otros métodos como difusión térmica, vaporización, electrólisis y reacciones químicas pueden ser utilizados para la separación de isótopos.

1.4.. Estabilidad nuclear

Esencialmente, un núcleo es considerado *estable* si no se transforma por sí mismo, y sin energía externa, cambiando su configuración nuclear. Sin embargo, existen diferentes categorías de estabilidad. Los núcleos livianos son estables respecto de emisión de partículas alfa, pero generalmente no lo son respecto de emisión beta.

Desde el punto de vista experimental, la estabilidad resulta dependiente de la sensibilidad instrumental para detectar de la técnica de medición, y por lo tanto perfeccionamiento de los métodos experimentales pueden ofrecer la posibilidad de distinguir isótopos que se piensan estables pero son en realidad radioactivos.

La figura 1 muestra los nucleídos estables en un diagrama neutrón-protón. La línea sólida se conoce como línea de estabilidad. Para valores grandes de Z , aumenta también el cociente N/Z para los nucleídos estables. La curva de estabilidad experimental puede aproximarse por la expresión empírica en la fórmula 4:

$$Z(A) = \frac{A}{2 + 0,0146A^{\frac{2}{3}}} \quad (4)$$

Considerando que las técnicas de espectrografía de masa emplearon originalmente al oxígeno como referencia, en términos de la escala física de pesos atómicos, el isótopo más abundante es del oxígeno se utiliza como valor standard (16.000000). La *unidad de masa atómica* (uma) se define como 1/16 de la masa un átomo del isótopo más estable del oxígeno. Sin embargo, contrariamente, la nomenclatura histórica de la escala química emplea el carbono-12 como patrón de referencia.

Posteriormente, mediciones precisas de intercambios energéticos durante reacciones nucleares, permitieron establecer de manera completamente independiente, las masas atómicas. Se encontró, en líneas generales, un muy buen acuerdo con las mediciones espectroscópicas.

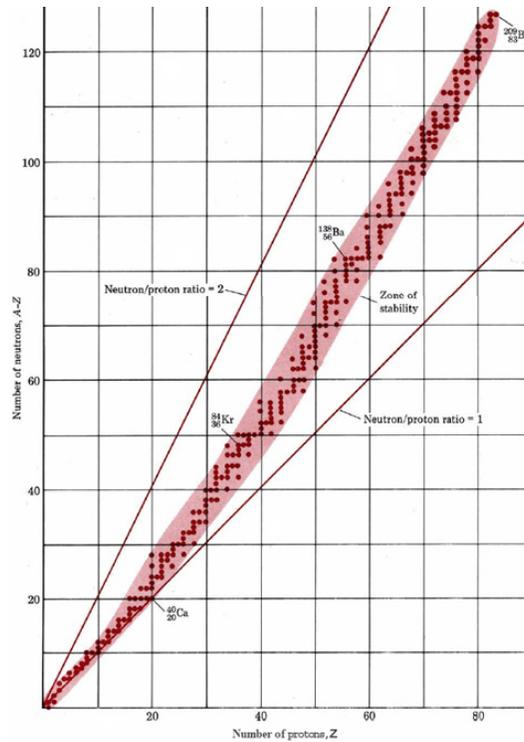


Figura 1. Gráfico neutrón-protón de nucleídos estables.

1.5. Características de las fuerzas nucleares

Las primeras hipótesis sobre la naturaleza atractiva de las fuerzas nucleares se remontan hacia 1935, cuando Yukawa propuso su modelo nuclear. Además, las “conjeturas” de Heisenberg respecto de la naturaleza de las fuerzas nucleares permitieron los primeros acercamientos a la descripción de los fenómenos nucleares.

Gran parte del desarrollo en el campo de las fuerzas nucleares se deben a fenómenos observacionales y empíricos. Existen algunos argumentos relevantes para considerar a las fuerzas nucleares fuera de la típica clasificación de fuerzas que obedecen leyes de inverso del cuadrado. A continuación se resumen algunas de las más importantes características distintivas de las fuerzas nucleares:

- A pesar que la evidencia indica que las fuerzas nucleares deben ser predominantemente atractivas, debe existir una componente repulsiva efectiva con rango extremadamente corto. De otro modo, los nucleones colapsarían.
- Las fuerzas nucleares individuales son extremadamente mayores a las correspondientes interacciones Coulombianas. De otro modo, el núcleo se desintegraría por acción de repulsión electrostática.
- Las fuerzas nucleares no dependen fuertemente del tipo de nucleón, *i.e.* existe muy poca diferencia entre la interacción p-n, p-p o n-n. (sugiriendo un origen “no eléctrico”).
- Las fuerzas nucleares tienen un rango de alcance muy corto (decauyendo extremadamente más rápido que el inverso del cuadrado).
- A distancias del orden de $0.4f$ ($1f = 10^{-15}$) las fuerzas nucleares son predominantes formando una “coraza”.
- Como consecuencia del corto alcance, las fuerzas nucleares actúan efectivamente sobre nucleones adyacentes.
- Las fuerzas nucleares presentan “saturación”, grupos de 4 nucleones conforman estructuras estables (la no existencia de estructuras con 5 nucleones, como ${}^5_2\text{He}$ sostiene esta afirmación).

- Los nucleones tienden a formar *shells* cerradas con fuertes interacciones entre las *shells*.
- A pesar que la formación de 4 nucleones aparente saturar, existe “tendencia” hacia la formación de pares de nucleones.

La interacción entre nucleones resulta particularmente complicada, en el sentido de que depende no sólo de la separación entre nucleones, sino también de las direcciones relativas de los spins y momentos angulares. Para distancias del orden de 4 f, las fuerzas nucleares y las Coulombianas se equilibran, mientras a distancias próximas a 25 f, las fuerzas nucleares resultan 10^{-6} respecto del valor de las fuerzas electrostáticas, mientras la componente repulsiva a corta distancia evita el colapso.

Los grandes principios de las interacciones nucleares se denominan “*simetría de carga*” e “*independencia de carga*”. El principio de simetría de carga establece que la interacción nuclear entre pares de nucleones (fuerzas $n-n$, $p-p$) son esencialmente iguales, excepto correcciones menores debido a interacciones Coulombianas; mientras el segundo principio va más allá, y establece que la fuerza $p-n$ también es esencialmente igual a las anteriores. Se ha supuesto implícitamente, que la validez de las afirmaciones anteriores implica la igualdad de condiciones (separación, dirección de spin, etc.).

El modelo de Yukawa para la interacción nuclear establece un intercambio continuo de mesones entre los nucleones constituyentes, de este modo al intercambiar mesones cargados, el efecto neto entre neutrón-protón sería un intercambio de identidades, confirmando el principio de simetría. Posteriormente, hacia 1947 Powell, Occhiallini y Latters confirman el descubrimiento de los mesones π “*piones*” ($m_\pi \approx 300m_e$) en la radiación cósmica, que representarían la famosa partícula de Yukawa para el intercambio.

1.6.. Compendio de propiedades nucleares

En vista del desarrollo histórico y evidencias experimentales resumidos precedentemente, pueden mencionarse ciertas características concluyentes:

- Todos los núcleos son de carga positiva, y la magnitud de la carga eléctrica es un múltiplo entero Z de la carga del protón o núcleo de hidrógeno (e). En átomos neutros, Z coincide con el número de electrones en los orbitales. Además, Z se conoce como número atómico.
- Más del 99.9 por ciento de la masa del átomo se concentra en el pequeño volumen del núcleo.
- Los núcleos son de forma esférica o muy próximamente esféricos, presentándose, sin embargo, muy raras excepciones.

El radio nuclear (r) puede ser calculado en manera aproximada por medio de la expresión empírica:

$$r = r_0 A^{\frac{1}{3}} \quad (5)$$

donde A es el número másico y r_0 es una constante cuyo valor aproximado es $2 \cdot 10^{-15} m$.

En este sentido, resulta inmediato pensar en una densidad nuclear (ρ) universal, aproximadamente constante, dada por:

$$\rho = \frac{A}{\frac{4}{3}\pi r^3} \approx 10^{14} g/cm^3 \quad (6)$$

Sin embargo, debido a la altísima densidad de nucleones por unidad de volumen (10^{38} nucleones/ cm^3), no resulta simple establecer una relación empírica entre las dimensiones nucleares y la masa nuclear.

El núcleo atómico es una unidad formada por partículas constitutivas fuertemente ligadas, cuyo régimen de potencial se encuentra varios órdenes por encima de las energías cinéticas. Antes del descubrimiento del neutrón, se hipotizaba núcleos constituidos por protones y electrones, asunción bastante razonable en términos de algunas evidencias experimentales de la época. Sin embargo, a la luz de la física cuántica, tal hipótesis resulta claramente inconsistente, ya que núcleos con cantidad par de nucleones responden a las leyes de la mecánica estadística de Bose-Einstein. Examinando los patrones de intensidad del espectros de rotación de moléculas de $(^{14}N)_2$ resulta de manera indiscutible que el valor de spin nuclear de ^{14}N es de una unidad (en términos de \hbar). Análisis análogos muestran que núcleos con cantidad par de nucleones presentan valores de spin enteros, mientras para cantidades impar de nucleones se verifican valores de spin semi-enteros. En el ejemplo

considerado (^{14}N) la cantidad de nucleones, bajo las hipótesis del modelo protón-electrón, sería 21 (impar), lo cual implicaría un valor semi-entero de spin, en contradicción con la evidencia experimental. Una segunda y sencilla refutación proviene del principio de incertidumbre de Heisenberg. Asumiendo un electrón confinado a un esfera de diámetro $\approx 10^{-12}cm$, la incerteza del momentum resultaría:

$$\Delta p \Delta x \approx \hbar \approx 10^{-27} ergs \quad (7)$$

Valor que permitiría calcular la energía relativista del electrón confinado:

$$\Delta E = c \Delta p = \frac{c \hbar}{\Delta x} \approx 20 MeV \quad (8)$$

Pero, resulta por demás inverosímil que la energía potencial electrón-protón dentro del núcleo alcance estos valores. Sin embargo, por el otro lado, la relativamente grande masa del neutrón y protón, respecto del electrón, no produce semejantes valores de energía cinética.

Además, la evidencia de momentos magnéticos dipolares de los núcleos sería difícilmente explicable en términos de núcleos constituidos por electrones. La existencia de núcleos estables que requieren enormes cantidades de energía para desintegrarse resulta consecuencia directa de la extremadamente intensas fuerzas nucleares, cuya determinación cuantitativa, sin embargo, resulta particularmente complicada. Teorías de interacción nucleón-nucleón están aún siendo desarrolladas y presentan altísimas complejidades y tediosos formalismos, donde el problema de muchos cuerpos y las energías intervinientes juegan papeles preponderantes.

1.7.. Masa y energía de ligadura nuclear

El núcleo atómico es un sistema formado por A elementos constituyentes (nucleones) mantenidos juntos formando una unidad por medio de fuerzas nucleares atractivas. Existen razones suficientes para asumir que la mecánica de estos sistemas puede ser tratada, como primera (y aceptable) aproximación, en términos no-relativistas.

El núcleo, como cualquier sistema cuántico ligado, puede encontrarse en toda una serie de diferentes estados cuánticos, siendo el estado de mínima energía aquel considerado “*fundamental*”. En situaciones normales, el núcleo se encuentra en su estado fundamental, mientras que al pasar a alguno de los estados “*excitados*”, de mayor energía, regresará a su estado fundamental por medio de procesos de desexcitación, generalmente a través de emisión de cuantos.

La masa nuclear (M_{nuc}) puede calcularse por medio de¹:

$$M_{nuc} = ZM_p + (A - Z)M_n - \Delta \quad (9)$$

donde M_p y M_n son las masas del protón y neutrón, respectivamente, y Δ se define como “*defecto de masa*” dado por la diferencia entre el peso nuclear y la suma de los pesos de los nucleones constituyentes.

En este sentido, el peso atómico (M_{at}) puede calcularse a través de:

$$M_{at} = ZM_H + (A - Z)M_n - \Delta \quad (10)$$

donde M_H es la masa del átomo de hidrógeno ($M_H = M_p + m_e$).

El defecto de masa Δ puede ser explicado en términos de la equivalencia masa-energía. Sea U la energía total del núcleo, entonces vale:

$$U = c^2 M_{nuc} \quad (11)$$

La diferencia energética entre la suma de las energías en reposo de los constituyentes y la energía total del núcleo puede interpretarse como el trabajo necesario para desintegrar al núcleo en sus constituyentes, por lo tanto esta cantidad representaría la energía de ligadura total del núcleo (B), dada por²:

$$B = ZM_p c^2 + (A - Z)M_n c^2 - U = c^2 \Delta \quad (12)$$

¹La energía de ligadura de los electrones en el átomo resulta absolutamente despreciable respecto de las energías de ligadura nucleares, y por ello serán omitidas a continuación

² U y B se refieren al estado fundamental del núcleo

y queda determinada por medio de mediciones de Δ .

La “fracción de ligadura” (f) se define como la proporción de energía de ligadura por nucleón, i.e.:

$$f \equiv \frac{B}{A} \quad (13)$$

La figura 2 muestra el comportamiento de f en función de la cantidad de nucleones A .

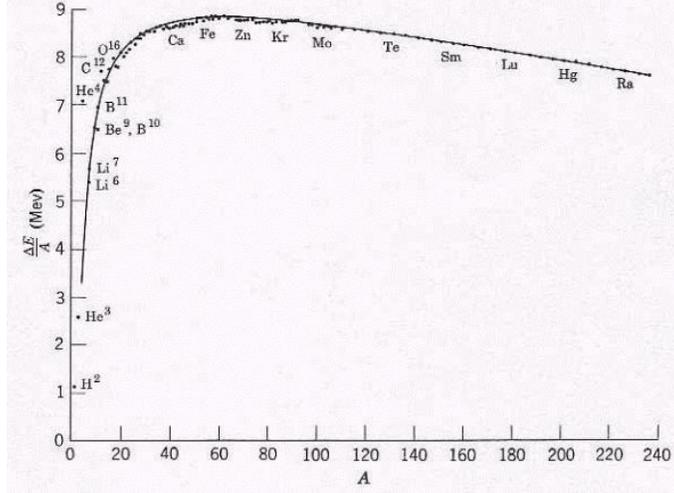


Figura 2. Fracción de energía de ligadura para núcleos estables en función de A .

Asimismo, se introduce el concepto de “energía de separación” ($S_a(X)$) definido como la energía necesaria para remover al infinito la partícula a del núcleo X en su estado fundamental, dejando al residuo Y ($Y + a = X$) también en estado fundamental. Los valores de S resultan muy similares a f ($\approx 8\text{MeV}$), dado que la energía necesaria para remover un nucleón es muy parecida a la energía media de ligadura por nucleón, sin embargo significativas desviaciones han sido encontradas, por ejemplo para el caso del silicio. La energía de separación para neutrones (S_n) se calcula por medio de:

$$S_n = B(Z, N) - B(Z, N - 1) \quad (14)$$

y esta expresión (14) puede ser reescrita en términos de f , como sigue:

$$S_n = f(Z, N) + (A - 1)[f(Z, N) - f(Z, N - 1)] \quad (15)$$

Asumiendo, en primera aproximación, que para núcleos estables $f(Z, N)$ es función sólo de A , se obtiene:

$$S_n(A) \approx f + (A - 1) \frac{df}{dA} \quad (16)$$

mostrando que la energía de separación es aproximadamente igual a la fracción de energía de ligadura.

1.8. Barrera de potencial nuclear

Partículas cargadas, como protones, moviéndose en proximidades del núcleo experimentan efectos retardadores debido a la interacción Coulombiana, por lo tanto a medida que la partícula se acerca al núcleo pierde energía aumentando su potencial. El campo retardador representa una barrera que debe ser traspasada. Según la mecánica clásica, si la partícula debe llegar al núcleo, el potencial resulta como se muestra en la figura 3.

Si la partícula incidente tiene energía suficiente para atravesar la barrera de potencial, alcanzará la zona de influencia de las fuerzas nucleares atractivas y será sometida por el potencial del núcleo. La distancia para

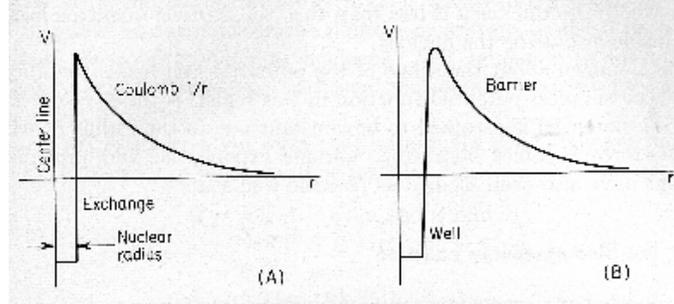


Figura 3. Potencial nuclear ideal (A) y mas probable (B).

la cual la fuerza nuclear equilibra la repulsión electrostática puede definirse aproximadamente igual al radio nuclear.

De manera cuantitativa, en muy buena aproximación, la altura máxima de la barrera de potencial (V_{max}) puede ser calculada en términos del radio nuclear:

$$V_{max} \approx \frac{Zze^2}{\epsilon r_0 A^{1/3}} \quad (17)$$

donde ze es la carga de la partícula que se aproxima al núcleo (proyectil) de carga Ze , y ϵ es la constante dieléctrica.

1.9.. Modelo nuclear de Von Weizsäcker

Este modelo desarrollado en 1935 permite calcular de manera semi-empírica la masa atómica de un nucleído a partir de "términos correctivos" a la energía de ligadura. Este método fu e posteriormente modificado, incorporando nuevas concepciones cuánticas. Sin embargo, su versión original, puede describirse como sigue:

La masa de un átomo (${}^A M_Z$) queda puede determinarse fehacientemente, como se verá. El hecho de que B/A sea casi constante, implica la necesidad de términos correctivos.

Sea introduce la "energía de ligadura de volúmen", dado por:

$$M_1 = -a_1 A \quad (18)$$

que correspondería a un término de masa negativa. Este término, sin embargo, sobre-estima la energía de ligadura en la superficie del núcleo, ya que los nucleones no se encuentran tan firmemente ligados como aquellos dentro de la superficie nuclear. Entonces, la reducción de la ligadura de nucleones en la superficie puede expresarse como:

$$M_2 = a_2 A^{2/3} \quad (19)$$

El siguiente término correctivo es debido a la ligadura negativa asociada a la repulsión Coulombiana mutua entre los Z protones, asumiendo distribución uniforme de protones dentro del núcleo, resulta:

$$E_c = \frac{3}{5} \frac{Z^2 e^2}{r} \quad (20)$$

Mientras que para núcleos livianos, debería considerarse la naturaleza discreta de la distribución de protones en el núcleo y reemplazar Z por $Z - 1$ en la última expresión.

El efecto del campo Coulombiano se determina por medio de:

$$M_3 = a_3 \frac{Z^2}{A^{1/3}} \quad (21)$$

La desviación de la condición $Z = N$ produce un efecto de reducción de la energía de ligadura, lo cual sugiere la incorporación de un término dependiente de $(N - Z)$ o $(A/2 - Z)$, lo cual fué originalmente argumentado en función de “*efectos de simetría*”, estableciendo un término correctivo:

$$M_4 = a_4 \frac{(A/2 - Z)^2}{A} \quad (22)$$

Finalmente, la tendencia a la configuración par-par sugirió la inclusión del término:

$$\begin{aligned} M_5 &= a_5 A^{-\frac{3}{4}} (\text{impar} - \text{impar}) \\ M_5 &= 0 (\text{impar} - \text{par}) \\ M_5 &= -a_5 A^{-\frac{3}{4}} (\text{par} - \text{par}) \end{aligned} \quad (23)$$

Resumiendo, y en base a los “términos correctivos” incluidos, resulta:

$${}^A M_Z = ZM_H + (A - Z)M_n - a_1 A + a_2 A^{\frac{2}{3}} + a_3 Z^2 A^{-\frac{1}{3}} + a_4 \frac{(A/2 - Z)^2}{A} + M_5 \quad (24)$$

Los valores empíricos (en unidades de 10^{-3}uma) propuestos para los coeficientes son: $a_1 = 16,92$, $a_2 = 19,1$, $a_3 = 0,763$, $a_4 = 101,8$ y $a_5 = 36,5$.

En esta hipótesis, dado el número de nucleones A , el isóbaro mas estable corresponde al mínimo de la expresión anterior, *i.e.*:

$$\left(\frac{\partial M}{\partial Z} \right)_A = 0 \Rightarrow Z = \frac{M_n - M_H + a_4}{2a_3 A^{-\frac{1}{3}} + 2a_4 A^{-1}} \quad (25)$$

A pesar de la naturaleza empírica y *ad hoc* del modelo de Von Weizsäcker resulta sorprendentemente existoso en un limitado rango de valores de A .

1.10.. Spin y momentos nucleares

La existencia de un momento angular intrínseco (spin) nuclear fué sugerida por Pauli hacia 1924. Inmediatamente, se asociaron los momentos dipolares nucleares, fenómenos claramente explicables en términos de la mecánica clásica, ya que núcleos de dimensiones finitas y cargados que pueden ser modelados por una esfera de carga rotante, la cual genera un campo magnético.

Evidencias experimentales como las líneas espectrales ópticas y la estructura superfina, el corrimiento isotópico y acoplamiento entre momento magnético del núcleo y el momento magnético del electrón de valencia correspondiente a la línea espectral, sostienen la importancia de estos efectos.

El momento angular intrínseco nuclear puede expresarse como un vector \vec{I} , que resulta de la contribución del spin y de los momentos angulares orbitales individuales de los nucleones constituyentes. El vector \vec{I} tiene magnitud $\sqrt{I(I+1)}$, siendo la máxima componente observable igual a I (en unidades de \hbar). El momento dipolar magnético nuclear ($\vec{\mu}$) es paralelo al vector de spin y está dado por:

$$\vec{\mu} = g_n \mu_n \vec{I} \quad (26)$$

donde g_n es el factor nuclear g (razón giromagnética) y μ_n es el magnetón nuclear dado por: $\mu_n = \frac{e\hbar}{2M_p c}$.

La máxima componente observable de μ_n se denota μ y se conoce como “*momento magnético del núcleo*”, definido por:

$$\mu = g_n \mu_n I \quad (27)$$

De este modo, puede considerarse la interacción entre el momento magnético del núcleo con los electrones de los orbitales. Sea \vec{H}_J el campo magnético producido por los electrones en el núcleo y sea \vec{J} el vector suma entre los momentos angulares de los electrones (\vec{L}) y los spins electrónicos (\vec{S}).

Ya que el núcleo resulta despreciablemente susceptible a las rápidas variaciones del campo magnético electrónico, resulta razonable realizar una estimación de la energía potencial de interacción (entre $\vec{\mu}$ y \vec{H}_J) basada en el promedio temporal de los campos, entonces se tiene:

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{H}_J = -\left(\frac{\mu H_J}{IJ}\right) \vec{I} \cdot \vec{J} \quad (28)$$

El momentum angular total atómico (\vec{L}_{at}) está dado por:

$$\vec{L}_{at} = \vec{I} + \vec{J} \quad (29)$$

Entonces, la energía potencial de interacción resulta:

$$V = -\left(\frac{\mu H_J}{IJ}\right) \frac{1}{2} f(L) \quad (30)$$

donde $f(L) = L(L+1), \dots$, etc.

Resulta entonces, que cada nivel de energía atómico, de momentum angular \vec{J} se separa en una serie de sub-estados cada uno correspondiente a un valor diferente de \vec{L} , con un *gap* energético (Δ) entre sub-estados consecutivos dado por:

$$\Delta = \left(\frac{\mu H_J}{2IJ}\right) \{[L(L+1) - I(I+1) - J(J+1)] - [(L-1)L - (I-1)I - (J-1)J]\} \quad (31)$$

$$i.e.: \Delta = L \left(\frac{\mu H_J}{IJ}\right)$$

Entonces, le separación magnética hiperfina de los estados energéticos atómicos produce $2I+1$ o $2J+1$ sub-estados.

Por otro lado, la distribución de carga eléctrica dentro del volúmen nuclear genera también momentos eléctricos. El momento dipolar eléctrico (\vec{D}_{el}) puede calcularse por medio de:

$$D_{el} = \int \vec{r} q(\vec{r}) d^3 r \quad (32)$$

y en términos de la función de onda, resulta:

$$D_{el}^z = e \sum_{i=1}^Z \int z_i |\Psi(r_1, \dots, r_A)|^2 d^3 r \quad (33)$$

La integral se extiende sobre todas las coordenadas y la sumatoria se realiza sobre las primeras Z partículas (protones). Analizando la paridad de funciones de onda y la composición del integrando, resulta que, por simetría, el momento dipolar eléctrico es nulo, en completo acuerdo con el teorema de la mecánica cuántica, según el cual estados estacionarios tienen momento dipolar eléctrico nulo.

Entonces, el primer momento eléctrico importante resulta ser el momento cuadrupolar eléctrico (Q), el cual puede calcularse considerando al núcleo sometido a la acción del campo eléctrico \vec{E} y asumiendo simetría cilíndrica respecto del eje z .

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0 \quad (34)$$

Calculando el potencial ($\phi(x, y, z)$), se tiene: $\phi(x, y, z) \propto -\frac{1}{4} (3z^2 - r^2)$.

La energía potencial electrostática (W) resulta:

$$W = -\frac{1}{4} \left(\frac{\partial E_z}{\partial z} \right)_0 e \int (3z^2 - r^2) |\Psi(\vec{r})|^2 d^3r \quad (35)$$

El término integral en la expresión anterior representa el momento cuadrupolar eléctrico del núcleo, que puede obtenerse del desarrollo multipolar ($Q_{l,m}$):

$$Q_{l,m} \equiv \sum_{i=1}^Z e \int r_i^l Y_{l,m}(\theta, \phi) |\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A)|^2 d^3r \quad (36)$$

Para distribuciones de carga nuclear con simetría esférica, se tiene: $\langle x \rangle = \langle y \rangle = \langle z \rangle = \frac{1}{3} r^2$, lo cual implica la anulación del momento cuadrupolar eléctrico. En términos de mecánica cuántica puede probarse que el momento cuadrupolar eléctrico nuclear también se anula para núcleos de spin $= \frac{1}{2}$, por lo tanto núcleos que espectroscópicamente presenten momento cuadrupolar eléctrico, deben cumplir con la condición de que el valor de spin sea mayor o igual a 1.

Sin embargo, no resulta simple determinar los momentos cuadrupolares eléctricos con gran precisión. La mayoría de los métodos empleados a tal fin se basan en mediciones indirectas, de la estructura atómica hiperfina producida por la interacción entre el momento cuadrupolar eléctrico y el gradiente del campo eléctrico.

1.11.. Ejercitación del Capítulo I

Esta sección propone ejercicios prácticos de aplicación orientados a profundizar y hacer uso práctico de los conceptos desarrollados en el Capítulo 1.

1.11.1.. Conceptos básicos de programación

Ejercicio 1.1: Elaborar una simulación del lanzamiento de dados, considerando las siguientes situaciones:

1. Lanzar un dado 10 veces y realizar un histograma con los resultados obtenidos.
2. Lanzar un dado 10^3 veces y realizar un histograma con los resultados obtenidos.
3. Lanzar un dado 10^6 veces y realizar un histograma con los resultados obtenidos.
4. Lanzar dos dados 10^6 veces, calcular la suma de valores obtenida y realizar un histograma con los resultados obtenidos.
5. Lanzar tres dados 10^6 veces, calcular la suma de valores obtenida y realizar un histograma con los resultados obtenidos.

Ejercicio 1.2: Elaborar una simulación de una caminata aleatoria en 3 dimensiones a partir de la posición $(0, 1, 2)$, considerando las siguientes situaciones:

1. Establecer un paso de 1 unidad de longitud y realizar 10 pasos, repetir 100 veces el proceso determinando el desplazamiento neto final. Graficar los resultados obtenidos.
2. Establecer un paso de 2 unidades de longitud y realizar 10 pasos, repetir 100 veces el proceso determinando el desplazamiento neto final. Graficar los resultados obtenidos.
3. Establecer un paso de 1 unidad de longitud y realizar 10^4 pasos, repetir 100 veces el proceso determinando el desplazamiento neto final. Graficar los resultados obtenidos.

Ejercicio 1.3: Elaborar una simulación de posiciones aleatorias uniformemente distribuidas, considerando las siguientes situaciones:

1. Distribución en un rectángulo de lados 3 unidades por 0.5 unidades. Graficar los resultados obtenidos.
2. Distribución en un semi-círculo de radio 3 unidades. Graficar los resultados obtenidos.
3. Distribución en una esfera de radio 1 unidad. Graficar los resultados obtenidos.
4. Distribución en una sector casquete esférico (de espesor diferencial) de radio 1 unidad, comprendiendo sector de 180 grados en ángulo polar y 90 grados en ángulo azimutal. Graficar los resultados obtenidos.

1.11.2.. Haz de partículas cargadas en campo magnético

Ejercicio 1.4: Elaborar un modelo, e implementarlo computacionalmente, para simular un haz conformado por partículas de diferentes cargas, y diferentes masas, todas con energía cinética E , que atraviesa una región con presencia de campo magnético de intensidad $|\vec{B}|$, para determinar el radio de curvatura, o equivalentemente la posición en una placa detectora convenientemente colocada en el experimento, considerando:

1. Haz constituído por tres tipos de partículas con razón carga-masa e/m_e , $2e/m_e$ y $8e/m_e$ y $|\vec{B}| = 1$ T, para $E = 1$ MeV. Realizar un esquema gráfico del modelo.
2. Repetir el ítem anterior para 5 valores de intensidad de campo en el rango $[0.5, 10]$ T. Estimar la gráfica la *mancha* en la placa detectora como consecuencia de la separación de las partículas cargadas del haz.
3. Proponer e implementar una metodología de separación espectral si el haz incidente estuviese conformado por partículas de razón carga-masa $2e/m_e$ y tres componentes energéticas de energía-probabilidad $1\text{ MeV}-0,25$, $2\text{ MeV}-0,5$ y $3\text{ MeV}-0,25$, para $|\vec{B}| = 1$ T.

Ejercicio 1.5: Utilizando difusión gaseosa, estimar la proporción de isótopos que se encontrarán en un recinto, luego de difundir desde una muestra inicial constituida por 3 tipos de isótopos, que varían en un neutrón y dos neutrones, respectivamente, suponiendo:

1. El isótopo de referencia es de masa $A=10$, y ha transcurrido 1 hora de difusión.
2. Estimar la relación de presencia relativa del isótopo más pesado al más liviano (de referencia, con $A=100$) en el compartimiento de separación luego de 10 horas en relación a 1 hora.

1.11.3.. Estabilidad y propiedades del núcleo

Ejercicio 1.6: Utilizar 10 casos aleatorios de la figura de estabilidad nuclear (figura 1), y obtener los parámetros de ajuste para una función como la propuesta en la expresión 4.

Ejercicio 1.7: Estimar el valor de la altura de la barrera de potencial nuclear para 3 isótopos de la figura 1, representativos de rango bajo, intermedio y alto.

Ejercicio 1.8: Estimar la masa de las tres configuraciones nucleares del ítem anterior.

Ejercicio 1.9: Estimar la energía de separación de un neutrón del ${}^7\text{Li}$ para pasar a ${}^6\text{Li}$.

Ejercicio 1.10: Plantear y estimar el momento dipolar eléctrico del ${}^1\text{H}$ (D_{el}^1), y para el ${}^2\text{H}$ (D_{el}^2), y el momento cuadrupolar eléctrico para ${}^1\text{H}$ (Q_{el}^1).

2.. Problema de dos cuerpos a baja energía para nucleones

En primer lugar, dado que se trabaja en la aproximación de baja energía en comparación con la energía en reposo de un nucleón, se tiene que como primer consecuencia la posibilidad de despreciar los efectos relativistas.

Considerando que las fuerzas nucleares no derivan aún de alguna teoría fundamental (válido hacia 1963), la descripción en términos de la teoría de 2 cuerpos requerirá de algunas modificaciones al modelo standard, que se harán en base heurística y empírica.

Varios de los modelos de 2 cuerpos para la física nuclear asumen que las fuerzas nucleares son de carácter conservativo y obedecen a un potencial central $V(r)$. De este modo, se asume que las interacciones nucleares son independientes de las velocidades relativas de los nucleones.

2.1.. Deuterón en potencial central

El análisis y descripción del sistema neutrón-protón ($n^0 - p^+$) sometido a fuerzas centrales resulta particularmente oportuno para aclarar y fijar ideas en función del desarrollo siguiente respecto de estos procesos de interacción $n^0 - p^+$. El deuterón o deuterio es un sistema formado por 2 partículas (n^0 y p^+) de masas similares ($m_n \approx m_p = M$), que se mantiene unido por acción de fuerzas atractivas de corto alcance. La presente exposición asume que estas fuerzas atractivas actúan a lo largo de la línea que une las partículas, *i.e.* tratando las fuerzas nucleares como fuerzas centrales, lo cual en términos exigentes, es incorrecto, ya que la interacción de acoplamiento spin-órbita es contraria al modelo de fuerzas centrales.

En la aproximación de fuerzas centrales, éstas pueden derivarse del potencial central $V(r)$. Dado que se trata de fuerzas atractivas, $V(r)$ debe ser negativo y disminuir al decrecer r . La evidencia del corto alcance implica que $V(r)$ es apreciablemente diferente de 0 en una región limitada por un cierto rango b , como muestra la figura 4.

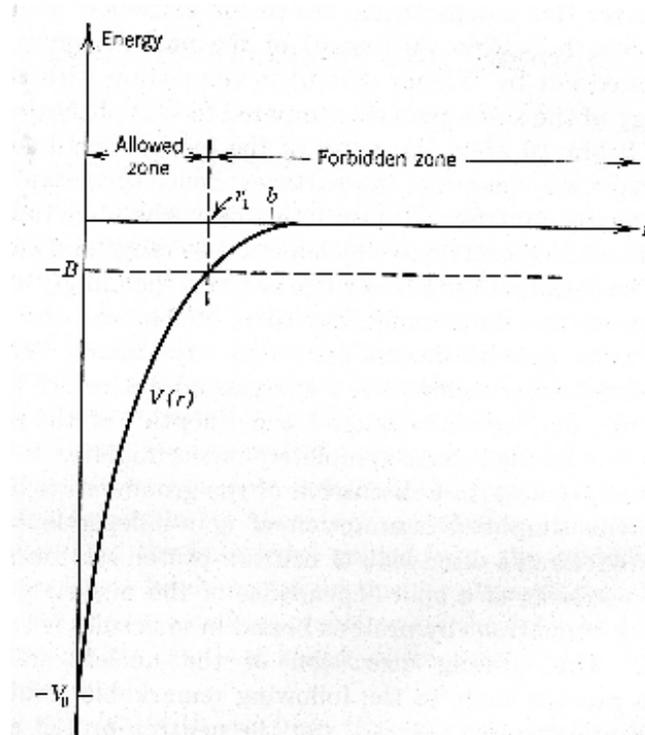


Figura 4. Potencial $V(r)$ correspondiente a fuerzas nucleares atractivas. La zona permitida ($E - V(r) > 0$) es la denominada "allowed zone", mientras la prohibida ($E - V(r) < 0$) es denominada "forbidden zone".

Experimentalmente, se ha mostrado que el rango b es del orden de $2 \cdot 10^{-13}m$. La función de onda (Ψ) para este sistema está dada por la expresión 37:

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)\nabla^2\Psi(\vec{r})+V(r)\Psi(\vec{r})=E\Psi(\vec{r}) \quad (37)$$

donde μ es la masa reducida del sistema ($\mu = \frac{M_n M_p}{M_n + M_p} \approx \frac{M}{2}$), E es la energía del movimiento relativo y \vec{r} es el vector distancia entre las dos partículas.

Las mediciones experimentales para la energía de ligadura del estado fundamental del deuterón dan: $2,226 \pm 0,003MeV$.

Puede esperarse que el estado fundamental presente simetría esférica, *i.e.* $\Psi_0(\vec{r}) = \Psi_0(r)$, entonces, por conveniencia, se reescribe: $\Psi_0(r) = \frac{u(r)}{r}$, de este modo $u^2(r)dr$ representa la probabilidad de encontrar las dos partículas a una distancia entre ellas con valor entre r y $r + dr$. Reemplazando $u(r)$ en la ecuación de Schrödinger, resulta:

$$-\left(\frac{\hbar^2}{M}\right)\left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}\right)+V(r)u(r)=Eu(r) \quad (38)$$

con condiciones de contorno dadas por la expresión 39:

$$u(r) = 0; r \rightarrow \infty \quad (39)$$

La ecuación 39 puede ser re-escrita en manera conveniente, en la forma:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \kappa^2(r)u(r) = 0 \quad (40)$$

donde se ha introducido el “número de onda local” κ definido por:

$$\kappa \equiv \pm \sqrt{\frac{M(E - V(r))}{\hbar^2}} \quad (41)$$

Existe una distancia (r_1 , *tal que* : $r_1 \approx b$) para la cual el potencial $V(r)$ coincide con la energía total E . Resulta pues, que κ asume valores reales en la región $r < r_1$ y valores imaginarios para $r > r_1$, lo cual en términos de mecánica clásica, implica que la primera región es la “zona permitida”, mientras la segunda representa la “zona prohibida”.

Analizando la función $u(r)$ de las ecuaciones 40 y 41, se tiene que: $u(r)$ se comporta como $\sin(\kappa r)$ en la zona $r < r_1$, bajo la acción de la fuerza nuclear, mientras $V(r)$ se hace cada vez mas despreciable en la zona $r > r_1$ y el comportamiento de $u(r)$ se aproxima al de un decaimiento exponencial ($\approx e^{\left(\frac{-\sqrt{2\mu E_0} r}{\hbar}\right)}$).

2.2.. Scattering $n^0 - p^+$

El proceso de *scattering* de neutrones por parte de protones depende fuertemente de la energía del neutrón incidente. Para rangos energéticos por debajo de $10MeV$, la longitud de onda de de Broglie ($\lambda_{DeBroglie} \equiv h/p$ calculada en el sistema centro de masa) resulta significativamente mayor en comparación con el rango de la fuerza nuclear, por consiguiente neutrones con momentum angular orbital mayores a 0 no logran acercarse lo suficiente al protón para sufrir un *scattering*.

El *scattering* se presenta sólo para el caso de neutrones con $l = 0$, fenómeno conocido también como “*S wave scattering*”, y resulta ser isotrópico, bajo la aproximación de protón tratado como partícula libre. Esta última condición resulta satisfecha, si por ejemplo, la energía del neutrón es mucho mayor comparada a la energía de ligadura química que mantiene unido al protón a la estructura material que lo contiene, o bien para energías del neutrón mucho mayores a $1eV$. En este sentido, la presente exposición asume energías en el rango $1eV < E < 10MeV$, dejando de lado el tratamiento de neutrones térmicos y epitérmicos, que resultan de gran relevancia en aplicaciones terapéuticas, y que se estudiarán mas adelante.

Además, la interacción $n^0 - p^+$ será tratada asumiéndola puramente elástica, lo cual excluye situaciones de intercambio como captura neutrónica, sin embargo este último fenómeno presenta sección eficaz despreciable frente a los procesos elásticos. El análisis del proceso de *scattering* elástico será expuesto en términos de la aproximación de fuerzas centrales. El autoestado $|\Psi\rangle$ con valor de energía E debe describir el haz de partículas incidentes mas la componente de partículas que sufrieron *scattering*.

El comportamiento de la función de onda para distancias suficientemente alejadas del centro del sistema resulta como muestra la siguiente expresión:

$$|\Psi(\vec{r})\rangle \approx e^{(ikz)} + f(\theta) \frac{e^{(ikr)}}{r} \quad r \rightarrow \infty \quad (42)$$

donde el primer término corresponde al haz incidente (en dirección z) y el segundo a la componente de *scattering*, cuya amplitud en la dirección θ , respecto de la dirección de incidencia, es $f(\theta)$.

Mientras el número de onda k (representando el valor asintótico de ecuación ??) está dado por 43:

$$k = \sqrt{\frac{ME}{\hbar^2}} \quad (43)$$

donde E se relaciona con la energía del neutrón referida al sistema laboratorio (E_{lab}) por medio de: $E_{lab} = 2E$. La sección eficaz de *scattering* ($d\sigma$) en un ángulo sólido $d\Omega$ entorno a la dirección θ puede calcularse como 44:

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (44)$$

Desarrollando la función de onda en armónicos esféricos y considerando estados S ($l = 0$), que se corresponden con los eventos de *scattering* a energías suficientemente bajas, se obtiene la expresión 45:

$$\Psi_0(r) = \frac{i\sqrt{\pi}}{kr} \left[e^{(-ikr)} - e^{(ikr)} \right] + \sqrt{4\pi} \langle f \rangle \frac{e^{(ikr)}}{r} \quad (45)$$

donde $\langle f \rangle$ representa el valor medio de f (amplitud de scattering), promediado en todos los ángulos. De la ecuación 45 se sigue que la sección eficaz diferencial de scattering, en el centro de masas del sistema, resulta independiente del ángulo, y puede reescribirse como 46:

$$d\sigma = \left(\frac{\sin(\delta)}{k} \right)^2 d\Omega \quad (46)$$

donde δ representa el corrimiento de fase de la función radial $u(r)$, que queda unívocamente determinado por la condición de contorno $u(0) = 0$.

Por medio de consideraciones geométricas del potencial e introduciendo los conceptos de “profundidad del potencial nuclear” y “rango del potencial nuclear”, puede derivarse la siguiente expresión (47) para la sección eficaz de scattering $n^0 - p^+$:

$$\sigma = \frac{4\pi}{(k^2 + R^{-2}) \left[1 - \left(\frac{r_0}{R} \right) + \frac{r_0^2}{4} (k^2 + R^{-2}) \right]} \quad (47)$$

donde R denominado “tamaño del deuterón” queda determinado por la energía de ligadura, por lo tanto el único parámetro libre en la expresión para la sección eficaz $n^0 - p^+$ es el rango efectivo r_0 .

Sin embargo, el desarrollo anterior no ha considerado el spin de los nucleones. Un par de spins de valor $\frac{1}{2}$, en promedio, se alinean (estado de triplete) durante 3/4 del tiempo, y se encuentran con alineaciones opuestas (estado singlete) el restante 1/4 del tiempo.

Por lo tanto, resulta necesario introducir los conceptos de “sección eficaz de scattering del triplete” (σ_t) y “sección eficaz de scattering del singlete” (σ_s), que satisfacen: $\sigma = \frac{3}{4}\sigma_t + \frac{1}{4}\sigma_s$.

2.3.. Scattering $p^+ - p^+$

Muchos experimentos han sido realizados, en base a aceleradores de partículas, para estudiar la interacción protón-protón. La repulsión Coulombiana tiende a separarlos fuera del rango de las fuerzas nucleares.

Para poner de manifiesto los efectos de las fuerzas nucleares en el *scattering* $p^+ - p^+$ es necesario trabajar con protones con energías superiores a unos centenares de keV, de hecho experimentos preliminares hacia 1935 mostraron que a energías de 500 keV, los efectos observados no podían ser atribuidos a interacciones puramente Coulombianas, sino que pudo constatar la presencia de efectos nucleares. Existen, sin embargo, algunas diferencias substanciales entre *scattering* $p^+ - p^+$ y *scattering* $n^0 - p^+$, ya que la interacción $p^+ - p^+$ es provocada conjuntamente por efectos nucleares y Coulombianos, además debe considerarse la indistinguibilidad entre partícula incidente y dispersada, dada por el principio de exclusión de Pauli.

La probabilidad relativa de encontrar 2 protones en la misma posición comparada con la probabilidad de encontrar 2 partículas cualquiera no-cargadas en la misma posición, está dada por el "factor Coulombiano de penetración" (C^2), como se muestra en 48:

$$C^2 = \frac{2\pi\eta}{e^{(2\pi\eta)} - 1} \quad (48)$$

donde: $\eta \equiv \frac{e^2}{\hbar v}$ y v representa la velocidad relativa de las dos partículas. Numéricamente, el factor de penetración resulta $\frac{1}{2}$ para energías relativas $\approx 0,4MeV$.

La indistinguibilidad de las partículas tiene dos efectos. En primer lugar, interacciones como las de la figura 5 resultan indistinguibles. Luego, debido al principio de exclusión de Pauli, la función de onda de dos protones debe ser antisimétrica respecto del intercambio de las partículas, por lo tanto la funciones de onda espaciales simétricas (S,D,G, etc) se asocian sólo con el estado de spin antisimétrico (singlete); mientras las funciones espaciales antisimétricas (P, F, etc.) se asocian a los estados de spin simétricos (triplete).

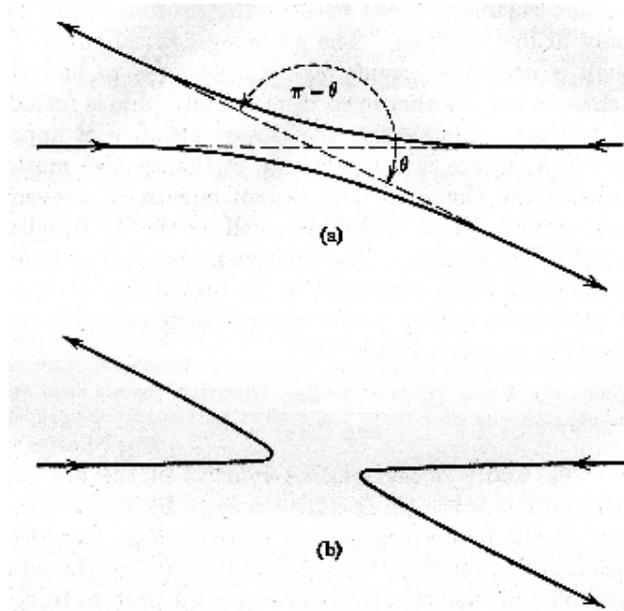


Figura 5. Interacciones entre partículas idénticas que resultan experimentalmente indistinguibles.

Sin embargo, puede mostrarse que para energías por debajo de 10MeV, sólo la función de onda del estado S resulta de relevancia para los efectos de *textit{scattering}*, ya que protones en estados mayores de momento angular orbital se encuentran prácticamente separados fuera del rango de alcance de las fuerzas nucleares. Por lo tanto, experimentos de *scattering* $p^+ - p^+$ a bajas energías proporcionan información solamente sobre estados de spin opuestos (singletes).

La función de onda radial para la interacción $p^+ - p^+$ en presencia de un potencial nuclear $V(r)$ está dada por 49:

$$-\left(\frac{\hbar^2}{M_p}\right)\left(\frac{d^2u}{dr^2}\right) + \frac{e^2}{r}u(r) + V(r)u(r) = Eu(r) \quad (49)$$

y, fuera del rango de alcance de las fuerzas nucleares, la solución de la expresión anterior ($u(r)$) debe comportarse asintóticamente en manera similar a la solución del caso púramente Coulombiano ($u_C(r)$), dada por 50:

$$u_C(r) \approx \sin[kr - \eta \ln(2kr) + \delta_0]; \quad r \rightarrow \infty \quad (50)$$

Puede mostrarse que el único cambio en el comportamiento asintótico considerando la presencia del campo nuclear central es la inclusión de una diferencia de fase δ_n , denominada “*diferencia de fase nuclear*”. Entonces:

$$u(r) \approx \sin[kr - \eta \ln(2kr) + \delta_0 + \delta_n]; \quad r \rightarrow \infty \quad (51)$$

Dado que el estado 1S es la única componente del haz incidente que sufre cambios apreciables en el rango de energías por debajo de 10MeV, debido a los efectos nucleares de la interacción $p^+ - p^+$, la única variación observada respecto del caso púramente Coulombiano es la diferencia de fase δ_n , resulta que la sección eficaz de *scattering* observada a energía E puede parametrizarse en términos de la fase δ_n . El acuerdo encontrado con los resultados experimentales es sorprendente y confirma la validez del modelo (figura 6).

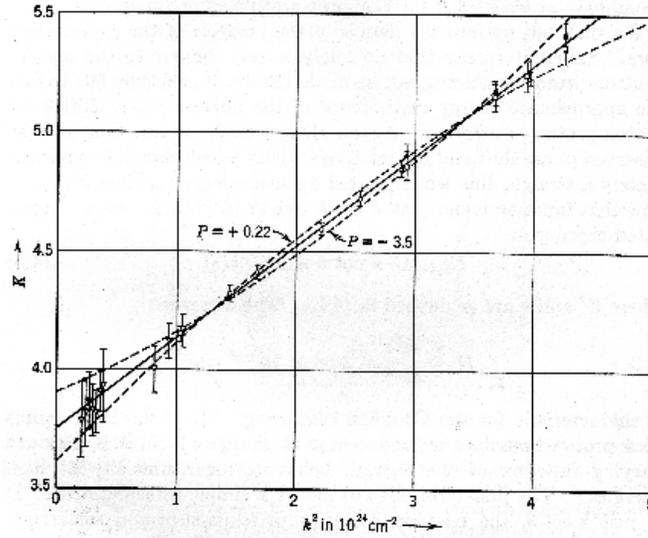


Figura 6. Valores experimentales ($K \equiv \left(\frac{\hbar^2}{Me^2}\right) \left[\frac{-1}{a} + \frac{1}{2}r_0^2k^2 - Pr_0^3k^4 + \dots\right]$) en función de la energía (a es la “*distancia de scattering* $p^+ - p^+$ ”, r_0 es el “*rango efectivo de interacción* $p^+ - p^+$ ” y P es un parámetro relacionado con la forma del potencial nuclear).

Puede concluirse que, asumiendo que la dependencia respecto de r del potencial central sea la misma tanto para protones como neutrones en el estado 1S , resulta que la intensidad de la fuerza nuclear atractiva es muy similar, prácticamente la misma. Por lo tanto, puede considerarse en muy buena aproximación, como válida la hipótesis de que las fuerzas nucleares son independientes de la carga, estableciendo que la fuerza entre dos nucleones en el mismo estado cuántico de spin y momento angular orbital es independiente de la carga, y por lo tanto de qué tipo de nucleones se trate (neutrón o protón).

Sin embargo, estas conclusiones no son definitivas y, de hecho, evidencia experimental moderna como experimentos de scattering a altas energías parecen contradecirla. Una expresión completa para la sección eficaz

diferencial de *scattering* $p^+ - p^+$ correspondiente a la componente S del haz incidente, fué deducida por *Breit et. al.* a partir de consideraciones sobre el *scattering* elástico de Rutherford para interacciones Coulombianas, por medio de la expresión de Breit (52):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4}{E_0^2} \cos(\theta) \times \left[\frac{1}{\sin^4(\theta)} + \frac{1}{\cos^4(\theta)} - \frac{1}{\sin^2(\theta)\cos^2(\theta)} - \frac{2\hbar v \sin(\delta_n)}{e^2 \sin^2(\theta)\cos^2(\theta)} + \left(\frac{2\hbar v}{e^2} \right)^2 \sin^2(\delta_n) \right] \quad (52)$$

donde $E_0 = mv^2$ es la energía cinética de la partícula incidente (protón) en el referencial de laboratorio, y la diferencia de fase nuclear δ_n resulta una función suave creciente de E_0 , alcanzando un valor de 55° para $E_0 = 4MeV$.

El término de interferencia nuclear-Coulomb, siendo lineal en $\sin(\delta_n)$, puede incluso ser útil en la determinación de δ_n para valores pequeños de δ_n .

La expresión de Breit (ecuación 52) se muestra en excelente acuerdo con datos experimentales para energías menores a 10 MeV.

2.4.. Comparación del modelo con datos experimentales

La primera comparación del presente modelo (simple) consistió en evaluar la sección eficaz del deuterio en el límite donde la energía cinética se anula (que resulta ser el valor asintótico de la sección eficaz), *i.e.* debe evaluarse $\sigma(k \rightarrow 0)$ en la ecuación 47. Resulta, entonces:

$$\sigma(k=0) = \frac{4\pi}{R^{-2} \left[1 - \frac{r_0}{R} + \frac{r_0^2 R^{-2}}{4} \right]} = \frac{4\pi R^2}{\left[1 - \frac{r_0}{2R} \right]^2} \quad (53)$$

Ignorando la corrección por rango, se tendría: $\sigma(k \rightarrow 0) \approx 4\pi R^2 \cong 2,33b$.

Se espera, ciertamente que el rango efectivo r_0 sea menor al tamaño del deuterio (R), por lo tanto la corrección por rango (denominador de la expresión anterior) varía en $[1,4]$, de donde resulta: $2,33b \leq \sigma(k \rightarrow 0) \leq 4 \cdot 2,33b = 9,32b$. El valor experimental, confirmado por varios autores es $\sigma(k \rightarrow 0) = (20,4 \pm 0,1)b$.

Si bien el presente modelo predice el orden de magnitud de la sección eficaz, las diferencias con el dato experimental se deben a no haber tenido en cuenta que el estado fundamental del deuterio presenta diferentes configuraciones posibles de spin, explicación que diera Wigner, y que al incorporar este efecto, el modelo se ajusta de manera sorprendente al valor experimental. A partir de los resultados experimentales, se presumió que el valor de spin del deuterio sería $S = 1$, porque experimentalmente se encontraba $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, y $J = 1$; y se trabajaba en la hipótesis en que las contribuciones (para este rango energético) provienen, principalmente, de estados S , *i.e.* $L = 0$.

Por último, el efecto de la energía de ligadura molecular (energía que mantiene al protón unido a la matriz molecular del material en cuestión), produce como efecto un aumento la sección eficaz para valores pequeños de energía, incluso generando aumento notables para energías de incidencia por debajo de 0.1eV.

El hecho de que para energías muy por encima de los valores típicos de ligadura, el modelo represente satisfactoriamente los datos experimentales, se debe a que para este ámbito es despreciable la energía de ligadura y la aproximación de protón libre resulta una excelente aproximación.

2.5.. Apéndice: Revisión de potenciales cuánticos

I. Estados estacionarios en potenciales cuadrados unidimensionales

Sea $V(x)$ el potencial cuadrado dado por: $V(x) = V$ en ciertas regiones del espacio. Para estas regiones, se tiene:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} |\varphi\rangle + \frac{2m}{\hbar} (E - V) |\varphi\rangle = 0 \quad (54)$$

las soluciones a la ecuación de Schrödinger pueden clasificarse según tres categorías, como sigue:

- $E > V$ Se introduce la constante positiva k dada por: $E - V = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ y la solución resulta: $|\varphi\rangle = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}$ (A y A' son constantes complejas).
- $E < V$ (región prohibida clásicamente) Se introduce la constante positiva ρ dada por: $V - E = \frac{\hbar^2 \rho^2}{2m}$ y la solución resulta: $|\varphi\rangle = Be^{\rho x} + B'e^{-\rho x}$ (B y B' son constantes complejas).
- $E = V$ En este caso $|\varphi\rangle$ se reduce simplemente a una función lineal de x .

II. Barrera de potencial

Se considera una partícula sometida a una barrera de potencial unidimensional V como se muestra en la figura 7.

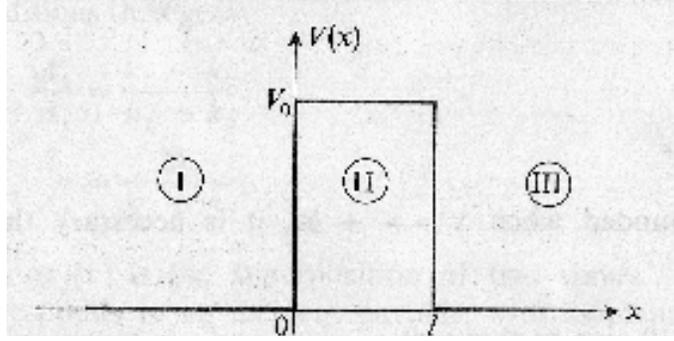


Figura 7. Barrera de potencial unidimensional.

■ CASO I: $E > V_0$

Para cada una de las regiones de la figura 7 se tiene:

$$|\varphi_I(x)\rangle = A_I e^{ik_I x} + A'_I e^{-ik_I x}$$

$$|\varphi_{II}(x)\rangle = A_{II} e^{ik_{II} x} + A'_{II} e^{-ik_{II} x}$$

$$|\varphi_{III}(x)\rangle = A_{III} e^{ik_{III} x} + A'_{III} e^{-ik_{III} x}$$

En caso de partícula (haz) incidente desde región I ($-\infty$) se tiene: $A'_{III} = 0$. Las condiciones de continuidad en $x = l$ dan una expresión para A_{II} y A'_{II} en términos de A_{III} , mientras que para la continuidad en $x = 0$ se obtiene A_I y A'_I en términos de A_{II} y A'_{II} (y consecuentemente en términos de A_{III}). Se obtiene, en particular:

$$A_I = \left[\cos(k_{II} l) - i \frac{k_I^2 + k_{II}^2}{2k_I k_{II}} \sin(k_{II} l) \right] e^{ik_I l} A_{III} \quad (55)$$

$$A'_I = i \frac{k_{II}^2 - k_I^2}{2k_I k_{II}} \sin(k_{II} l) e^{ik_I l} A_{III} \quad (56)$$

Los cocientes $\frac{A'_{II}}{A_I}$ y $\frac{A_{III}}{A_I}$ permiten calcular los coeficientes de Reflexión (R) y Transmisión (T) como se muestra en 57 y 58:

$$R = \left| \frac{A'_{II}}{A_I} \right|^2 = \frac{(k_I^2 - k_{II}^2)^2 \sin^2(k_{II} l)}{4k_I^2 k_{II}^2 + (k_I^2 - k_{II}^2)^2 \sin^2(k_{II} l)} \quad (57)$$

$$T = \left| \frac{A_{III}}{A_I} \right|^2 = \frac{4k_I^2 k_{II}^2}{4k_I^2 k_{II}^2 + (k_I^2 - k_{II}^2)^2 \sin^2(k_{II} l)} \quad (58)$$

de donde puede mostrarse que $R + T = 1$. Expresando los vectores de onda (k) en término de las energías y del potencial ($k_I = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ y $k_{II} = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$), se obtiene 59:

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2\left(\sqrt{2m(E - V_0)} \frac{l}{\hbar}\right)} \quad (59)$$

En particular, la dependencia de T respecto del parámetro l (ancho de la barrera) se muestra en la figura 8.

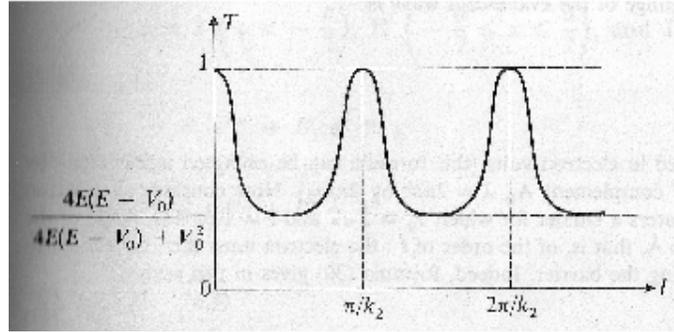


Figura 8. Coeficiente de Transmisión en función del parámetro l .

■ **CASO II: $E < V_0$ (quantum tunneling)**

Para cada una de las regiones de la figura 7 se tiene:

$$|\varphi_I(x)\rangle = A_I e^{ik_I x} + A'_I e^{-ik_I x}$$

$$|\varphi_{II}(x)\rangle = A_{II} e^{\rho_{II} x} + A'_{II} e^{-\rho_{II} x}$$

$$|\varphi_{III}(x)\rangle = A_{III} e^{ik_{III} x} + A'_{III} e^{-ik_{III} x}$$

Y, aplicando las condiciones de continuidad se obtiene 60:

$$T = \left| \frac{A_{III}}{A_I} \right|^2 = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sinh^2 \left(\sqrt{2m(E - V_0)} \frac{l}{\hbar} \right)} \quad (60)$$

En particular, para el límite $\rho_{II} l \ll 1$ se tiene:

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\rho_{II} l} \quad (61)$$

Una aplicación directa e inmediata del resultado precedente es la emisión nuclear alfa, en la que la partícula emitida debe superar la barrera atractiva del núcleo residuo. En este caso, se tiene que el *range* es $\left(\frac{1}{\rho_{II}} \right) \approx \frac{1,96 \cdot 10^{-10} m}{\sqrt{\frac{M}{m_e} (V_0 - E)}}$, donde E y V_0 se expresan en eV, M es la masa de la partícula alfa y m_e es la masa del electrón ($M \approx 4 \times 1840 m_e$).

2.6.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo 3.

2.6.1.. Análisis de elementos de estadística y conceptos básicos de modelos nucleares

Ejercicio 2.1: Analizar y discutir los resultados del Ejercicio 1.3. Considerar el método de la transformada inversa y aplicarlo para resolver el Ejercicio 1.3.

Ejercicio 2.2: Seleccionar 5 isótopos al azar y utilizar los valores de masas atómicas para obtener una estimación de los coeficientes del modelo semi-empírico de Von Weizsäcker.

Ejercicio 2.3: Analizar y discutir el trabajo de H. Levis *New empirical equation for atomic masses* publicado en *Physical Review* (1957).

Ejercicio 2.4: Calcular la masa en reposo de nucleones, para un neutrón y para un protón. Esimar la masa reducida del deuterio (sistema neutrón-protón).

Ejercicio 2.5: Calcular la longitud de onda de de Broglie para un protón con 1 MeV de energía cinética. Esbozar la dependencia funcional de la longitud de onda de de Broglie para neutrones en el rango [1E-3, 1E8] eV.

Ejercicio 2.6: Esbozar la gráfica del comportamiento funcional de la sección eficaz de *scattering* en términos de la energía cinética de neutrones por parte de protones, utilizando valor/es razonable/s para el rango efectivo r_0 , despreciando efectos por spin.

Ejercicio 2.7: Analizar el comportamiento del factor Coulombiano de penetración para la interacción protón-protón en términos de la velocidad relativa entre las partículas.

Ejercicio 2.8: Analizar los resultados experimentales de la figura 11.

Ejercicio 2.9: Emplear la aproximación de Breit para esbozar la dependencia funcional en términos del ángulo de deflexión de la sección eficaz diferencial de *scattering* protón-protón para la componente $l = 0$ del haz incidente, en ausencia de fuerzas nucleares y para un corrimiento de fase de 5 grados..

Ejercicio 2.10: Obtener la dependencia funcional presente en la figura ?? para el Coeficiente de Transmisión según el ancho de la barrera de potencial.

3.. Problema de dos cuerpos a energías intermedias

Desde muchos puntos de vista, la evidencia experimental respecto del comportamiento de nucleones a alta energía resultó inicialmente, y en algunos aspectos aún hoy, de carácter extraña e inesperada.

En particular, resultó evidente el fracaso de los intentos de explicar los fenómenos a altas energías por medio de extrapolaciones a partir de la evidencia y teorías aplicables a bajas energías, para lo cual es posible describir, en manera análoga, las interacciones $p^+ - p^+$ y $n^0 - p^+$ simplemente asumiendo los mismos valores para la profundidad y rango del potencial nuclear. En este sentido, existen 2 resultados de especial interés respecto de las diferencias encontradas para altas energías que merecen destacarse:

- La evidencia experimental para procesos de interacción entre nucleones a alta energía, parece indicar diferencias entre fuerzas $p^+ - p^+$ y $n^0 - p^+$, y por lo tanto, las fuerzas nucleares podrían no ser independientes de la carga (como expuesto en el Capítulo 2, para el caso de energías bajas).
- Los datos correspondientes a altas energías aparentan ser incompatibles con una fuerza nuclear de tipo de intercambio, lo cual resulta necesario para explicar el fenómeno de saturación a bajas energías. Los datos experimentales parecen no mostrar ninguna componente de repulsión entre nucleones en estados antisimétricos (P, F, etc.).

Para altas energías muchos estados de momento angular (S ($l=0$), P ($l=1$), D ($l=2$), F ($l=3$), etc.) contribuyen de manera significativa a la interacción de scattering, cuyos respectivos corrimientos de fases no han sido aún establecidos en manera razonablemente sencilla. La longitud de onda de de Broglie ($\lambda_B = \frac{1}{k}$) resulta mucho menor al rango de la fuerza nuclear y, por lo tanto, la forma exacta del potencial nuclear adquiere mayor importancia e influencia en la dependencia funcional de los corrimientos de fases nucleares respecto de la energía. Además, la presencia del "tensor de fuerzas" [J. Blatt and V. Weisskopf 1963] implica la existencia de una cantidad 4 veces mayor de parámetros independientes.

3.1.. Scattering $n^0 - p^+$ para energías entre 10 y 30 MeV

Este rango energético se conoce como "rango de energías medias".

Desde el punto de vista experimental, los haces de neutrones no son monoenergéticos. Los haces de neutrones utilizados para experimentos de scattering $n^0 - p^+$ se producen por medio de "arrancar" neutrones de deuterones moviéndose rápidamente, obteniéndose neutrones con energía media de unos 100 MeV con una dispersión de aproximadamente 20 MeV. Por lo tanto, los experimentos se realizan con haces polienergéticos con la consecuente pérdida de precisión, especialmente para distinguir propiedades con fuerte gradiente en la energía.

Los primeros resultados experimentales obtenidos por *Amaldi et. al.* muestran una importante preferencia para el scattering en ángulos muy próximos a $\frac{\pi}{2}$. Sin embargo, estos resultados no fueron confirmados por experimentos posteriores.

Según los resultados aceptados actualmente, la distribución angular es básicamente esférica (diferencias menores al 10% entre distribución esférica ideal y resultado experimental) para energías entre 12 y 15 MeV. La sección eficaz total de scattering es aproximadamente $4\pi\lambda_B$, para energías entre 10 y 24 MeV.

Para explicar teóricamente los resultados experimentales puede emplearse la aproximación de Born. En primer lugar, se considera la amplitud de scattering en la ecuación 44, que en la aproximación de Born resulta:

$$f(\theta) = \int_0^\infty \frac{\sin(Kr)}{Kr} W(r) r^2 dr \quad (62)$$

donde:

$$W(r) \equiv -\frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) = -\frac{M}{\hbar^2} V(r) \quad (63)$$

$$K \equiv |k_{fin} - k_{ini}| = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (64)$$

Donde se ha supuesto que en la zona donde predominantemente ocurre el scattering, la función de onda puede aproximarse por e^{ikz} , lo cual es válido si el potencial $V(r)$ es apreciablemente menor a la energía cinética E .

En un sentido absolutamente estricto, la expresión en la ecuación 62 es aplicable solo al *scattering* $n^0 - p^+$ para energías muy altas (mayores a 300 MeV), ya que la suposición de simetría esférica no resulta del todo válida para energías debajo de 300 MeV.

Por lo tanto, se propone agregar un término correctivo a la amplitud de scattering, dado por:

$$F(\theta) = \frac{1}{4\pi} \int f(\theta) d\Omega + g(\theta) \quad (65)$$

donde $g(\theta)$ se determina por medio de la aproximación de Born:

$$g(\theta) = \int_0^\infty \left\{ \frac{\sin(Kr)}{Kr} - \left[\frac{\sin(kr)}{kr} \right]^2 \right\} W(r) r^2 dr \quad (66)$$

Entonces, en la aproximación de Born, la sección eficaz diferencial se calcula como:

$$d\sigma = |F(\theta)|^2 d\Omega = |f(\theta) + g(\theta)|^2 d\Omega \quad (67)$$

A pesar de que esta aproximación es cuantitativamente insuficiente para describir la evidencia experimental, pueden realizarse algunos desarrollos que resultan instructivos, teniendo especial cuidado en la distinción entre estados S y otros.

Desarrollando la ecuación 66 en serie de kr , y considerando la aproximación $kr \leq 1$ (válido para valores de r dentro del rango de alcance de las fuerzas nucleares), resulta que el primer término del desarrollo es $g(\theta) \approx \frac{k^2}{3} \cos(\theta) \int_0^\infty W(r) r^4 dr$, que coincide con un estado P , ya que el exponente 4 es $4 = 2l + 1$; $l = 1$, y la dependencia en k^2 indica que es proporcional a la energía. Por otro lado, $W(r)$ es atractivo, entonces $g(\theta)$ es positivo para *scattering forward* ($0 < \theta < \frac{\pi}{2}$) y negativo para *backscattering* ($\frac{\pi}{2} < \theta < \pi$).

En este sentido, se llega a la siguiente expresión para la sección eficaz de scattering $n^0 - p^+$ en el rango de energías entre 10 y 30 MeV:

$$d\sigma = \frac{3}{4} d\sigma_t + \frac{1}{4} d\sigma_s = \left(B_0 + B_1 \cos(\theta) + B_2 \cos^2(\theta) \right) d\Omega \quad (68)$$

Las funciones B se determinan a partir de ciertas A por medio de: $B_j = \frac{3}{4} A_{j,t} + \frac{1}{4} A_{j,s}$, donde³:

$$A_{0,i} \equiv \left(\frac{\sin(\delta_i) \cos(\delta_i)}{k} \right)^2 + \left(\frac{\sin^2(\delta_i)}{k} \right)^2 = \left(\frac{\sin(\delta_i)}{k} \right)^2 \quad (69)$$

$$A_{1,i} \equiv \frac{2}{3} k^2 \left(\frac{\sin(\delta_i) \cos(\delta_i)}{k} \right) \int_0^\infty W_i(r) r^4 dr \quad (70)$$

$$A_{2,i} \equiv \frac{k^4}{9} \left[\int_0^\infty W_i(r) r^4 dr \right]^2 \quad (71)$$

donde $i = s$ para sinlete y $i = t$ para triplete.

A fines instructivos pueden calcularse los valores precedentes para la interacción $n^0 - p^+$ en las aproximaciones consideradas para el estado S asumiendo una forma exponencial para el potencial de confinamiento nuclear que permita calcular $\int_0^\infty W(r) r^4 dr$ (véase la última sección del Capítulo). Los resultados para potencial exponencial se muestran en la figura 9.

Del análisis riguroso de estos resultados, algunos autores [J. Blatt and V. Weisskopf 1963] han concluido que para energías entre 12 y 15 MeV, la dependencia angular de la sección eficaz de scattering debe ser de la forma $B_0 + B_2 \cos^2(\theta)$, sin embargo estimaciones teóricas [Bethe et. al. 1940] se muestran en desacuerdo.

³Nótese que la integral en la expresión para $A_{2,i}$ va elevada al cuadrado, de acuerdo con lo establecido por los alumnos que cursaron esta materia en 2010, **Lic. Francisco Malano**, **Lic. Pedro Pérez** y **Lic. Carlos Sosa**; contrariamente a como figura en el libro de texto de J. Blatt & V. Weisskopf (pag. 174).

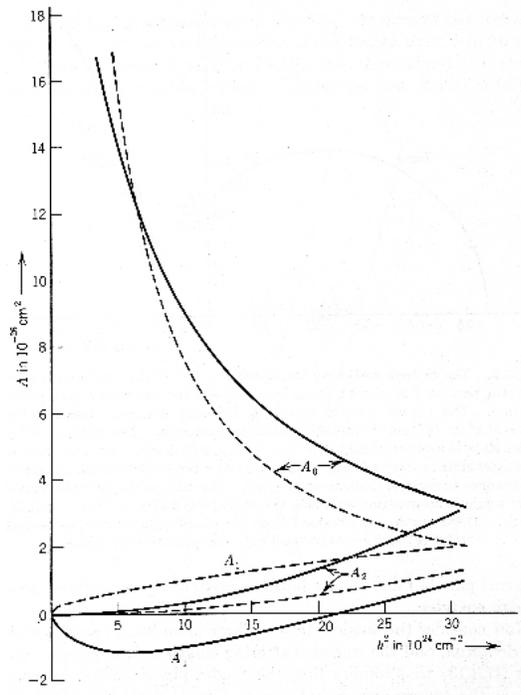


Figura 9. Sección eficaz de scattering $n^0 - p^+$ en términos de los parámetros A_0, A_1 y A_2 .

3.2.. Scattering $n^0 - p^+$ para energías superiores a 30 MeV

Desarrollos teóricos específicos [C. Smith 1966] muestran que la sección eficaz total de *scattering* para la interacción $n^0 - p^+$ correspondiente a haz incidente con componentes de momento angular $0 < l < 2$ está dada por:

$$\sigma(\theta) = \lambda_B^2 \left| \sin(\delta_0)e^{i\delta_0} + 3\sin(\delta_1)e^{i\delta_1}\cos(\theta) + \frac{5}{2}\sin(\delta_2)e^{i\delta_2}[3\cos^2(\theta) - 1] \right|^2 \quad (72)$$

que para δ_1 y δ_2 suficientemente pequeños comparados con δ_0 , se reduce a:

$$\sigma(\theta) \approx \lambda_B^2 \left\{ \sin^2(\delta_0) + \sin(2\delta_0) \left[3\delta_1\cos(\theta) + \frac{5}{2}\delta_2(3\cos^2(\theta) - 1) \right] \right\} \quad (73)$$

Si se consideran modelos de fuerzas internucleares sin intercambio, todas las diferencias de fases δ_0 , δ_1 y δ_2 son positivas, mientras en la consideración del modelo de intercambio de Majorana, la fuerza nuclear es repulsiva para los estados P , y por lo tanto δ_1 es negativa.

Una examinación de la ecuación 73 muestra que para modelos sin intercambio resultaría una mayor componente de “*forward scattering*”, mientras para modelos de intercambio como el de Majorana, la componente de “*backscattering*” es predominante.

Algunos resultados experimentales para la sección eficaz diferencial de interacción $n^0 - p^+$ se muestran en la figura 10.

3.3.. Scattering $p^+ - p^+$ para altas energías

En la interacción $p^+ - p^+$ analizada en el centro de masas, cuando un protón es dispersado en un ángulo θ , el otro protón sufre una deflexión en $\pi - \theta$. Por lo tanto, la sección eficaz diferencial de scattering $p^+ - p^+$ debe ser simétrica respecto de $\theta = 90$.

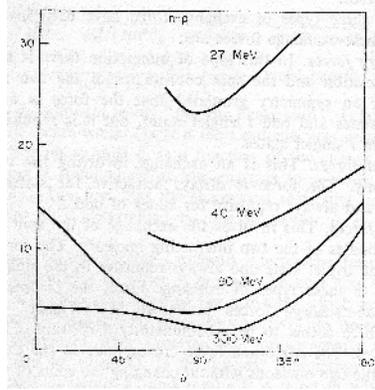


Figura 10. Sección eficaz diferencial de scattering $n^0 - p^+$ (en milibar/steradian).

Para ángulos pequeños la sección eficaz es alta porque en estas condiciones está dominada por la interacción Coulombiana. Contrariamente, fuera de a aquellas zonas, se encuentra experimentalmente que la sección eficaz sea casi independiente del ángulo de *scattering*, como muestra la figura 11.

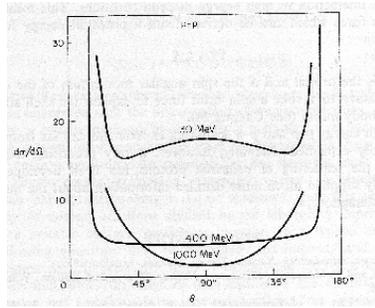


Figura 11. Sección eficaz diferencial de *scattering* $p^+ - p^+$.

Este resultado experimental respecto de la casi independendencia de la sección eficaz de *scattering* $p^+ - p^+$ fué inicialmente extremadamente sorprendente e inesperado, ya que el scattering isotrópico es una característica distintiva de las funciones de onda S , pero no es el caso para protones con energías igual o superiores a 100 MeV. Se preveía que tal vez para ciertos valores de energía, las interferencias entre estados P y D pudiera resultar en un *scattering* próximamente isotrópico, pero no sobre todo el rango tan amplio como muestra la figura 11.

Un resultado aún más sorprendente para la interacción $p^+ - p^+$ es que para energías de entre 150 y 400 MeV, la sección eficaz diferencial de *scattering* resulta, además, independiente de la energía. De hecho, se ha encontrado la siguiente expresión banal para la sección eficaz diferencial de *scattering* $p^+ - p^+$ para energías de entre 150 y 400 MeV:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (3,4 \pm 0,4) mb/str \quad (74)$$

Para energías mayores a 400 MeV, la sección eficaz diferencial de *scattering* $p^+ - p^+$ cambia comportamiento radicalmente debido a la importancia de procesos de creación de "piones" (mesones π). Además, para altas energías, el tensor de fuerzas cobra importancia y se vuelve dominante, la interacción spin-órbita, como enunciado anteriormente, también cobra importancia, motivos por los cuales se pierde la aplicabilidad de los modelos sencillos fenomenológicos.

Si se considera el caso $m = 0$ en la ecuación 79, que se corresponde al caso de *quanta* sin masa en reposo (como fotones, por ejemplo), se recupera la conocida expresión de la ecuación de onda, *i.e.*:

$$\nabla^2 \varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = 0 \quad (80)$$

que se aplica a los campos electromagnéticos (masa de quanta, fotones = 0). En particular, campos electrostáticos se tiene $\frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0$; y se recupera el análogo para el caso del potencial piónico estático, que es la ecuación de Laplace (en ausencia de cargas) o de Poisson (en presencia de “cargas” nucleares):

$$\nabla^2 \varphi = 4\pi q_e \rho \quad (81)$$

En particular, considerando el caso del potencial de “cargas” externas para el sistema de un único nucleón en el origen ($r = 0$), se tiene:

$$\nabla^2 \varphi - \frac{1}{\lambda^2} \varphi = 4\pi g \delta(r) \quad (82)$$

y puede verificarse que el potencial de Yukawa es la solución a la ecuación anterior.

3.5.. Cálculo de Secciones Eficaces de interacción $n^0 - p^+$ a energías intermedias

La sección Eficaz diferencial para energías intermedias se describe por medio de la ecuación 68. En esta Sección se realiza una aplicación del modelo presentado a un caso concreto: el estudio de los parámetros que determinan numéricamente la sección eficaz para la interacción $n^0 - p^+$ a energías intermedias, como se explica detalladamente en cada uno de los los siguientes pasos básicos:

1. Asumiendo la validez de la Aproximación de independencia de la forma del potencial nuclear (*shape-independent approximation*), la expresión para el corrimiento de fase resulta (véase J. Blatt and V. Weisskopf 1963):

$$k \cot(\delta_i) = -\frac{1}{a} + \frac{r_{0,i} k^2}{2} \quad (83)$$

donde $i = s$ es para singlete y $i = t$ para triplete, a es la constante de la función de onda $|\varphi\rangle = C(r - a)$ cuando $E = V$, y r_0 está asociado al rango efectivo de alcance de la fuerza nuclear.

Se sabe además: $k^2 = \frac{M}{\hbar^2} |E - V|$.

2. Diferenciar estados de acoplamiento de spins:

Datos empíricos para deuterio muestran:

$$a_s = 23,7f, r_{0,s} = 3f; a_t = 5,37f, r_{0,t} = 1,7f.$$

3. Asumir un modelo de potencial nuclear.

A modo de ejemplo, y para comparar con los resultados de la figura 9, se asume una forma exponencial para la campana del potencial nuclear. Entonces, $V(r) = -V_0 e^{-2r/\beta}$.

4. Clacular la Integral $\int_0^\infty W(r) r^4 dr$, necesaria para determinar los coeficientes de la Sección Eficaz (ecuación 68).

Se tiene:

$$W(r) = -\frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) = \frac{M}{\hbar^2} V(r) = \frac{V_0 M}{\hbar^2} e^{-2r/\beta}$$

Entonces, se calcula:

$$\frac{V_0 M}{\hbar^2} \int_0^\infty e^{-2r/\beta} r^4 dr \equiv \frac{V_0 M}{\hbar^2} \Xi \quad (84)$$

donde $\Xi \equiv \int_0^\infty e^{-2r/\beta} r^4 dr$ debe calcularse explícitamente.

Recurriendo a métodos de integración por partes, resulta:

$$\Xi = \left[\frac{-\beta}{2} r^4 e^{-2r/\beta} \right]_0^\infty + \frac{\beta}{2} \int_0^\infty e^{-2r/\beta} r^3 dr \quad (85)$$

Repitiendo este procedimiento, se llega a:

$$\Xi = 3\beta^3 \left[\frac{-\beta}{2} r e^{-2r/\beta} \right]_0^\infty + \frac{\beta}{2} \int_0^\infty e^{-2r/\beta} dr = \frac{3}{4}\beta^5 \quad (86)$$

5. Calcular los valores de los coeficientes $A_{j,i}$, en la aproximación actual, aprovechando valores empíricos para a_i y $r_{0,i}$.

De la ecuación 83, se tiene:

$$\cot(\delta_i) = \frac{1}{k} \left[-\frac{1}{a_i} + \frac{r_{0,i}k^2}{2} \right] \quad (87)$$

que resulta (asumiendo los valores empíricos⁴):

$$\text{arccot}(\delta_s) = \frac{1}{k} \left[-\frac{1}{23,7f} + \frac{3fk^2}{2} \right] \quad (88)$$

y

$$\text{arccot}(\delta_t) = \frac{1}{k} \left[-\frac{1}{5,37f} + \frac{1,7fk^2}{2} \right] \quad (89)$$

donde $k^2 = \frac{M}{\hbar^2} |E - V| \approx \frac{M}{\hbar^2} E$.

Entonces, se calcula numéricamente:

$$A_{0,s} = \frac{\sin^2(\delta_s)}{\frac{M}{\hbar^2} E} \quad (90)$$

$$A_{0,t} = \frac{\sin^2(\delta_t)}{\frac{M}{\hbar^2} E} \quad (91)$$

$$A_{1,s} = \frac{2}{3}k^2 \left[\frac{\sin(\delta_s)\cos(\delta_s)}{k} \right] \left(\frac{V_0M}{\hbar^2} \Xi \right) \quad (92)$$

$$A_{1,t} = \frac{2}{3}k^2 \left[\frac{\sin(\delta_t)\cos(\delta_t)}{k} \right] \left(\frac{V_0M}{\hbar^2} \Xi \right) \quad (93)$$

$$A_{2,s} = \frac{k^4}{9} \Xi_s \quad (94)$$

$$A_{2,t} = \frac{k^4}{9} \Xi_t \quad (95)$$

donde $\Xi_i = \Xi(a_i)$.

6. Análisis cualitativo y asintótico

De la expresión 83, se tiene que si $\delta_i = \frac{\pi}{2}$, entonces: $\cot(\delta_i) = 0$ y resulta:

$$\frac{1}{a_i} = \frac{r_{0,i}k^2}{2} \quad (96)$$

⁴Algunos autores indican que $r_{0,s} = 0$

de donde:

$$k^2 = \frac{2}{5,39 \cdot 1,73 \cdot 10^{-30} m^2} = \frac{200}{5,39 \cdot 1,73} 10^{24} cm^{-2} = 21,4484 \cdot 10^{24} cm^{-2} \quad (97)$$

Entonces:

$$E \approx \frac{\hbar^2}{M} k^2 = \frac{(6,58211915 \cdot 10^{-16} eVs)^2}{1840 \cdot 9,1093826 \cdot 10^{-31} kg} 21,4484 \cdot 10^{24} cm^{-2} \quad (98)$$

Resulta, finalmente:

$$E = 8,88 MeV, \Rightarrow E_{lab} = 2E = 17,76 MeV.$$

Para valores de energía que se correspondan con corrimientos de fases $\delta_t > \frac{\pi}{2}$, que se sabe son valores $E_{lab} > 17,76 MeV$, la parte real de la amplitud de onda es positiva, y por lo tanto también lo es A_1 , lo opuesto ocurre para valores de energía menores a 17.76 MeV.

Para el estado de singlete, no existe ligadura del deuterio y por lo tanto $a_s < 0$ y resulta que (expresión 83) $\delta_s \leq \frac{\pi}{2}$, y consecuentemente $A_{1,s} \geq 0 \forall k$.

3.6.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo refProblema de los cuerpos a energías intermedias

Ejercicio 3.1: Repasar el significado conceptual y las implicancias de la aproximación de Born. Cuáles son las aproximaciones o asumpciones introducidas?

3.6.1.. Scattering de nucleones

Ejercicio 3.2:

1. Estimar la sección eficaz total del hidrógeno para neutrones de 18 MeV.
2. En base a los argumentos expuestos los Capítulos 2. y 3., estimar el coeficiente de transmisión para un haz de protones de 300 MeV incidiendo sobre un gas de hidrógeno puro en condiciones normales de presión y temperatura contenido en un recinto de sección transversal constante y de 10 cm de longitud.

Ejercicio 3.3: Verificar que el potencial de Yukawa satisface la siguiente ecuación:

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{\lambda^2} \psi = 4\pi g \delta(r)$$

4.. Corrimiento de fase como evidencia de scattering $n^0 - p^+$

Desde un punto de vista generérico, los procesos de colisión entre partículas pueden describirse por medio de la figura a continuación.

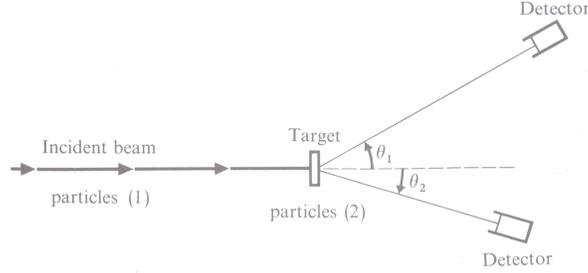


Figura 13. Diagrama de experimentos de colisión.

Mientras que la dispersión elástica debido a un potencial de interacción se define esquemáticamente como sigue:

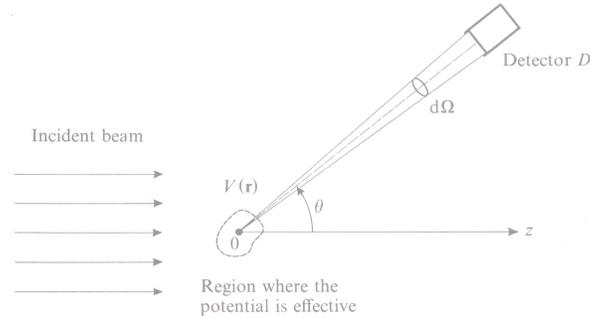


Figura 14. Esquema de interacción debido a un potencial.

Como se presentó en secciones precedentes, al colocar el detector a distancias suficientemente largas respecto de la zona de influencia del potencial, y realizando mediciones variando la posición del mismo. *i.e.* los ángulos θ y ϕ ; se obtiene la probabilidad de detectar el haz dispersado dentro del ángulo sólido subtendido por el detector (véase figura 14) centrado en θ y ϕ . Es decir, se obtiene la *sección eficaz diferencial* ($d\sigma$) a partir de:

$$dn = \Phi_{in} \sigma(\theta, \phi) d\Omega \quad (99)$$

donde dn es el conteo en la medición experimental ($dn = dn(\theta, \phi)$) y Φ_{in} es el flujo del haz incidente. Por lo tanto, la sección eficaz total se obtiene de:

$$\sigma = \int_{\Omega} d\sigma(\theta, \phi) d\Omega \quad (100)$$

4.1.. Ecuación integral del Scattering

Retomando la ecuación de Schrödinger para la dinámica de una partícula en un potencial $V(r)$:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r}) \quad (101)$$

donde:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} \quad (102)$$

Y puede re-escribirse como:

$$\left[\nabla^2 + k^2 - U(\vec{r}) \right] \phi(\vec{r}) = 0 \quad (103)$$

donde se utilizó: $E \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ y $V(\vec{r}) \equiv \frac{\hbar^2}{2\mu} U(\vec{r})$

La expresión anterior 103 puede re-escribirse como:

$$\left[\nabla^2 + k^2 \right] \phi(\vec{r}) = -U(\vec{r}) \phi(\vec{r}) \quad (104)$$

Utilizando la función de Green $G(\vec{r})$, se tiene que, si con $\phi_0(\vec{r})$ solución de $[\nabla^2 + k^2] \phi_0(\vec{r}) = 0$ entonces toda función $\phi(\vec{r})$ que cumpla:

$$\phi(\vec{r}) = \phi_0(\vec{r}) + \int d^3 r' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \phi(\vec{r}') \quad (105)$$

será solución de la ecuación 104.

A partir de las propiedades de la función de Green, $[\nabla^2 + k^2] G(\vec{r}) = \delta(\vec{r})$, se tiene que $[\nabla^2 + k^2] G(\vec{r})$ es idénticamente 0 en regiones que no contengan el origen de coordenadas.

Resolviendo la ecuación diferencial, se obtienen dos expresiones para la función de Green:

$$G_{\pm}(\vec{r}) = \frac{-1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \quad (106)$$

y puede verse que: $\nabla^2 G_{\pm}(\vec{r}) = -k^2 G_{\pm}(\vec{r}) + \delta(\vec{r})$. En este sentido $G_+(\vec{r})$ se denomina *outgoing* y $G_-(\vec{r})$ *incoming*.

En base a la figura siguiente (15), se tiene:

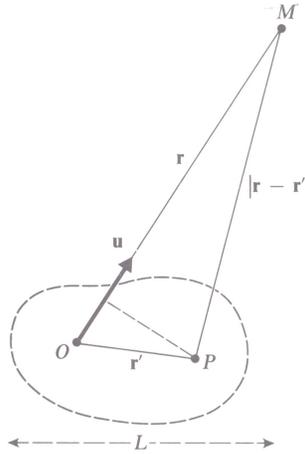


Figura 15. Esquema para aproximar $|\vec{r} - \vec{r}'|$.

$$|\vec{r} - \vec{r}'| \approx r - \vec{u} \cdot \vec{r}' \quad (107)$$

donde \vec{u} es el versor en la dirección de \vec{r} . En la aproximación $r \rightarrow \infty$ se tiene:

$$G_+(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{-1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \approx \frac{-1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik\hat{u}\cdot\vec{r}'} \quad (108)$$

De aquí se determinará la función de onda de scattering estacionaria $v_k^{Dif}(\vec{r})$, asociada al nivel de energía dado por $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$, para el límite $r \rightarrow \infty$

$$v_k^{Dif}(\vec{r}) \approx e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3r' e^{ik\hat{u}\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}') v_k^{Dif}(\vec{r}') \quad (109)$$

que depende solo del versor \hat{u} y de los ángulos polares θ y ϕ .

De aquí se deduce, y puede recuperarse la expresión para la amplitud de scattering $f_k(\theta, \phi)$ presentada en secciones anteriores:

$$f_k(\theta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{ik\hat{u}\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}') v_k^{Dif}(\vec{r}') \quad (110)$$

4.2.. Ondas parciales en potencial $V(r)$ y corrimiento de fase

La ecuación diferencial para la componente radial ($u_{k,l}(r)$) de la función de onda es:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_{k,l}(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} u_{k,l}(r) \quad (111)$$

Y se satisface $u_{k,l}(r=0) = 0$. La función de onda es:

$$\Phi_{k,l,m}(\vec{r}) = \frac{u_{k,l}}{r} Y_m^l(\theta, \phi) \quad (112)$$

Por tanto, a fines prácticos, es como resolver un problema 1-D para una partícula de masa μ en un potencial como muestra la figura 16

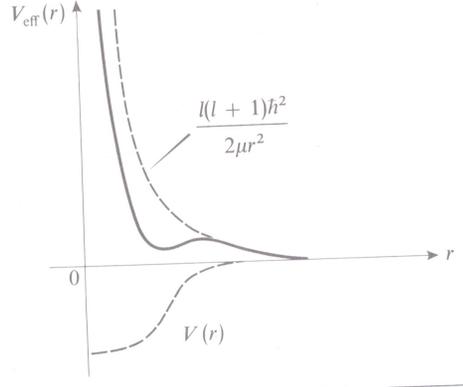


Figura 16. Potencial efectivo.

Entonces, se tiene:

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad r > 0$$

$$V_{eff}(r) \rightarrow \infty \quad r < 0$$

En el límite $r \rightarrow \infty$: $\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] u_{k,l} \approx 0$ entonces, la solución es:

$$u_{k,l}(r) \approx A e^{ikr} + B e^{-ikr} \quad (113)$$

que representa la superposición entre una onda incidente y una una reflejada. Sin embargo, debido a que $V(r) \rightarrow \infty$ para $r \rightarrow 0$ no es posible tener onda transmitida, entonces la intensidad de la onda inidente iguala a la de la onda reflejada, en el comportamiento asintótico, *i.e.* $|A| = |B|$.

Por lo tanto:

$$u_{k,l}(r) \approx |A| \left[e^{ikr} e^{i\delta_A} + e^{-ikr} e^{i\delta_B} \right] \quad (114)$$

que puede ser escrito como:

$$u_{k,l}(r) \approx C \sin[kr - \beta_l] \quad (115)$$

Y β_l queda completamente determinado por las condiciones de continuidad para $u_{k,l}$. En el caso de potencial nulo ($V(r) = 0 \forall r$) se tiene: $\beta_l = l \frac{\pi}{2}$. Entonces, aprovechando esto, se re-escribe:

$$u_{k,l}(r) \approx C \sin \left[kr - l \frac{\pi}{2} + \delta_l \right] \quad (116)$$

donde δ_l es el corrimiento de fase de la función de onda parcial $\Phi_{k,l,m}(\vec{r})$ debido al potencial $V(r)$ y para el estado de momento angular l , que como se espasa depende de la energía (a través de k).

Utilizando el método de construcción de stados estacionarios de *scattering* por medio de ondas parciales se obtiene la siguiente expresión para la amplitud de *scattering* en término de los corrimientos de fase δ_l :

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{ik\delta_l} \sin(\delta_l) Y_l^{m=0}(\theta) \quad (117)$$

donde se asume simetría azimutal.

4.3.. Cálculo de la sección eficaz

La sección eficaz diferencial está dada por:

$$\sigma(\theta) = |f_k(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{ik\delta_l} \sin(\delta_l) Y_l^{m=0}(\theta) \right|^2 \quad (118)$$

De donde se obtiene:

$$\sigma = \int d\Omega \sigma(\theta) = \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'}^{\infty} 4\pi \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} e^{ik(\delta_l - \delta_{l'})} \sin(\delta_l) \sin(\delta_{l'}) \int d\Omega Y_l^{0*}(\theta) Y_{l'}^{0*}(\theta) \quad (119)$$

Y, debido a la ortonormalidad de los armónicos esféricos, se obtiene:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l) \quad (120)$$

Esta expresión permite calcular la sección eficaz, ya que para potenciales de alcance finito, es suficiente considerar las contribuciones de momentos angulares con $l < l_{Max}$, donde l_{Max} es el límite superior considerado.

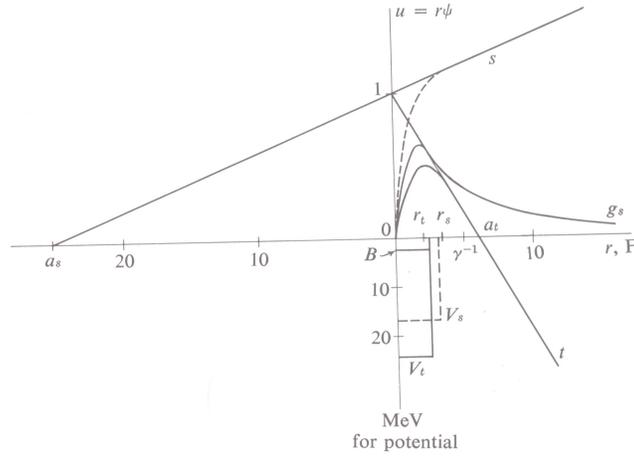


Figura 17. Potencial y autofunciones para estado s y t. Aquí: $B = 2,226\text{MeV}$, $r_t = 2,04\text{F}$, $r_s = 2,37\text{F}$, $V_t = -25,5\text{MeV}$, $V_s = -16,6\text{MeV}$ y $\gamma^{-1} = 4,32\text{F}$

4.4.. Estado fundamental del deuterio 3S_1

Experimentalmente se encuentra que el momento angular orbital del estado fundamental del deuterio es 0. La ecuación de movimiento para el estado fundamental es:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) u = 0 \quad (121)$$

para $\mu \approx \frac{M}{2}$, donde M es la masa de un nucleón ($M_{p^+} \approx M_{n^0}$).
Utilizando un potencial cuadrado se obtiene:

$$\begin{aligned} u(r) &= A \sin(k_t r) \quad r \leq r_0 \quad k_t \equiv \frac{1}{\hbar} [M(E - V_t)] \\ u(r) &= B e^{-\gamma(r-r_0)} \quad r \geq r_0 \quad \gamma \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{M|E|} \end{aligned} \quad (122)$$

Y la condición de continuidad para $u(r)$ impone:

$$\frac{u'(r_0)}{u(r_0)} = k_t \cot g(k_t r_0) = -\gamma \quad (123)$$

Y también:

$$A = B \left(\frac{V_t}{E - V_t} \right) \quad (124)$$

Utilizando la información experimental sobre la energía de ligadura $E = 2,2245\text{MeV}$ se obtiene $\gamma = 2,32 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-1}$.

Una aproximación a la función de onda radial para el deuterio es:

$$u(r) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi}} e^{-\gamma r} \quad (125)$$

Y, γ^{-1} puede usarse como una estimación del “radio” del deuterio.

4.5.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo IV

4.5.1.. Corrimiento de fase y sección eficaz

Ejercicio 4.1: Mostrar que toda función de onda $\phi(\vec{r})$ dada por $\phi(\vec{r}) = \phi_0(\vec{r}) + \int d^3r' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \phi(\vec{r}')$ donde $\phi_0(\vec{r})$ es solución de $[\nabla^2 + k^2] G(\vec{r}) = \delta(\vec{r})$; es solución de la ecuación $[\nabla^2 + k^2] \phi(\vec{r}) = -U(\vec{r}) \phi(\vec{r})$.

Ejercicio 4.2: Suponiendo que de manera experimental se determina que el corrimiento de fase en la interacción n^0 - p^+ para el estado de momento angular l es dependiente del ángulo de dispersión θ a través de la función $g(\theta)$.

1. Cómo puede estimarse la sección eficaz diferencial?
2. Esbozar gráficamente la dependencia según la energía de la sección eficaz para el caso $g(\theta) = C$, donde C es una constante, para n^0 incidentes y p^+ asumidos libres, correspondiente a n^0 dispersados a 45 grados.
- 3.
4. Esbozar gráficamente la dependencia según el ángulo de dispersión la sección eficaz para el caso $g(\theta) = \cos(\theta)$, para n^0 incidentes de 10MeV y p^+ asumidos libres.

Ejercicio 4.3: En referencia al gráfico de la figura 17, y conociendo valores experimentales para los parámetros del deuterio, estimar la profundidad efectiva del potencial nuclear (V_l) para el estado fundamental del deuterio.

5.. Tracking de partículas y transporte de radiación

5.1.. Repaso de colisión entre partículas cargadas

De manera general, la descripción completa del proceso de interacción puede realizarse si se conoce con detalle la fuerza que actúa.

Para ejemplificar por medio de un caso simple, considérese una partícula de masa M_1 y carga $z_1 q_e$ moviéndose con velocidad v_1 en su aproximación a una partícula -asumida estacionaria y libre- de masa M_2 y carga $z_2 q_e$, y la interacción considerada es electrostática, resulta de la teoría de Rutherford que la fuerza actuante entre las partículas es:

$$F = \frac{z_1 z_2 q_e^2}{r^2} \quad (126)$$

donde r es la distancia entre las partículas.

Por simplicidad, siguiendo el tratamiento de Rutherford y a modo de ejemplo, se considera el caso en que se trate de fuerza repulsiva con $M_2 \gg M_1$.

Puede determinarse la órbita a partir de las leyes de conservación de momento y energía y luego puede calcularse⁵ la sección eficaz diferencial como sigue:

$$-d\sigma = \sigma(\theta) d\Omega = 2\pi \frac{b^2}{8} \cotg\left(\frac{\theta}{2}\right) \operatorname{cosec}^2\left(\frac{\theta}{2}\right) d\theta \quad (127)$$

De donde puede calcularse la cantidad de partículas dN dispersadas en el ángulo sólido $d\Omega$ entorno a θ :

$$dN = n_0 \Delta z N_{sc.c.} \left(\frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{2\mu v_1^2} \right) \operatorname{cosec}^4\left(\frac{\theta}{2}\right) d\Omega \quad (128)$$

Donde n_0 es la cantidad de partículas incidentes por unidad de tiempo, $N_{sc.c.}$ es la cantidad de centros dispersores por unidad de volumen y Δz es el espesor atravesado en el blanco.

Como queda claro en las ecuaciones 127 y 128, así como en los modelos de interacción estudiados anteriormente, la determinación de cantidades como la sección eficaz total o la cantidad total de partículas dispersadas para todo ángulo, requiere de resolver las ecuaciones 127 y 128 o similares, por lo que en definitiva resulta necesario calcular la integral de, en términos generales, las densidad de probabilidad.

5.2.. Transporte de radiación y metodologías de integración numérica

El proceso de transporte de radiación se describe en modo completo por medio de la ecuación de transporte de Boltzmann:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, \Omega, E, t_0) = & \int_0^\infty e^{-\beta} \left[\int \int \Sigma_s(\vec{r} - s\Omega; \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) \Psi(\vec{r} - s\Omega; \Omega', E', t - \frac{s}{v}) d\Omega' dE' \right] ds \\ & + \int_0^\infty S(\vec{r} - s\Omega; \Omega, E, t - \frac{s}{v}) ds \end{aligned} \quad (129)$$

donde Ψ es el flujo angular de partículas, S es la fuente de partículas independiente de Ψ , \vec{r} es el vector posición, Ω es el ángulo sólido, E es la energía, t el tiempo s es la distancia a lo largo de la trayectoria y v es la velocidad. Las variables primadas representan el nuevo valor una vez ocurrido el cambio de estado de fase. Además, el parámetro β es la "densidad óptica" definido por:

$$\beta \equiv \int_0^s \Sigma_t(\vec{r} - s'\Omega, E) ds' \quad (130)$$

⁵Véase, por ejemplo *Nuclear Physics* de W. Burcham.

En ambos casos, Σ_s y Σ_t representan la sección eficaz macroscópica de *scattering* y total, respectivamente; definidas por:

$$\Sigma \equiv N\sigma \quad (131)$$

donde σ es la sección eficaz microscópica y N es la densidad de centros dispersores.

Como puede verse, resolver la ecuación de transporte, así como calcular cantidades como secciones eficaces requiere de la determinación de integrales que, en muchas ocasiones, resulta muy difícil o hasta imposible resolver en manera analítica. En estas situaciones se recurre a métodos numéricos para poder describir los procesos de interacción y transporte de radiación.

5.2.1.. Técnicas numéricas Monte Carlo para evaluar integrales definidas

A pesar de que, *a priori*, puede parecer que el método Monte Carlo solo se limita a problemas probabilísticos, contrariamente resulta muy útil y ventajoso para resolver problemas de índole determinística.

En particular, el método Monte Carlo resulta muy conveniente para estimar numéricamente integrales definidas.

La técnica se basa en el teorema del valor medio, es decir: Para cualquier función continua $f(x)$, existe un valor constante \bar{f} (denominado valor medio) para el cual se cumple:

$$\int_a^b f(x) dx = (b-a) \bar{f} \quad (132)$$

Metodología Monte Carlo para evaluar integral definida

Un modo de resolver la ecuación 132 es determinar el valor de la constante \bar{f} . esto puede lograrse por medio de evaluar la función en muchos puntos aleatorios x_j dentro del dominio, para estimar \bar{f} por medio de:

$$\bar{f} \approx \langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_j) \quad (133)$$

Y puede verse, que el teorema del límite central garantiza que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle f \rangle = \bar{f} \quad (134)$$

Esta técnica permite estimar \bar{f} por medio de un número finito N de puntos de evaluación x_j ($j = 1, \dots, N$), aunque es claro que cualquier estimación al valor de la integral definida tendrá incorporada la correspondiente incerteza. Para contrarrestar este inconveniente, existen diferentes metodologías para “mejorar” el procedimiento, denominadas *técnicas de reducción de varianza*.

5.2.2.. Cantidades importantes en transporte de partículas

Una partícula viajando en un medio material, caracterizado por la sección eficaz macroscópica Σ_t , realiza un recorrido en línea recta entre un evento de colisión y el subsiguiente.

Para la aproximación de isotropía y homogeneidad en el medio material, resulta que la probabilidad de colisión es uniforme a lo largo de la trayectoria recorrida, independientemente de la dirección de movimiento. Por lo que la distribución de colisiones a lo largo de camino recorrido (denominado *path*) se calcula a partir de:

$$\frac{dN_{col.}}{ds} = -\Sigma_t N_{col.} \quad (135)$$

donde $N_{col.}$ representa la cantidad de partículas que alcanzan la distancia s antes de sufrir la primer colisión. Entonces, se tiene:

$$N_{col.}(s) = N_{col.}(0) e^{-\Sigma_t s} \quad (136)$$

Lo que implica que el número de partículas que viajan una distancia s entre colisiones sucesivas decrece exponencialmente al aumentar el valor de s .

En particular, resulta de gran importancia definir la distancia promedio que viaja una partícula antes de sufrir una colisión:

$$\lambda \equiv \frac{\int_0^{\infty} s e^{-\Sigma_t s} ds}{\int_0^{\infty} e^{-\Sigma_t s} ds} = \Sigma_t^{-1} \quad (137)$$

La cantidad λ es precisamente el momento de primer orden de la distribución de de probabilidad para $N_{col.}(s)$ y se denomina *camino libre medio*.

5.2.3.. Tracking y etapas en el modelado de transporte de radiación

Desde un punto de vista general, el procedimiento para modelar numéricamente el proceso de transporte de radiación requiere de realizar las siguientes etapas:

1. **Definición del problema**

Descripción física de la geometría del problema y los materiales constituyentes. Tipos de interacciones a considerar, escape de geometría, etc.

Definición de propiedades físicas y geométricas de la fuente de radiación.

2. **Tracking - Caminata aleatoria (random walk)**

Selección de una fuente de partículas.

Determinar posiciones de colisión.

Determinar tipo de interacción.

Determinar resultado de la interacción.

Completar la "historia".

3. **Cómputo de respuestas**

Aprovechar la etapa de anterior para calcular cantidades de interés, típicamente se realiza en simultáneo con la etapa anterior de *tracking* caminata aleatoria, pero también puede calcularse respuestas *post-tracking*.

5.3.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo V

5.3.1.. Cálculo de integrales definidas y tracking de partículas

Ejercicio 5.1: Utilizar el método Monte Carlo para estimar el valor de:

$$\int_0^{10} \frac{1}{1+x^2} dx$$

Realizar una estimación con al menos 4 cifras significativas correctas, por medio del cálculo de incerteza σ según

$$\sigma(N) = \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}{N}}$$

Ejercicio 5.2: Estimar, con al menos 5 dígitos correctos el valor medio y calcular desviación standard de una sección eficaz total Σ_t hipotética dada por:

$$d\Sigma_t = \frac{1}{1 - e^{-\cos(\theta)}} d\Omega$$

Ejercicio 5.3: Calcular, en función de la velocidad, la proporción de partículas que se dispersan con ángulo dentro del cono de 10 grados de apertura entorno a la dirección de incidencia en interacción Rutherford de partículas cargadas. Repetir el cálculo para el cono de igual apertura entorno a 45 grados. Considérese un haz incidente de partículas de masa M y carga $+q_e$ colisionando con un blanco de masa $4M$ y carga $+2q_e$ y conocida la densidad de centros dispersores.

6.. Radioactividad natural y decaimiento nuclear

6.1.. Teoría continua: una substancia

La Ley Fundamental de decaimiento radioactivo puede enunciarse del siguiente modo:

Dada una cierta substancia, la probabilidad de que ésta decaiga durante el intervalo dt está dada por λdt . La constante λ se llama “constante de decaimiento”, tiene unidades de inverso de tiempo y es una característica de la substancia.

El caso más sencillo involucra una única substancia radioactiva que inicialmente ($t = 0$) cuenta con $N(0)$ ($N(0) \gg 1$) átomos de modo que la cantidad de átomos presentes a tiempo t ($N(t)$) pueda ser considerada una variable continua. Entonces:

$$-dN = \lambda N dt \quad (138)$$

que integrando con la condición inicial correspondiente ($N(t = 0) = N(0)$), resulta:

$$N(t) = N(0)e^{-\lambda t} \quad (139)$$

La fórmula anterior (ecuación 139) es una formulación equivalente de la Ley Fundamental de Decaimiento.

Para aplicaciones prácticas, resulta útil introducir los siguientes parámetros: $\tau \equiv \frac{1}{\lambda}$ (vida media) y $T \equiv \frac{\ln(2)}{\lambda}$ (tiempo medio). La vida media (τ) representa la duración media de los átomos y puede obtenerse de calcular:

$$\tau = \frac{1}{N(0)} \int_0^{\infty} \lambda N(t) dt = \frac{1}{N(0)} \int_0^{\infty} N(0)e^{-\lambda t} dt = \frac{1}{\lambda} \quad (140)$$

y puede interpretarse gráficamente como se indica la figura 18 a continuación.

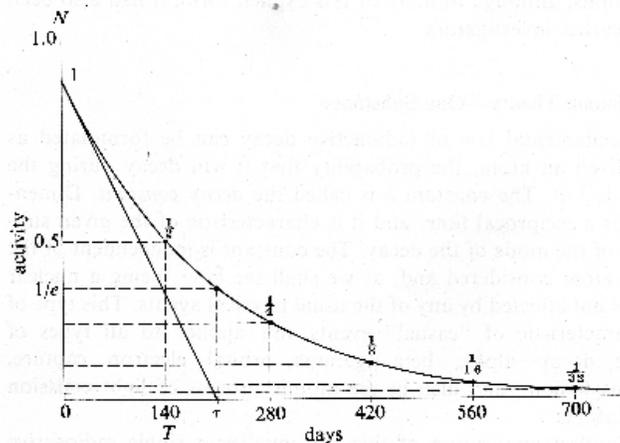


Figura 18. Curva de decaimiento.

6.2.. Teoría continua y *Branching*

Generalmente, una substancia radioactiva decae dando lugar a otra nueva substancia también radioactiva. En este sentido, se dice que las substancias son “genéticamente emparentadas”, siendo la “madre” aquella original, mientras la “hija” es la secundaria. Este razonamiento se extiende también para otras “generaciones”. A veces, una substancia original decae por medio de 2 procesos diferentes (fenómeno conocido como “ramificación” o *Branching*), dando lugar por tanto a dos “hijas”. En la figura 19 se muestran ejemplos de decaimientos radioactivos “generacionales”.

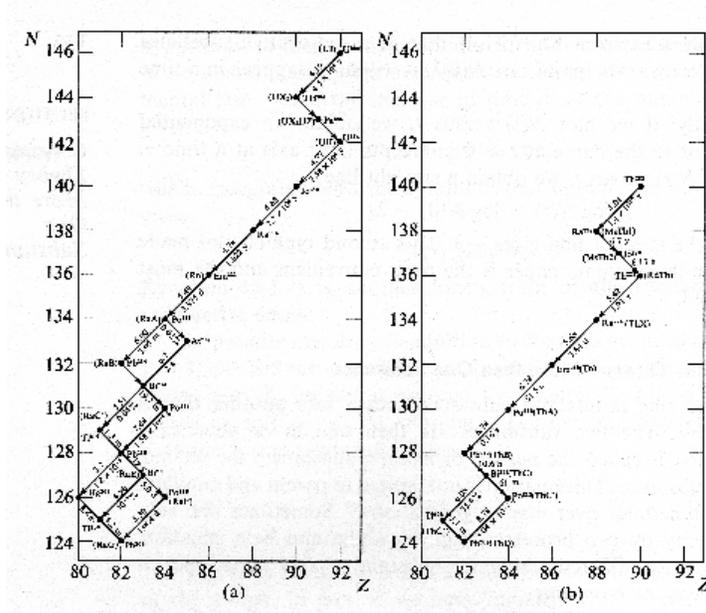


Figura 19. Familias de decaimiento natural: a) U^{238} , b) Th^{232} .

Considerando el caso más simple (sin *Branching*) se tiene que inicialmente (a $t = 0$) la presencia de las sustancias I, II es $N_I(0)$ y $N_{II}(0)$, las cuales son “genéticamente parientes”. Se requiere conocer las cantidades $N_I(t)$ y $N_{II}(t)$. La sustancia I (madre) decae según la ley establecida en la ecuación 139, mientras la sustancia II satisfice:

$$\frac{dN_{II}}{dt} = \lambda_I N_I - \lambda_{II} N_{II} \quad (141)$$

De manera análoga, en caso de existir una tercer sustancia (de segunda “generación”) se tendría:

$$\frac{dN_{III}}{dt} = \lambda_{II} N_{II} - \lambda_{III} N_{III} \quad (142)$$

... y así sucesivamente.

Las ecuaciones anteriores (139, 141 y 142) forman un sistema lineal de ecuaciones diferenciales que puede resolverse como sigue:

$$\begin{aligned} N_1 &= A_{1,1} e^{-\lambda_1 t} \\ N_2 &= A_{2,1} e^{-\lambda_1 t} + A_{2,2} e^{-\lambda_2 t} \\ N_3 &= A_{3,1} e^{-\lambda_1 t} + A_{3,2} e^{-\lambda_2 t} + A_{3,3} e^{-\lambda_3 t} \\ &\dots = \dots \\ N_k &= A_{k,1} e^{-\lambda_1 t} + A_{k,2} e^{-\lambda_2 t} + \dots + A_{k,k} e^{-\lambda_k t} \end{aligned}$$

donde los coeficientes $A_{i,j}$ deben determinarse de manera de satisfacer las condiciones iniciales ($N_k(0) = A_{k,1} + \dots + A_{k,k}$). Resulta, pues⁶:

$$A_{i,j} = A_{k-1,i} \frac{\lambda_{k-1}}{\lambda_k - \lambda_i} \quad (i \neq j) \quad (143)$$

⁶ Asumiendo que todas las constantes de decaimiento son diferentes, en caso contrario deben considerarse soluciones diferentes que involucran términos del tipo $t e^{-\lambda t}$ y $t^2 e^{-\lambda t}$.

Algunas situaciones particulares resultan de gran interés práctico, como el caso en que inicialmente solo existe sustancia de tipo 1 en cantidad $N_1(0)$. Se tiene entonces:

$$\begin{aligned} N_1(t) &= N_1(0)e^{-\lambda_1 t} \\ N_2(t) &= N_1(0) \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} [e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}] \\ \dots &= \dots \end{aligned}$$

Otra situación de particular interés se presenta al estudiar una mezcla de sustancias radioactivas mantenidas indisturbadas por mucho tiempo. En la consideración de que λ_s sea la menor de las constantes de decaimiento en la serie, puede deducirse la proporción de cantidad de cada sustancia que se encuentre en la serie de decaimiento por debajo de aquella de constante λ_s respecto de la cantidad de sustancia de constante λ_s resulta independiente del tiempo. Esta situación se denomina "*Equilibrio transitorio*". Mientras, si ocurre además que $\lambda_s \ll \lambda_j$ para todas las j sustancias por debajo de s en la cadena, puede demostrarse la aproximación:

$$\frac{N_j}{N_s} = \frac{\lambda_s}{\lambda_j} \quad (144)$$

y esta condición se conoce como "*Equilibrio secular*".

La próxima situación de interés especial es el caso en que una sustancia radioactiva inicialmente ausente es formada a tasa constante. En este caso, la ley del proceso es:

$$\frac{dN}{dt} = Q - \lambda N \quad (145)$$

donde Q es la cantidad de sustancia formada por unidad de tiempo (tasa). La solución es inmediata:

$$N(t) = \frac{Q}{\lambda} (1 - e^{-\lambda t}) \quad (146)$$

y por ello, $\frac{Q}{\lambda}$ se conoce como el número de saturación y se denota como N_∞ .

Finalmente, se considera el caso en que una sustancia radioactiva decae a través de más de un único mecanismo, por ejemplo decaimiento por emisión alfa, beta⁺, beta⁻, gamma, etc. De manera general, se considera una sustancia radioactiva que decae por medio de 2 mecanismos (A y B), cada uno de estos mecanismos (canales) de decaimiento se conoce como "ramificación" o *branching*. La probabilidad de decaimiento a través del branching A es $\lambda_A dt$ (idem B). Entonces, la probabilidad total de decaimiento en dt por medio de cualquiera de los mecanismos está dada por: $(\lambda_A + \lambda_B) dt$. Entonces:

$$\frac{dN}{dt} = -(\lambda_A + \lambda_B) N \quad (147)$$

La vida media de la sustancia (τ) se define como el tiempo necesario para reducir la cantidad inicial en un factor $\frac{1}{e}$ está dada por:

$$\tau = \frac{1}{(\lambda_A + \lambda_B)} \quad (148)$$

La proporción de decaimiento por *branching* A respecto del B se conoce como "razón de branching" y está dada por: $\frac{\lambda_A}{\lambda_B}$ y una relación similar se establece para la vida media:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_A} + \frac{1}{\tau_B} \quad (149)$$

6.3. Unidades de Radioactividad y aspectos dosimétricos

La cantidad de átomos que se desintegran por segundo en una dada substancia radioactiva se conoce como "actividad" de la muestra. Generalmente, la actividad se mide en "Curie" (Ci) que equivale a $3,7 \times 10^{10}$ desintegraciones por segundo.

Otra manera de definir la unidad de radioactividad es a través de los efectos de la radiación. En este sentido, se introduce el concepto de 'éivalente a 1 gramo de radio' entendido como que, bajo ciertas condiciones de filtrado de rayos gamma (5mm de Pb), la ionización producida por la muestra en el instrumento de medición sea la misma correspondiente a 1g de radio.

Sin embargo, los efectos biológicos de la radiación no dependen solo de cantidades físicas como la dosis y tipo de radiación, sino también de las características propias de las células irradiadas, ya sea que forman un órgano o tejidos. Mientras la determinación de la energía entregada por la radiación incidente es un problema relativamente simple en física, la valoración de los efectos biológicos es seguramente una situación mucho más compleja. Se han propuesto diferentes modelos a tal fin, siendo la "Efectividad Biológica Relativa" (*Relative Biological Effectiveness*, RBE) el modelo más establecido [*National Committee on Radiation Protection*]. Se propone, la evaluación conveniente de la composición entre cantidades físicas y RBE:

$$1Rem \equiv 1Rep \times 1RBE \quad (150)$$

donde $1Rem \equiv 93 \frac{erg}{g}$ y el parámetro RBE puede tomarse de datos experimentales y/o modelos biológicos.

6.4. Teoría general de Radioactividad

Dado que la cantidad de átomos de una substancia que decae es un número discreto, los modelos continuos desarrollados en las secciones anteriores resultan ser una buena aproximación, particularmente válida en el límite de un gran número de átomos.

Considerando una substancia de vida media extremadamente larga que emite $\langle n \rangle$ partículas por segundo: la probabilidad de emitir n partículas en un dado intervalo de 1 segundo ($P(n)$) está dada por la fórmula de Poisson⁷:

$$P(n) = \frac{\langle n \rangle^n}{n!} e^{-\langle n \rangle} \quad (151)$$

La condición de normalización puede calcularse de la ecuación 151 como sigue:

$$\sum_0^{\infty} P(n) = e^{-\langle n \rangle} \sum_0^{\infty} \frac{\langle n \rangle^n}{n!} = 1 \quad (152)$$

ya que resulta inmediato identificar el término de la sumatoria en ecuación 152 como el desarrollo en serie de $e^{\langle n \rangle}$.

En la aproximación continua (secciones anteriores) la distribución de probabilidad $P(n)$ resulta normal (Gaussiana), dada por:

$$P(n) = \frac{e^{-(n-\langle n \rangle)^2/2\langle n \rangle}}{\sqrt{(2\pi\langle n \rangle)}} \quad (153)$$

Y, considerando:

$$\int_0^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \quad (154)$$

Se obtiene la normalización:

$$\int_0^{\infty} P(n) dn = 1 \quad (155)$$

De manera análoga se calcula la desviación standard:

$$\sigma = \sqrt{\langle n \rangle} \quad (156)$$

⁷Resultado que puede obtenerse dividiendo al intervalo de tiempo de 1 segundo en K subintervalos y tomando el límite $K \rightarrow \infty$.

6.5. Decaimiento nuclear alfa

El fenómeno de emisión de diferentes tipos de partículas pesadas fué observado por medio de experimentos de bombardeo nuclear. Esta sección trata sobre los procesos espontáneos de dexcitación de estados metaestables formados en el bombardeo. En particular, esta sección se concentra en el estudio de los procesos de emisión de partículas alfa. La comprensión de los mecanismos de emisión alfa, sumado a la enorme cantidad de evidencia experimental en este campo, se ha constituido en un gran desarrollo de este área y ha contribuido significativamente al desarrollo de la física nuclear en su conjunto.

La primera consideración puede ser: por qué se observa emisión alfa por parte de los núcleos? y por qué no se observa emisión de protones o deuterios?

El motivo de esta situación es la energía involucrada para cada una de estas reacciones, ya que el balance energético favorece la emisión de partículas alfa en condiciones para las que la emisión de protones resulta muy poco probable.

De los resultados semi-empíricos se deduce que la emisión alfa es solamente posible para núcleos pesados, como se indica esquemáticamente en la figura 20.

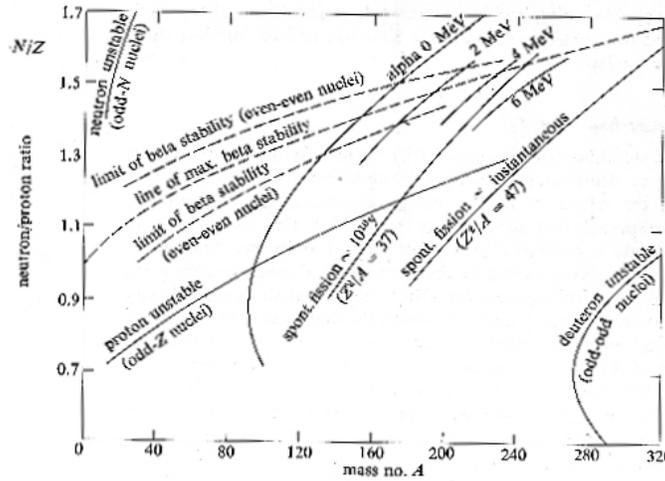


Figura 20. Límites de estabilidad nuclear según *Modelo a Gota* del núcleo.

Utilizando como primera aproximación un tratamiento semi-clásico, la emisión alfa puede describirse por medio de un potencial electrostático dependiente de la distancia al centro del núcleo dado por:

$$V(r) = \frac{Zqe}{r} ; r > R \quad (157)$$

Mientras que para $r < R$ las fuerzas nucleares resultan dominantes, de modo que el potencial puede representarse como indicado en la figura 21.

Los inconvenientes en la comprensión de los procesos de emisión alfa fueron disipados empleando modelos cuánticos. Los lineamientos generales del razonamiento propuesto se resumen a continuación:

Se asume que el potencial representa una barrera de ancho a y altura V como muestra la figura 22.

Resolviendo, en primera instancia, el caso unidimensional, las funciones de onda ($|\Psi\rangle$) se obtienen de la ecuación de Schrödinger:

$$\frac{\partial^2 |\Psi\rangle}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar} (E - V) |\Psi\rangle = 0 \quad (158)$$

Las soluciones pueden obtenerse para cada una de las regiones indicadas en la figura 22.

Región I:

$$|\Psi\rangle_I = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad -\infty < x < 0 \quad (159)$$

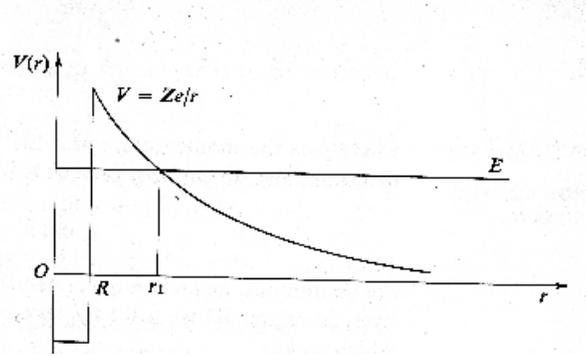


Figura 21. Potencial semi-clásico para partículas alfa como función de la distancia al centro del núcleo.

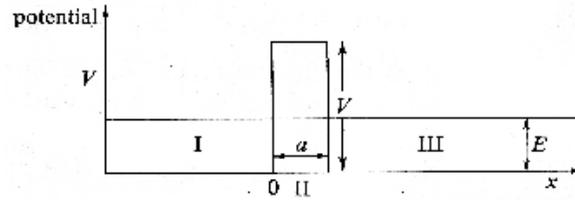


Figura 22. Barrera de potencial de ancho a y correspondiente energía potencial V .

Región II:

$$|\Psi\rangle_{II} = A_{II}e^{+Kx} + B_{II}e^{-Kx} \quad 0 < x < a \quad (160)$$

Región III:

$$|\Psi\rangle_{III} = A_{III}e^{ikx} + B_{III}e^{-ikx} \quad a < x < \infty \quad (161)$$

donde:

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar} = \frac{1}{\lambda_{deB}} \quad (162)$$

$$K \equiv \frac{\sqrt{2m|E-V|}}{\hbar} \quad (163)$$

Los coeficientes A_j y B_j se determinan de las condiciones de continuidad para $|\Psi\rangle$ y $\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial x}$.

Además, la condición de que sólo onda transmitida exista en la Región III impone $B_{III} = 0$. Estableciendo la continuidad en los puntos $x = 0$ y $x = a$ se obtiene la relación recursiva entre los 5 restantes coeficientes.

De este modo es posible establecer una relación entre A_I (amplitud incidente), B_I (amplitud de reflexión) y A_{III} (amplitud de transmisión).

Una simplificación posterior resulta particularmente útil para muchos casos prácticos: se considera el límite $Ka \gg 1$, entonces se obtiene una relación muy utilizada para la transmisión en términos de la incidencia:

$$\frac{|A_{III}|^2}{|A_I|^2} = \frac{16k^2K^2e^{-2Ka}}{(k^2 + K^2)^2} \approx e^{-2Ka} = T \quad (164)$$

De manera análoga puede calcularse la reflectividad de la barrera, dada por:

$$R \equiv \frac{|B_I|^2}{|A_I|^2} \quad (165)$$

y debería verificarse la relación:

$$R + T = 1 \quad (166)$$

Para potenciales variables, la transmitividad (T) se generaliza como:

$$T = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_R^{r_1} (2m\sqrt{|E-V|}) dx} = e^{-2G} \quad (167)$$

donde la integración se realiza en la región (clásicamente prohibida) donde $E - V < 0$. Generalizando y pasando al caso tridimensional (sin momento angular) puede calcularse G :

$$G = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_R^{r_1} \frac{\sqrt{Zzq_e^2 r - E}}{d} r = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} Zzq_e^2 \left[\arccos \left(\sqrt{\frac{R}{r_1}} \right) - \sqrt{\frac{R}{r_1} - \frac{R^2}{r_1^2}} \right] \quad (168)$$

Habiendo calculado la transmitividad o "transparencia" de la barrera de potencial, puede determinarse la constante de decaimiento (λ):

$$\lambda = \frac{v_0}{R} e^{-2G} \quad (169)$$

donde v_0 (velocidad de la partícula alfa fuera del núcleo) y R (estimación del radio nuclear) pueden establecerse experimentalmente siendo numéricamente aproximados a $10^7 m s^{-1}$ y $10^{-14} m$; respectivamente.

Una descripción más completa se obtiene al considerar los efectos del potencial centrífugo ($\frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr^2}$) proveniente del momento angular.

6.5.1.. Estructura del espectro de emisión alfa

El decaimiento nuclear alfa involucra, generalmente, un núcleo en estado fundamental. Sin embargo, varios emisores alfa muestran espectros (líneas) de emisión debidas a los diferentes estados finales de la transición. Este hecho es confirmado por la observación de rayos gamma de energías correspondientes a la diferencia entre las líneas alfa, como se muestra en la figura 23 para el caso del plutonio.

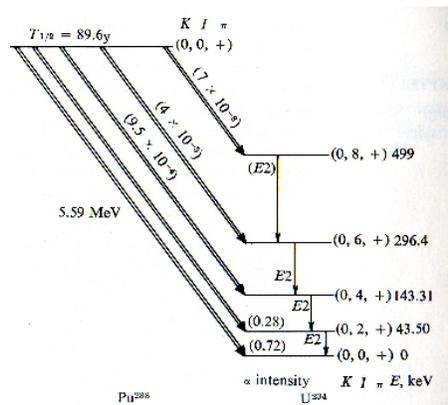


Figura 23. Esquema de decaimiento del Pu^{238} mostrando las transiciones alfa desde un estado inicial hacia diferentes estados finales.

Nótese que los niveles más bajos del U^{234} tienen momentos angulares $l = 0, 2, 4$ y separaciones energéticas según predicciones de los niveles rotacionales.

Las diferentes líneas alfa tienen intensidades determinadas, en primer lugar, por su energía, ya que ésta afecta la “transparencia” de la barrera y, en menor grado, también dependen del momento angular. Además, otros factores, más complejos, pueden alterar en casos específicos la constante de decaimiento determinada de acuerdo al modelo de simple penetración (150). Por ejemplo, en el caso de $Po^{212}(ThC^*)$ y $Po^{214}(RaC^*)$ se observa una cierta estructura en el nivel más alto. El decaimiento alfa es tan rápido que compite con transiciones gamma entre los niveles superiores. Se observan “partículas alfa de excepcional grande rango” (24).

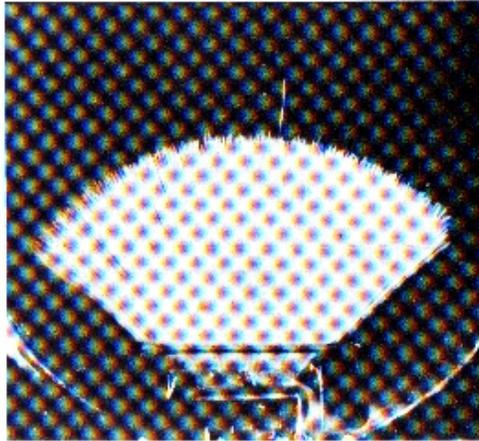


Figura 24. Estados excitados de emisores alfa: largo rango de RaC^* y rayos alfa de RaC .

Estos fenómenos son bien “raros”, pero interesantes y útiles a la vez, porque proveen un método para determinar tasa de decaimiento gamma si se conoce la correspondiente a emisión alfa. Para el estado superior, se tiene:

$$\frac{\lambda_\gamma}{\lambda_\alpha} = \frac{N_\gamma}{N_{I_r}} \quad (170)$$

donde $\frac{N_\gamma}{N_{I_r}}$ equivale a $\frac{N_\alpha}{N_r}$ que es el cociente entre la cantidad de emisión alfa normal y emisión alfa “long range”, ya que cada rayo gamma es inmediatamente seguido por una emisión alfa “normal”. Este método no es rigurosamente cuantitativo, pero representa un importante interés histórico.

La enorme cantidad de evidencia experimental acumulada en algunas décadas del siglo pasado ha permitido elaborar metodologías para explicar la emisión alfa. El estado fundamental de núcleos “par-par” muestran las constantes de decaimiento alfa de mayor valor, de acuerdo al modelo de penetración de barrera, imponiendo conservación del momento angular. El factor de “hindrance” se introduce como la corrección entre la vida media observada y la calculada, basado en consideraciones sobre la configuración “par-par”.

6.5.2.. Ligadura virtual

Retomando el modelo de partícula en pozo de potencial, puede desarrollarse un tratamiento suplementario para explicar algunos aspectos cualitativos conocidos como “virtual binding”.

Considerando el problema 1-D con potencial dado por una caja de largo l dividida en $x = a$ por una barrera dada por una función delta, resulta:

En $x = 0$ y $x = l$ se tiene barrera de potencial de paredes infinitamente altas, mientras en $x = a$ se tiene una barrera extremadamente delgada pero alta, tal que:

$$\frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} \delta(x-a) dx = \frac{1}{g} \quad (171)$$

La ecuación de Schrödinger resulta:

$$u'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) u = 0 \quad (172)$$

que, integrada sobre un intervalo infinitesimal entorno de $x = a$, resulta:

$$u'_{II} - u'_I + \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} [E - \delta(x-a)] dx = 0 \quad (173)$$

$$u'_{II} - u'_I = \frac{u(a)}{g} \quad (174)$$

obteniéndose una discontinuidad en la derivada en el punto $x = a$, mientras que las condiciones de contorno son:

$$u_I(0) = u_{II}(l) = 0 \quad (175)$$

y

$$u_I(a) = u_{II}(a) \quad (176)$$

Una solución general es:

$$u(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (177)$$

donde:

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (178)$$

Y pueden satisfacerse las condiciones de contorno cumpliendo:

$$u_I(x) = A \sin(kx) ; x \leq a \quad (179)$$

$$u_{II}(x) = B \sin[k(l-x)] ; x \geq a \quad (180)$$

Con: $B = A \frac{\sin(ka)}{\sin[k(l-a)]}$.

Los autovalores (eigenvalues) k se obtienen de resolver la condición de discontinuidad de la ecuación 174, de donde resulta:

$$\cot g(ka) + \cot g[k(l-a)] = \frac{-1}{kg} \quad (181)$$

$$k \sin(kl) = \frac{-1}{g} \sin(ka) \sin[k(l-a)] \quad (182)$$

Una situación de interés es el caso $kg \ll 1$ ("barrera poco transparente"). Para analizar esta situación, conviene contrastar, precedentemente, el caso para el cual vale exactamente $kg = 0$, que corresponde a dos compartimientos (regiones I y II) totalmente separados.

Las condiciones de contorno para este caso en 0, a y l imponen:

$$\sin(k_n a) = 0 ; k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (183)$$

$$\sin[k_m(l-a)] = 0 ; k_m = \frac{m\pi}{l-a} \quad (184)$$

mientras las funciones de onda normalizadas resultan:

$$u_I(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \wedge u_{II} = 0 \quad (185)$$

$$u_I = 0 \wedge u_{II}(x) = \sqrt{\frac{2}{l-a}} \sin\left[\frac{m\pi(l-x)}{(l-a)}\right] \quad (186)$$

Ahora, retomando el caso $kg \rightarrow 0$ (pero $kg \neq 0$), se trabaja en el régimen $l \gg a$, implicando que los niveles en expresión 183 se hallan muy separados, mientras los niveles en expresión 184 forman prácticamente un continuo.

Este modelo muestra aspectos y similitudes notables con la situación de una partícula alfa en un núcleo atómico, contenida en la región I y confinada por la “barrera de poca transparencia”. El núcleo mismo estaría contenido en una “larga caja” de largo l ($l \gg a$). La aplicación del presente modelo a partículas alfa en núcleos puede realizarse introduciendo las variaciones (desviaciones) siguientes:

$$kn_n^* = k_n + \varepsilon_n = \frac{n\pi}{a} + \varepsilon_n \quad (187)$$

donde los ε_n se obtienen por medio de resolver (a segundo orden en ε_n) la ecuación 181. Se obtiene:

$$\varepsilon_n = \frac{-n\pi g}{a^2} = \frac{-k_n g}{a} \quad (188)$$

Y correspondiente autofunción en zona I (izquierda):

$$u_I(x) = A \sin(k_n^* x) = A [\sin(k_n x) + \varepsilon_n x \cos(k_n x)] \quad (189)$$

la cual se “pega” de manera suave a la autofunción en la región II (derecha) dada por:

$$u_{II}(x) = A(-1)^n \frac{\varepsilon_n a}{\sin[k_n(l-a)]} \sin[k_n(l-x)] = -A(-1)^n k_n g \frac{\sin[k_n(l-x)]}{\sin[k_n(l-a)]} \quad (190)$$

Las autofunciones obtenidas representan un estado estacionario en el cual hay corrientes (flujo) de izquierda a derecha y viceversa en ambas regiones (I y II). La autofunción es *grande* en la región I (izquierda) y menor en la región II (derecha), ya que la amplitud en la I es aproximadamente A , mientras en la II es:

$$\frac{A k_n g}{\sin[k_n(l-a)]} \quad (191)$$

Los autovalores (k) para los cuales ocurren las grandes diferencias de amplitudes entre las regiones distan entre ellos en π/a (ecuación 187). Para valores de energía en vecindades de:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \quad (192)$$

el cociente de probabilidades (por unidad de distancia) de encontrar la partícula en I respecto de II es del orden de $1/k^2 g^2$, mientras para valores de energía fuera de estos rangos, el cociente varía según $k^2 g^2$.

Los estados correspondientes a las energías de “excepcionalismo” ($E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$) se conocen como “Estados virtuales”, y pueden resultar de particular utilidad para describir fenómenos de emisión alfa por parte del núcleo.

6.6.. Decaimiento nuclear beta

Se conocen 3 diferentes mecanismos de decaimiento beta: emisión de electrones, emisión de positrones y captura nuclear de electrones orbitales. Esta sección se concentra en la presentación y el estudio de los diferentes tipos de decaimiento beta, de los cuales la emisión de electrones es el más probable; y fue de hecho el acontecimiento que dió lugar al descubrimiento de la radioactividad nuclear por parte de Becquerel.

Los rayos β resultan fácilmente distinguibles de los α debido a su significativamente mayor rango en la materia y deflexión en sentido opuesto⁸ por acción de campos magnéticos.

Mediciones de carga específica (q/m) de rayos β , originalmente realizadas por Bucherer hacia 1909, se muestran de acuerdo con la hipótesis de tratar a los rayos β como electrones/positrones con considerable energía cinética. Experimentos posteriores (Zahn & Spees) utilizando el isótopo Cu^{64} , que es uno entre los pocos que decaen por medio de los 3 mecanismos (39% β^- , 19% β^+ y 42% captura electrónica, con $\tau = 12,8h$), permitieron establecer la carga específica de los rayos β utilizando deflexión en campos magnéticos (Sección 1.2.1), demostrando que el valor numérico de la carga de rayos β coincide con la carga eléctrica del electrón. Mientras, que los positrones emitidos por decaimiento β son aniquilados con electrones atómicos en el material, de acuerdo al modelo de Dirac de partícula-antipartícula.

El decaimiento β es un proceso nuclear, aunque los electrones no se los considere usualmente “constituyentes semi-permanentes” del núcleo (nucleones). En aquellos casos en que el producto del decaimiento β sea también radioactivo, resulta significativamente más sencilla la separación química entre isótopo original y producto, verificándose que el isótopo producto resulta ser el adyacente al original en la tabla periódica.

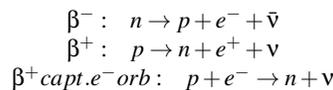
Luego del desarrollo de los espectrómetros de masas, fue posible separar, en algunos casos, el isótopo original del producto inactivo y determinar su carga y masa. El valor de la carga Z aumenta en una unidad para emisión β^- y decrece en una unidad tanto para emisión β^+ como captura de electrón orbital.

El descubrimiento más importante en la emisión β está relacionado con la energía cinética de las partículas emitidas, que de hecho forman un espectro continuo desde 0 hasta un máximo T_0 , el cual corresponde muy aproximadamente al valor calculado por medio de la conversión a energía de la masa en reposo del isótopo original y del producto, considerando los posibles estados excitados de formación del producto. En este caso, el producto (“hija”) decae subsecuentemente por medio de emisión γ o bien por reconversión interna.

La primera prueba definitiva de la existencia de un continuo de momenta (energía) en la emisión β fue provista por Chadwick hacia 1914, y resultó un contribución de gran importancia, ya que por mucho tiempo se intentó explicar el espectro de emisión β por medio de efectos de pérdida de energía por dentro del material de la fuente, y forzando el modelo de una única partícula interviniente en la emisión.⁹ La emisión de 2 electrones implicaría un cambio en Z de +2, y esto no es lo observado. Argumentos oportunos pueden convencer (C. Smith, 1969), en términos semi-clásicos, que sólo una partícula debe intervenir en los procesos de emisión β . Dificultades análogas se presentan para la conservación del momentum y del momento angular.

Una propuesta alternativa, realizada por Pauli hacia 1933, logra explicar las dificultades encontradas de manera muy sencilla. Asumiendo que energía y momentos deben conservarse rigurosamente en cualquier proceso nuclear, debe pues existir una segunda partícula involucrada en la emisión β . Sin embargo, los experimentos originales para detectar esta supuesta partícula fallaron rotundamente, por lo cual pareció razonable considerarla neutra y se la denominó “neutrino” (*piccolo neutro*). Cálculos de la masa en reposo del neutrino indican que es mucho menor que la del electrón.

El primer sustento del modelo de Pauli del neutrino fue provisto por la excelente predicción del espectro de emisión β que resulta de aplicar la teoría estadística de Fermi (Bethe & Peierls, 1934) que permite determinar un camino libre medio de $10^{20}m$ y consecuente sección eficaz de $10^{-44} cm^2$. Otro aspecto conflictivo fue decidir si el *piccolo neutro* emitido en el decaimiento β^+ sería el mismo o no del decaimiento β^- . Los modelos y evidencia experimental actuales sostienen la existencia de 2 tipos diferentes, uno “neutrino” (ν) interviniente en la emisión β^- y otro “antineutrino” ($\bar{\nu}$) interviniente en la emisión β^+ y en la captura de electrones orbitales. Los 3 mecanismos de emisión β quedan expresados en términos de teoría de partículas como sigue:



⁸Cuando se trata de emisión β^- .

⁹Si sólo una única partícula interviniese en el decaimiento β de un núcleo, resulta una aparente pérdida de energía $T_0 - T$ donde T es la energía cinética del electrón/positrón emitido.

En las transformaciones nucleares descritas precedentemente, la energía de desintegración y el momentum son “repartidos” entre electrón/positrón, antineutrino/neutrino y el núcleo producto, este último “recibe” muy poca energía, de hecho por ejemplo para un núcleo $Z = 100$ y un electrón/positrón emitido con 1 MeV, implica un retroceso nuclear del orden de 10 eV.

Una clasificación, particularmente útil deriva de las modernas teorías de partículas, en la cual se introducen los conceptos de “leptones” y “anti-leptones”. Los “leptones” son aquellas partículas livianas que presentan interacciones típicamente débiles. Se postula el principio de conservación de leptones como sigue: el número de leptones menos el número de anti-leptones antes y después de un proceso de transformación debe permanecer constante. Las partículas-antipartículas incluidas en la categoría de leptones son: electrón/positrón, neutrino/antineutrino, muón/antimuón. Este esquema permite resolver de manera sencilla innumerables situaciones prácticas como los casos usuales:

$$\begin{aligned} e^+ + e^- &\rightarrow 2\gamma \\ n &\rightarrow p + e^- + \bar{\nu} \\ \mu^+ &= e^+ + \bar{\nu} + \nu \\ \pi^+ &\rightarrow \mu^+ + \nu \end{aligned}$$

6.6.1. Medición de energías de rayos β

Como se mencionó anteriormente, la energía cinética del electrón/positrón emitido forma un continuo entre 0 y el valor máximo T_0 , el cual es característico de cada isótopo, que varía¹⁰ desde el menor (Tritio, 3H) $T_0 = 18keV$ al mayor (^{12}B) con $T_0 = 13MeV$.

La pérdida de energía por ionización y colisiones radiativas por parte de electrones/positrones emitidos en procesos β es una situación compleja, pero puede aproximarse el rango (R) en materiales livianos como sigue:

$$\begin{aligned} R &= 0,542 \cdot E - 0,133 \quad 0,8 < E < 3MeV \\ R &= 0,407 \cdot E^{1,38} \quad 0,15 < E < 0,8MeV \end{aligned}$$

donde E está expresado en MeV y R en g/cm^2 . Mediciones del rango permiten establecer la energía cinética máxima del espectro β con error del orden del 1%. Mientras que la energía cinética media de la emisión β puede establecerse, en algunos casos, por medio de la determinación de la tasa de producción de calor por la absorción total de los rayos provenientes de una fuente de actividad conocida. El valor medio es generalmente alrededor de un tercio del máximo.

El rango puede determinarse, por ejemplo, por medio de emulsión fotográfica o cámaras gaseosas. Sin embargo, la técnica más precisa en la determinación del espectro de emisión β es la espectrometría magnética (Sección 1.2.1). Un electrón/positrón viajando con velocidad v en un plano perpendicular al campo magnético uniforme B (campo transversal) describe una trayectoria circular de radio R dado por la expresión 193, de donde el momentum resulta:

$$p = mv = BRq_e \quad (193)$$

donde m es la masa relativista del electrón/positrón. La cantidad BR es usualmente utilizada para describir el espectro β . La energía cinética (T) resulta:

$$T = mc^2 - m_0c^2 = \sqrt{(BRq_e)^2 + (m_0c^2)^2} - m_0c^2 \quad (194)$$

En este sentido, energía cinética de un electrón de 50 keV corresponde a $BR \approx 3000 \text{ gauss} \cdot \text{cm}$.

Entonces, experimentos de espectroscopía magnética permiten determinar el momentum, en lugar de la energía, y por lo tanto resulta necesario introducir la conversión estadística requerida, dada por:

$$T = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow dT = \frac{p}{m} dp \quad (195)$$

¹⁰Hasta 1970 aproximadamente.

De donde:

$$n(p)dp = n(T)dT \Leftrightarrow n(T) = n(p) \frac{m}{p} \quad (196)$$

Para campo constante, el momentum dp del electrón/positrón ingresando al detector es:

$$dp = Bq_e dR \quad (197)$$

donde dR se corresponde con el “rango de aceptación” del *slit* del detector.

Por lo tanto, se halla que dp es proporcional a B , consecuentemente resulta necesario dividir la cantidad de cuentas (electrones/positrones) por la intensidad de campo magnético para obtener una cantidad proporcional a $n(p)$.

6.6.2.. Teoría de la emisión β

El decaimiento β es absolutamente prohibido, a menos que se presenten específicas condiciones de desigualdad de masas entre los isóbaros involucrados. Considerando la emisión β^- , se tiene $(Z, A) \rightarrow (Z + 1, A)$ y por lo tanto debe satisfacerse que la masa del nucleido “madre” (${}_Z M^A$) debe ser mayor que la masa de la “hija” (${}_{Z+1} M^A$). La diferencia de masas se traduce en energía distribuida entre el electrón emitido, el neutrino y el retroceso del núcleo (despreciable). Mientras en el decaimiento β^+ debe satisfacerse la siguiente desigualdad:

$${}_Z M^A > {}_{Z-1} M^A + 2m_e \quad (198)$$

El término $2m_e$ se debe a que existe un segundo electrón atómico involucrado luego del decaimiento del positrón, cuyas masas suman $2m_e$. Finalmente, para la captura nuclear de electrones orbitales, la condición se expresa por medio de la desigualdad¹¹:

$${}_Z M^A > {}_{Z-1} M^A \quad (199)$$

6.6.3.. Teoría de Fermi de la Emisión β

La teoría de Fermi postulada hacia 1934 está basada en 2 suposiciones básicas:

1. El principio de conservación de la energía en los procesos de decaimiento. La energía disponible es “repartida” entre los electrones/positrones emitidos y los antineutrinos/neutrinos hipotéticos. La energía en reposo del neutrino/antineutrino es 0 o despreciable comparada con la del electrón.
2. La transición β es análoga a la emisión de radiación electromagnética por un átomo. La interacción entre partículas livianas (leptones) con partículas pesadas (bariones), nucleones en particular, es diferente de la interacción entre la carga eléctrica q_e y el campo electromagnético del fotón. En modelos empíricos se introduce una constante g en los procesos de emisión β como analogía a la carga, pero muestran serias dificultades debido a la naturaleza de las fuerzas nucleares que imponen intercambios fuertes. Las teorías de partículas postulan, contrariamente, que la interacción entre nucleones y leptones es de tipo “local”; y no se aplica la idea de bosones como agentes de intercambio-transmisión para las interacciones, lo cual contrasta con el modelo de *virtual photons pions* como agentes de intercambio electromagnético.

Dirac derivó una expresión para la probabilidad de transición por unidad de tiempo (W) de que un sistema atómico emita un fotón. El modelo se basa en consideraciones de teoría de perturbaciones dependiente del tiempo. Para el caso de emisión β , en lugar de W se tiene $I(p)dp$ (probabilidad por unidad de tiempo de que el núcleo emita un electrón/positrón de momentum entre p_e y $p_e + dp$, dado por:

$$I(p_e)dp_e = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E) \left| \int \langle \Psi_f | H | \Psi_i \rangle d\tau \right|^2 \quad (200)$$

¹¹Nótese bien que la captura es posible en regímenes para los cuales el decaimiento β^+ no lo es. De hecho se conocen varios ejemplos de captura nuclear sin competencia con emisión β^+ , mientras en la mayoría de los casos se presenta competencia y consecuente *branching*.

donde $\rho(E)$ es la cantidad de estados posibles correspondientes a la energía final de la transición por unidad de intervalo de energía.

En particular, resulta conveniente tratar a título de ejemplo el decaimiento del neutrón (β^-):

$$\nu + n \rightarrow p + e^- \quad (201)$$

El estado inicial del sistema se representa por $\varphi_\nu u_i$ donde u_i es la función de onda nuclear y φ_ν es la función de onda del neutrino evaluada en la posición del núcleo de transformación, expresiones similares aplican al estado final. Si se considera que la interacción Coulombiana entre el e^- emitido (su función de onda) con el núcleo producto sea despreciable (asumpción válida para Z livianos y alta energía de e^- emitido), resulta que φ_e es una onda plana dada por:

$$|\varphi_e\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{[-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_e \cdot \vec{r}]} \quad (202)$$

Mientras la función de onda del neutrino es:

$$|\varphi_\nu\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{[-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_\nu \cdot \vec{r}]} \quad (203)$$

donde V es el volumen de una caja arbitraria.

De este modo puede calcularse la probabilidad de transición:

$$I(p_e) dp_e = g^2 \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E) \left| \int \langle u_f | \frac{1}{V} e^{[-\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_e + \vec{p}_\nu \cdot \vec{r})]} | u_i \rangle d\tau \right|^2 \quad (204)$$

donde la perturbación considerada es de la forma $H = g \langle \varphi_e | | \varphi_\nu \rangle$; la constante g (en unidades de erg cm^3) es análoga a la carga eléctrica en el decaimiento de fotones.

Proponiendo un desarrollo polinomial del factor exponencial de la expresión anterior, obteniéndose:

$$e^{[-\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_e + \vec{p}_\nu \cdot \vec{r})]} = 1 - \frac{i}{\hbar} (\vec{p}_e + \vec{p}_\nu \cdot \vec{r}) - \frac{1}{\hbar^2} (\vec{p}_e + \vec{p}_\nu \cdot \vec{r})^2 \quad (205)$$

Puede verse que típicamente los momenta del electrón/positrón del neutrino/antineutrino son del orden de 1 a 3 en unidades de mc e incorporando el hecho de que la función de onda es prácticamente despreciable para $r > R$ (R es el radio nuclear $\approx 4 \cdot 10^{-15} m$), y entonces el factor exponencial es prácticamente untario, obteniéndose:

$$I(p_e) dp_e = \frac{g^2}{V^2} \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E) \left| \int \langle u_f | | u_i \rangle d\tau \right|^2 \quad (206)$$

donde los elementos de matriz $M = \int \langle u_f | | u_i \rangle d\tau$ dependen del grado de *overlap* (solapamiento) de las funciones de onda nucleares de los estados final e inicial y el factor de densidad de estados $\rho(E)$ se deriva de la considerar todas las posibilidades de 'distribuir la energía disponible entre el electrón/positrón y el neutrino/antineutrino'¹².

Sin embargo, el pobre conocimiento¹³ respecto de las funciones de onda nucleares implican un conocimiento muy limitado sobre los elementos de matriz M . En este sentido, fuera de las restricciones de Z livianos y en regímenes con alta energía del electrón/positrón (E_e), la aproximación de onda plana pierde validez y resulta necesario considerar las distorsiones impuestas por efectos Coulombianos (ver Figura 25), los cuales pueden tenerse en cuenta incluyendo un factor extra¹⁴:

$$I(p_e) dp_e = \frac{g^2 |M|^2}{2\pi^3 c^3 \hbar^2} (E_0 - E_e)^2 p_e^2 dp_e \otimes \frac{2\pi\eta}{1 - e^{-2\pi\eta}} \quad (207)$$

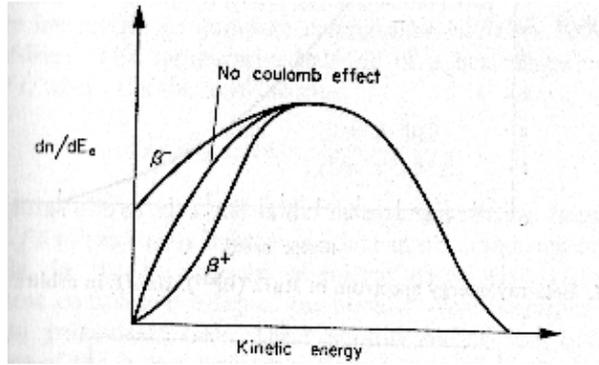


Figura 25. Efectos Coulombianos sobre el espectro teórico de emisión β .

donde¹⁵, $\eta \equiv \pm \frac{Zq_e^2}{\hbar v}$. v es la velocidad del electrón/positrón a distancias suficientemente grandes del núcleo. La Figura 25 muestra el espectro de emisión β obtenido del modelo de Fermi, considerando efectos Coulombianos.

La teoría de Fermi puede generalizarse al considerar el spin. Ya que todos los leptones tienen valor de spin $\frac{1}{2}$, la emisión de éstos en decaimiento β puede ocasionar dos leptones (electrón-antineutrino o positrón-neutrino) en estado singlete ($S, \vec{S} = 0$) antiparalelo o triplete ($T, \vec{S} = 1$). Para las transiciones posibles (reglas de transición) se tiene $\vec{L} = 0$ y resulta el spin el momento angular de relevancia. La teoría de Fermi ampliada es conocida como Modelo de Fermi y Gamow-Teller de transiciones, del cual pueden obtenerse las reglas de transición para los diferentes estados.

6.6.4.. Decaimiento muónico

Las teorías de partículas, como la de Fermi para el decaimiento β postulan además, leyes de conservación para leptones y para nucleones. Sin embargo, la derivación de tales postulados de alguna teoría mayor “unificadora” no se ha conseguido aún¹⁶. A pesar de no haberse observado aún ningún caso de violación a estos principios de conservación postulados, existen por otro lado implicancias de la supuesta validez de estas teorías y complicaciones asociadas a su interpretación.

El caso del decaimiento muónico fue históricamente uno de los más notables ejemplos con complicaciones de interpretación, ya que se preveía la reacción:



Pero, por otro lado las teorías de partículas exigen la participación de neutrinos/antineutrinos en esta reacción. La explicación definitiva llegó al considerar involucrados a un par neutrino-antineutrino como un estado transitorio y previo a la aniquilación, explicando así la emisión γ . Entonces, se verifica:



De este modo se sustenta la hipótesis sobre la existencia de más de un único tipo de neutrino. En este sentido, experimentos han demostrado definitivamente que ésta es la situación (ver Sección siguiente).

¹²Teorías basadas en el espacio de fase proveen descripciones muy interesantes de la densidad de estados, factor $\rho(E)$.

¹³Hasta 1970, aproximadamente, lo cual excluye modernas teorías de partículas.

¹⁴respecto del resultado obtenido en el modelo de espacio de fase.

¹⁵El signo positivo de η corresponde a electrones y el negativo a positrones.

¹⁶Válido, al menos, hacia década del '70 del siglo XX.

6.6.5.. Evidencia sobre Neutrino-Antineutrino

El neutrino/antineutrino es la partícula nuclear más difícil de evidenciar, y por lo tanto la mayoría de evidencia disponible¹⁷ es de carácter indirecta.

Ya se mencionó que la energía del neutrino/antineutrino “aparece” como un déficit en la energía cinética del positrón/electrón en la emisión β . Asociado a esta energía hay un momentum, el cual puede determinarse estableciendo el momentum del e^+/e^- y el momentum del núcleo en retroceso, cuya suma es igual y opuesta al momentum del neutrino/antineutrino. En el caso aproximado de 0 energía en reposo para el neutrino/antineutrino, el momentum correspondiente sería E_ν/c y es calculable a partir de las otras 2 energías intervinientes. Las mayores dificultades en la realización de experimentos de este tipo radica en que el momentum del núcleo en retroceso es muy chico (del orden de 1MeV/c, y por lo tanto la energía de retroceso es, en el mejor de los casos, unos 100eV), volviendo casi imposible conseguir mediciones precisas.

Los experimentos de retroceso fueron realizados con neutrones, He^6 , Be^7 , Ne^{19} , Ne^{23} , A^{35} y Eu^{152} . Algunos métodos propusieron determinaciones por medio de cámaras de niebla a baja presión, como se muestra en la Figura 26.

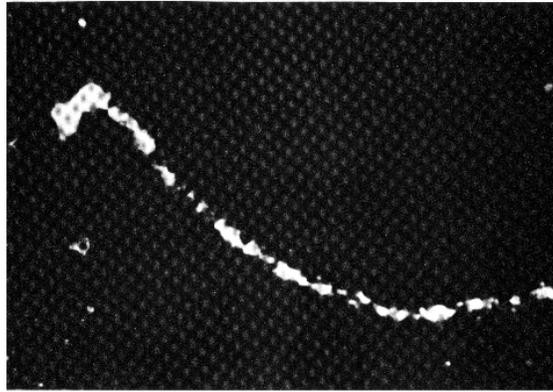


Figura 26. Retroceso de He^6 en decaimiento β .

En el caso de la captura de electrones orbitales, la situación es relativamente más sencilla, ya que el neutrino emitido es monocromático, y por lo tanto todos los núcleos en retroceso tienen el mismo momentum. Sin embargo, aún en el caso más favorable (transición $Be^7 \rightarrow Li^7$) la energía de retroceso es sólo 57.3eV.

Otro experimento que reveló la existencia del neutrino/antineutrino fue realizado por Cowan-Reines hacia 1953, concluyendo con la demostración independiente de la existencia del neutrino/antineutrino. El experimento se basó en el bombardeo, dentro de un reactor nuclear, de protones con antineutrinos para inducir la reacción:



y caracterizarla por medio de los positrones emitidos. Un piletón conteniendo una sustancia hidrogenada con Cd fue bombardeado con antineutrinos y se observó la siguiente secuencia de eventos (esquematisados en la Figura 27): el positrón es emitido casi conjuntamente ($10^{-9}s$ de delay) a la radiación debida a su aniquilación, los cuales son detectados. El neutrón es capturado “mucho después” ($10^{-5}s$) por el Cd en la solución y se emite un γ de captura neutrónica. La secuencia es suficientemente particular para ser característica del evento en cuestión que se pretende determinar, y por ello resulta ser una comprobación del mismo. La sección eficaz del proceso indicado en ecuación 210 puede estimarse por medio del balance entre la vida media del neutrón (17.3min), y resulta ser del orden de $10^{-43}cm^2$ para antineutrinos originados en la fisión.

¹⁷Hacia mediados de los '70.

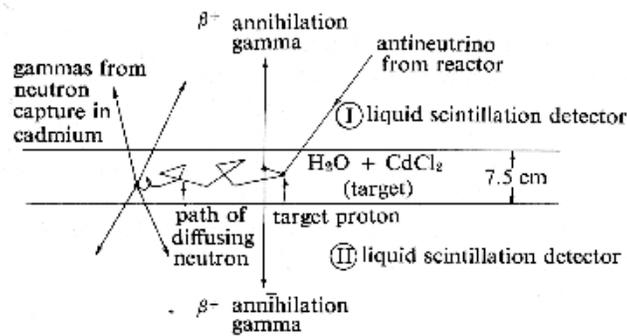


Figura 27. Esquema experimental para la revelación de neutrinos/antineutrinos.

Finalmente, la identidad o no entre neutrino y antineutrino fue explicada por medio de diferentes e independientes mecanismos basados en aspectos relacionados a la helicidad (H), definida por¹⁸:

$$H = \frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{p}| |\vec{\sigma}|} \quad (211)$$

que vale -1 para el hipotético neutrino y +1 para el hipotético antineutrino.

El argumento principal en los experimentos para establecer identidad neutrino/antineutrino se concentró en el hecho que emitir un neutrino/antineutrino equivale a absorber un antineutrino/neutrino. Si fueran idénticos, se tendría la disyuntiva de que emitir o absorber sería lo mismo. Aplicando esta lógica a los isótopos Sn^{124} , Sb^{124} y Te^{124} puede utilizarse la no identidad entre neutrino/antineutrino como condición necesaria para explicar transiciones.

6.6.6.. Conservación de la paridad en emisión β

Se postula la existencia de 4 tipos diferentes de fuerzas:

- Interacciones electromagnéticas (bien conocidas en el dominio macroscópico)
- Fuerzas nucleares fuertes (responsables de la interacción neutrón-protón)
- Interacción débil (responsable del decaimiento β y otros)
- Interacción gravitacional (de intensidad relativa despreciable)

El estudio de mesones τ y θ hacia mediados de los '50 contribuyó con nueva información para la postulación (ad-hoc) de algunos modelos y principios en teoría de partículas. Los entonces "nuevos mesones" decaían en sistemas piónicos de paridad opuesta. Por lo tanto, si la paridad habría de conservarse, los mesones deberían en realidad ser diferentes. Lee y Yang se dedicaron al estudio de la paridad en interacciones entre leptones (caracterizadas por la participación de 4 fermiones) concluyendo que éstas parecen tener en común la no-conservación de la paridad, lo cual constituye una de las diferencias más notorias entre las interacciones débiles por un lado y las fuertes y electromagnéticas por el otro.

La conservación de la paridad puede describirse por medio de diferentes mecanismos con altos niveles de sofisticación, por ello se deriva hacia lecturas específicas¹⁹ para profundizar.

¹⁸en términos del momentum \vec{p} y del spin $\vec{\sigma}$

¹⁹E. Segré. *Nuclei and Particles*, 1965.

6.7.. Decaimiento nuclear Gamma

Los rayos Gamma fueron descubiertos tempranamente, como una de las radiaciones emitidas por el núcleo atómico, y su naturaleza electromagnética fué establecida hacia 1912 por von Laue. El estudio de la emisión Gamma resultó de gran interés porque permite obtener información importante sobre energía y estados cuánticos del núcleo emisor.

El proceso de emisión radiativa puede describirse, en primera aproximación, por medio de modelos semiclásicos, basados en la representación del núcleo como una distribución de cargas confinada a una región donde se encuentra con movimiento periódico de frecuencia ω , relacionada con la energía a través de: $\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$, donde $\Delta E \equiv E_2 - E_1$ es el gap de energía entre los 2 estados (final e inicial) de la transición.

El tratamiento depende de si la longitud de onda de la radiación electromagnética es grande o chica, en comparación con las dimensiones del núcleo atómico. Para longitudes de onda largas (que equivalen a energías de emisión de hasta unos cuantos MeV), puede utilizarse la descripción de “aproximación de longitudes de onda largas”.

Entonces, se considera un sistema de cargas en movimiento periódico localizado en el origen de coordenadas, y se realiza la distinción entre zonas donde vale: $r \ll \lambda/(2\pi) = \frac{c}{\omega}$. Para esta zona la intensidad de campos eléctricos y magnéticos puede calcularse a partir de la velocidad y posición instantánea de las cargas. Por otro lado, para la región donde vale $r \ll \lambda/(2\pi) = \frac{c}{\omega}$ deben considerarse los efectos de “retardo”. En este caso r es la distancia desde el sistema irradiador, $\lambda = 2\pi \frac{c}{\omega}$ es la longitud de onda de la radiación emitida para la frecuencia angular de movimiento ω .

En la primera zona llamada “región de radiación”, los campos electromagnéticos pueden calcularse de:

$$|\vec{E}| = |\vec{H}| \quad (212)$$

$$\vec{H} \cdot \vec{E} = 0 \quad (213)$$

$$\vec{E} \cdot \vec{r} = \vec{H} \cdot \vec{r} = 0 \quad (214)$$

y, puede verse, que las intensidades de campo decrecen como $1/r$, mientras que el vector de Poynting $\vec{S} = \frac{c\vec{E} \times \vec{H}}{4\pi}$ varía como $1/r^2$.

Puede calcularse la intensidad del dipolo eléctrico en la zona de radiación, que resulta:

$$\vec{E}_\theta = \frac{\sin\theta}{rc^2} \ddot{p} \left(t - \frac{r}{c} \right) \quad (215)$$

donde p es valor del momento dipolar eléctrico retardado a lo largo del eje z , cuya variación temporal es: $p = p_0 \cos(\omega t)$, donde θ es el ángulo entre \vec{r} y la dirección del dipolo.

La potencia media radiada por ángulo sólido $d\Omega$ es:

$$\langle W \rangle = \frac{c}{4\pi} \int \vec{r}^2 \cdot (\vec{E} \times \vec{H}) d\Omega = \int \frac{\sin^2\theta}{4\pi c^3} \langle \dot{p}^2 \rangle d\Omega = \frac{\omega^4}{3c^3} p_0^2 \quad (216)$$

Que resulta, un caso particular de la frecuencia de Larmor, válido en el límite $r \ll c$:

$$\langle W \rangle = \frac{2}{3} \frac{q_e^2 \langle \dot{r}^2 \rangle}{c^3} \quad (217)$$

Introducido este repaso, se considera un par de dipolos idénticos orientados a lo largo del eje z con la misma frecuencia ω , pero de fases opuestas, con posiciones relativas separadas por $\Delta x \ll \lambda/2\pi$. El sistema resultante es un cuadruplo, y puede verse que el momento dipolar se anula para todo

tiempo, sin embargo el sistema irradia siempre, debido al momento cuadrupolar ($E \frac{\Delta x}{(\lambda/2\pi)}$ a lo largo del eje x).

Aplicando estos resultados a un sistema nuclear ($\Delta x/(\lambda/2\pi)$ es del orden de las dimensiones nucleares sobre $\lambda/(2\pi)$), se tiene:

$$\lambda/2\pi \approx \frac{197}{E[MeV]} 10^{-13} cm \quad (218)$$

y

$$R = 1,2A^{1/3} 10^{-13} cm \quad (219)$$

Entonces:

$$\frac{R}{\lambda/(2\pi)} = 6,110^{-3} A^{1/3} E[MeV] \quad (220)$$

Para energías en el rango de (0,1 – 1) MeV y valores de $A^{1/3}$ de algunas unidades, la razón $R/(\lambda/2\pi)$ es del orden de 10^{-2} . Y el momento cuadrupolar resulta alrededor de 10^4 veces menor al dipolar, por tanto el momento cuadrupolar tiene importancia sólo si el momento dipolar se anula.

Para un nucleón moviéndose dentro de un núcleo de radio R , se tiene:

$$\omega \approx \frac{v}{R} \quad (221)$$

La constante de decaimiento radiativo Gamma (λ_γ) puede obtenerse de la expresión 216, dividiendo la potencia radiada por la energía del cuanto emitido ($\hbar\omega$):

$$\lambda_\gamma = \frac{4}{3\hbar} \frac{q_e^2}{c^3} \omega^3 \left| \int \langle \Phi_{fin} | x | \Phi_{ini} \rangle dt \right|^2 \quad (222)$$

donde x representa cualquiera de las variables clásicas para la cual se requiere la probabilidad de transición.

Este tratamiento resulta útil para separar los momento multipolares con paridad y momento angular definidos para establecer las reglas de selección, a través de la aplicación de los teoremas de conservación.

Los campos electromagnéticos derivados de las ecuaciones de Maxwell en el vacío son:

$$\vec{E}(x, y, z, t) = \vec{E}(x, y, z) e^{-i\omega t} \quad (223)$$

$$\vec{H}(x, y, z, t) = \vec{H}(x, y, z) e^{-i\omega t} \quad (224)$$

conjuntamente a las relaciones:

$$\nabla^2 \vec{E} + k^2 \vec{E} = 0 \quad (225)$$

$$\nabla^2 \vec{H} + k^2 \vec{H} = 0 \quad (226)$$

con $k = \omega/c$ y las condiciones: $\nabla \cdot \vec{E} = 0$ y $\nabla \times \vec{H} = 0$.

Entonces, se propone la solución en variables independientes y se obtiene:

$$|\Phi\rangle_l^m = j_l(kr) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (227)$$

donde j_l son las funciones de Bessel esféricas definidas a través de las funciones de Bessel ordinarias (J_l) por:

$$j_l(kr) \equiv \left(\frac{\pi}{2kr} \right)^{1/2} J_{l+1/2}(kr) \quad (228)$$

Utilizando los operadores cuánticos $\vec{L} \leftrightarrow -i(\vec{r} \times \vec{\nabla})$ y $-i/k(\vec{\nabla} \times \vec{L})$, pueden obtenerse la reglas de selección para las transiciones permitidas.

6.7.1.. Reglas de Selección y Probabilidad de transición Gamma

Debido a la aproximación de fuerzas centrales, el principal requisito deriva de la simetría $\varphi(\vec{r}) = \pm\varphi(-\vec{r})$, de donde:

$$\varphi(\vec{r}) \rightarrow k\varphi(-\vec{r}) \rightarrow k^2\varphi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) \quad (229)$$

Entonces, $k^2 = 1$.

Suponiendo que los estados inicial y final de la transición nuclear son de momentos angulares l' y l'' , con l entero y las componentes z del momento sean m' y m'' . Resulta que:

$$m' = m' \quad m' = m'' \pm 1 \quad \text{CORREGIR} \quad (230)$$

y

$$l' = l'' \pm 1 \quad (231)$$

Las probabilidades de transición correspondientes a las reglas de selección resultan en las siguientes expresiones para las longitudes de onda de la emisión Gamma eléctrica ($\lambda_{l,m}^E$) o magnética ($\lambda_{l,m}^M$):

$$\lambda_{l,m}^E = \frac{8\pi(l+1)}{\hbar l[(2l+1)!!]^2} \left(\frac{\omega}{c}\right)^{2l+1} |L_{l,m} + L'_{l,m}|^2 \quad (232)$$

$$\lambda_{l,m}^M = \frac{8\pi(l+1)}{\hbar l[(2l+1)!!]^2} \left(\frac{\omega}{c}\right)^{2l+1} |M_{l,m} + M'_{l,m}|^2 \quad (233)$$

donde l es el orden de la transición, $n!!$ indica $1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot n$, y los términos $L_{l,m}$ y $M_{l,m}$ se obtienen de:

$$L_{l,m} = q_e \sum_1^Z \int r_k^l Y_l^{m*}(\theta_k, \phi_k) \Psi_{fin}^* \Psi_{ini} dt \quad (234)$$

$$M_{l,m} = -\frac{1}{l+1} \frac{q_e \hbar}{Mc} \sum_1^Z \int r_k^l Y_l^{m*}(\theta_k, \phi_k) \vec{\nabla} \cdot (\Psi_{fin}^* \vec{L}_k \Psi_{ini}) dt \quad (235)$$

$$L'_{l,m} = -i \frac{\omega/c}{l+1} \frac{q_e \hbar}{2Mc} \sum_1^A \int \mu_k r_k^l Y_l^{m*}(\theta_k, \phi_k) \vec{\nabla} \cdot (\Psi_{fin}^* \vec{r}_k \times \vec{\sigma}_k \Psi_{ini}) dt \quad (236)$$

$$M'_{l,m} = -\frac{q_e \hbar}{2Mc} \sum_1^A \int \mu_k r_k^l Y_l^{m*}(\theta_k, \phi_k) \vec{\nabla} \cdot (\Psi_{fin}^* \vec{\sigma}_k \Psi_{ini}) dt \quad (237)$$

donde k indica el nucleón: de 1 a Z para protones y de $Z+1$ hasta A para neutrones, y $\vec{\sigma}$ son las matrices de Pauli.

Aplicando las aproximaciones conocidas como modelo de "single particle" y con la relación $R = 1,40A^{1/3}F$ se obtienen las siguientes expresiones para las longitudes de onda de transiciones Gamma eléctricas y magnéticas:

$$\lambda^{El} = \frac{4(l+1)}{l[(2l+1)!!]^2} \left(\frac{3}{3+l}\right)^2 \left(\frac{E_\gamma [MeV]}{140}\right)^{2l+1} A^{2l/3} \frac{mc^2}{\hbar} \quad (238)$$

y análogamente:

$$\lambda^{Ml} = \frac{0,088(l+1)}{l[(2l+1)!!]^2} \left(\frac{3}{2+l}\right)^2 \left(\frac{E_\gamma[\text{MeV}]}{140}\right)^{2l+1} A^{2(l-1)/3} \frac{mc^2}{\hbar} \left(\frac{\mu_p l}{2} - \frac{l}{l+1}\right)^2 \quad (239)$$

donde μ_p es el momento magnético del protón en unidades de magnetón nuclear, i.e. $\mu_p = 2,79$, Ml y El son los índices l para las componentes magnética y eléctrica, respectivamente.

Experimentalmente, se encuentra que la vida media para la emisión Gamma es del orden de 10^{-10} segundos.

6.8.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo VI

6.8.1.. Radioactividad y decaimiento nuclear

Ejercicio 6.1: Una muestra de ^{99}Tc presentó actividad de $750kBq/ml$ a las 7:00hs de ayer. Determinar el volumen de material radioactivo que debe colocarse en una jeringa para ser utilizado en un paciente que debe recibir $100kBq$ a la hora 12:00 del día de hoy, sabiendo que al transcurrir 1 hora la actividad del ^{99}Tc se reduce al 89.1%.

Ejercicio 6.2: Considérese el caso de decaimiento de una muestra compuesta por dos radionucleidos no relacionados (i.e. no están emparentados). Si los materiales de la muestra son A y B con actividad total A_T y vidas medias T_j , $j = A, B$, obtener una expresión para la Actividad total de la muestra en función del tiempo, las actividades iniciales de los componentes y sus respectivas vidas medias. Realizar un gráfico de la evolución temporal de la Actividad total, junto a las parciales para los casos en que $T_A = 5$ días y $T_B = 0,5$ días.

Ejercicio 6.3: Obtener una expresión para la evolución temporal de la Actividad de una sustancia hija, ausente inicialmente y creada por decaimiento de una sustancia madre, conociendo que las correspondientes constantes de decaimiento son λ_{Madre} y λ_{Hija} y la Actividad neta total inicialmente es N_0 . Realizar un programa (preferentemente en entorno MatLab) para estudiar numéricamente y graficar la evolución temporal de situaciones reales de acuerdo con este modelo, como por ejemplo: $^{131}_{52}Te$, con $\lambda_{^{131}_{52}Te} = 0,0231 h^{-1}$ como madre de $^{131}_{53}I$, que tiene $\lambda_{^{131}_{53}I} = 0,00359 h^{-1}$.

7.. Reacciones nucleares y fuentes de neutrones

Una reacción nuclear puede inducirse, normalmente, por medio de la exposición de blancos constituidos por diferentes materiales a haces colimados de partículas nucleares livianas. Cuando se utilizan haces incidentes de partículas cargadas, resulta necesario que la energía cinética sea suficiente para alcanzar probabilidades razonables de penetrar la barrera coulombiana alrededor del núcleo.

En este sentido, se han desarrollado potentes aceleradores de partículas que permiten generar, en laboratorio, haces de partículas cargadas con energías suficientemente altas, además con la capacidad de determinar energía e intensidad de partículas incidentes, cantidad de partículas emitidas por el blanco delgado por unidad de tiempo, así como su distribución angular, energía e identidad.

7.1.. Introducción y generalidades de reacciones nucleares

La mayoría de los experimentos se realizan por medio de bombardeo de blancos delgados (con pérdida de energía pequeña), sin embargo a veces resulta oportuno el uso de blancos gruesos en modo de producir una pérdida importante de energía incidente por medio de ionizaciones.

Para energías nucleares bajas ($E < 10\text{MeV}$), la mayoría de las reacciones nucleares involucran la formación de dos núcleos, uno muy similar (en carga y masa) al original del blanco bombardeado. Dicha reacción se representa por medio de:



donde a es la partícula nuclear liviana usada como proyectil (protón, neutrón, deuterio, H^3 , He^3 o He^4), A es el núcleo blanco en reposo (en referencial laboratorio), B es el producto de la reacción y b es una partícula nuclear liviana que es emitida con la mayoría de la energía cinética disponible.

Si el núcleo producto B queda en un estado excitado luego de la reacción nuclear y de emitir la partícula nuclear b , éste puede desexcitarse por medio de la consecutiva emisión radiativa de una o mas partículas gamma (fotones). Alternativamente, si B es “beta inestable”, puede emitir electrones o positrones y eventualmente otros gamma.

Las reacciones nucleares típicas a bajas energías de excitación incluyen reacciones de tipo: (n, γ) , (n, p) , (n, α) , (α, n) , (p, γ) , (p, n) , (d, n) , (d, p) , etc. El primer símbolo entre paréntesis indica la partícula nuclear proyectil (a), mientras el segundo símbolo indica el fragmento nuclear liviano producido y emitido (b), como muestra la figura 28 para el caso de scattering elástico.

Un tipo de reacción nuclear que resultó absolutamente inesperada fué la reacción *foto-nuclear*. Los fotones incidentes (gamma o de Bremsstrahlung) interactúan de manera débil con el núcleo, ya que se trata de radiación electromagnética. Los primeros experimentos de procesos o reacciones foto-nucleares resultaron fuertemente limitados por la imposibilidad de fuentes monoenergéticas de fotones incidentes de alta energía.

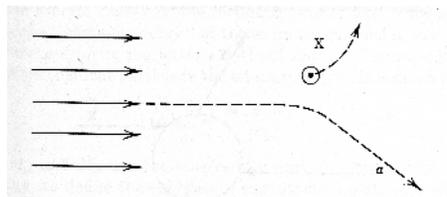


Figura 28. Reacción nuclear debida a proceso de scattering elástico (en sistema laboratorio).

A medida que crece la energía de las partículas incidentes, también crece la probabilidad de y variedad de posibles reacciones nucleares. For ejemplo, para protones o neutrones incidentes de

entre 20 y 30 MeV, inicia a tener importancia la probabilidad de producir 2 fragmentos nucleares livianos ($n, 2n$), (p, pn).

Para energías altas ($E > 200 \text{ MeV}$), las reacciones nucleares pueden involucrar la creación de “piones” (mesones π^{20} y para energías aún mas altas, la creación de “mesones k ” . Mientras las reacciones nucleares a mayor energía conocidas provienen de estudios en emulsiones irradiadas a muy grandes alturas por componentes primarias de rayos cósmicos con energía ultra-alta (10^{19} eV).

Durante las últimas décadas se han estudiado, e incorporado al ámbito de las reacciones nucleares, las reacciones por bombardeo con iones mas pesados como He^4 , C^{14} y otros.

Si bien, como se ha visto, las reacciones nucleares conocidas son de naturaleza muy diferente y características, todas éstas cumplen con premisas comunes, como se detalla a continuación:

- Conservación de carga.
- Conservación del número total de nucleones (para energías mayores a 6 GeV, debe considerarse a los antinucleones como “menos un nucleón”.
- Los momentos angulares orbital y total, se conservan por separado.
- La energía total del sistema se conserva, siempre que un cambio en masa (Δm) sea contado como un cambio en energía ($\Delta E = c^2 \Delta m$).
- Excluyendo decaimientos beta y mesónico (débiles, excepto los gamma), la paridad total del sistema se conserva.

Se define un parámetro útil y característico de una reacción nuclear, que es el Q de la reacción. Se trata de la diferencia energética entre la suma de las energías cinéticas de los productos de reacción (B y b) y la suma correspondiente a las partículas primarias de reacción (A y a), como esquematizado en la figura 29.

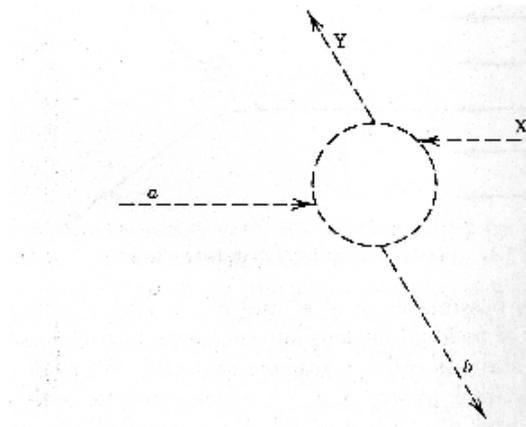


Figura 29. Esquema de reacción nuclear en referencial centro de masas.

Si la diferencia es positiva ($Q > 0$), se dice que la reacción es *exotérmica* (la cual puede ser inducida incluso por neutrones como partícula primaria con 0 energía cinética). Mientras cuando se tiene $Q < 0$ la reacción es llamada *endotérmica*, con un umbral claro de energía a partir del cual resulta posible la reacción.

Diferentes modelos nucleares han sido desarrollados para explicar satisfactoriamente algunos procesos como las reacciones nucleares. Sin embargo, ninguno de ellos resulta suficientemente

²⁰En física de partículas, “piones” se denomina en modo genérico a 3 partículas subatómicas π^0 , π^+ y π^- , son de spin nulo y está formado por un par de quarks.

oportuno para describir la totalidad de los fenómenos nucleares. Las propiedades nucleares y las reacciones nucleares en particular, pueden ser explicadas en términos de los siguiente modelos teóricos o semi-empíricos nucleares:

- Modelo “a gota líquida” del núcleo.
- Modelo nuclear “partícula α ”.
- Modelo nuclear compuesto de Niels Bohr.
- Modelo de partículas independientes (IPM) o modelo nuclear “a shell”.
- Modelo óptico.
- Modelo de reacciones nucleares directas.
- Modelo colectivo.

Las diferencias entre los modelos precedentes radica principalmente en la comprensión de la dinámica nuclear, por lo que no existe contradicción necesaria entre ellos.

7.2.. Canales nucleares de reacción

Las reacciones nucleares, excepto aquellas debidas al scattering elástico, pueden clasificarse de acuerdo al estado cuántico del núcleo residual y de la partícula nuclear emergente. Introduciendo la notación $\alpha', \beta', \gamma', \dots$ para denotar estados nucleares incidentes (iniciales) y $\alpha'', \beta'', \gamma'', \dots$ para denotar estados emergentes, se tiene:



Claramente, la conservación de la energía, momentum, paridad, etc. restringe los posibles pares de estados ($\beta' - \beta'', \gamma' - \gamma'', \text{etc.}$).

Cada uno de estos pares de estados posibles se denomina un “canal de reacción nuclear” y se distinguen entre “canales iniciales” o “de entrada” los que corresponden al estado inicial y “canales finales” o “de salida” a aquellos que denotan el estado final de la reacción.

En la figura 29 se describió esquemáticamente una reacción nuclear típica, cuyo estudio en detalle debe realizarse determinando el movimiento de todas las partículas involucradas. Sin embargo, el objetivo concreto es conocer la probabilidad del estado final $B + b$ (o $Y + b$).

7.3.. Relaciones energéticas

Considerando que la partícula incidente α y el núcleo A se encuentran suficientemente separados, puede pensarse que no hay intercambio de energía entre ellos, y la energía total E puede expresarse como la suma de las energías cinéticas del movimiento relativo (ϵ_{α}) mas las energías internas ($E_{\alpha'}$ y $E_{\alpha''}$):

$$E = \epsilon_{\alpha} + E_{\alpha'} + E_{\alpha''}
 \tag{242}$$

Dado que normalmente el centro de masas se considera en reposo, la energía cinética relativa es prácticamente toda debido a la partícula incidente a , i.e.: $\epsilon_\alpha \approx E_a$ y ϵ_α es llamado “canal de energía”. La energía cinética de la partícula nuclear incidente en el referencial de laboratorio es:

$$(\epsilon_\alpha)_{lab} = \frac{M_a + M_X}{M_X} \epsilon_\alpha \quad (243)$$

Del mismo modo, la energía total final de la reacción es:

$$E = \epsilon_\beta + E_{\beta'} + E_{\beta''} \quad (244)$$

Con las relaciones:

$$\epsilon_\beta = \epsilon_\alpha + Q_{\alpha\beta} \quad (245)$$

$$Q_{\alpha\beta} = E_{\alpha'} + E_{\alpha''} - E_{\beta'} - E_{\beta''} \quad (246)$$

7.4.. Sección eficaz para neutrones

Recordando la definición universal de sección eficaz (σ):

$$\sigma = \frac{\text{Numero de eventos por unidad de tiempo por nucleo}}{\text{Numero de particulas incidentes por unidad de tiempo}}$$

La sección eficaz total para neutrones (σ_t) está dada por:

$$\sigma_t = \sigma_s + \sigma_r \quad (247)$$

donde σ_s tiene en cuenta efectos de scattering elástico y σ_r incluye las componentes inelásticas.

Considerando un haz incidente de neutrones formando una onda plana de amplitud unitaria moviéndose a lo largo del eje z , se tiene que la componente espacial de esta onda es $\exp(ikz)$ ($= \exp(ikr\cos(\theta))$) con $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, la cual para $r \gg 1$ puede expresarse en término de los armónicos esféricos como sigue:

$$e^{ikz} = \frac{\sqrt{\pi}}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{2l+1} i^{l+1} \left\{ e^{-i(kr-l\frac{\pi}{2})} - e^{i(kr-l\frac{\pi}{2})} \right\} Y_{l,0} \quad (248)$$

donde el término en $\exp(-ikz)$ representa la onda esférica incidente y el término en $\exp(+ikz)$ representa la onda emergente. El índice m de los armónicos esféricos se anula debido a la simetría cilíndrica (respecto del eje z) del problema.

La expresión 248 representa una onda imperturbada en ausencia de absorción o centros de scattering. Por lo tanto, al colocar un núcleo en el origen de coordenadas, se produce (véase Capítulos anteriores) un desfase y la onda resultante es:

$$\psi(r) = \frac{\sqrt{\pi}}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{2l+1} i^{l+1} \left\{ e^{-i(kr-l\frac{\pi}{2})} - \eta_l e^{i(kr-l\frac{\pi}{2})} \right\} Y_{l,0} \quad (249)$$

donde el número complejo η_l representa la amplitud y fase de la onda emergente con momento angular l .

La componente de scattering de la función de onda resulta:

$$\psi_s = \psi(r) - \exp(ikz) \quad (250)$$

que integrando en una esfera alrededor el núcleo de scattering resulta:

$$\sigma_r^l = \pi\lambda_B^2(2l+1)|1-\eta_l|^2 \quad (251)$$

Mientras la sección eficaz total para la componente l de la onda es:

$$\sigma_T^l = \sigma_s^l + \sigma_r^l = 2\pi\lambda_B^2(2l+1)[1-\eta_l] \quad (252)$$

Entonces, nótese que: si $|\eta_l| = 1$ resulta $\sigma_r^l = 0$ mientras σ_s^l (véase 254) podría no ser nulo, ya que η_l puede ser complejo, *i.e.* podría haber scattering sin absorción. Por el contrario, absorción siempre es acompañada por scattering. Para $\eta_l = -1$ se tiene el máximo de la sección eficaz de scattering elástico (véase 254) dado por: $4\pi\lambda_B^2(2l+1)$. Mientras para $\eta_l = 0$ las secciones eficaces de scattering elástico e inelástico se igualan ambas a $\pi\lambda_B^2(2l+1)$.

En definitiva, las secciones eficaces asumen valores según:

$$0 \leq \sigma_s^l \leq 4\pi\lambda_B^2(2l+1) \quad (253)$$

$$0 \leq \sigma_r^l \leq \pi\lambda_B^2(2l+1) \quad (254)$$

Para neutrones incidentes con energía suficientemente alta, la longitud de onda reducida λ_B resulta pequeña en comparación con el radio nuclear R . Las componentes que serán “absorbidas” por el núcleo se corresponden con:

$$l \leq \frac{R}{\lambda_B} \quad (255)$$

Entonces:

$$\sigma_r = \sum_l^{\frac{R}{\lambda_B}} \pi\lambda_B^2(2l+1) \quad (256)$$

Tomando el límite $\frac{R}{\lambda_B}$ puede calcularse la progresión aritmética, resultando:

$$\sigma_r = \pi R^2 \quad (257)$$

Y considerando que cuando σ_r asume su máximo valor, se tiene $\sigma_s = \sigma_r$, resulta:

$$\sigma_T = 2\pi R^2 \quad (258)$$

Este resultado ha sido históricamente uno de los mas importantes, ya que permitió, entre otras cosas, determinar radios nucleares a través de mediciones de transmisión ($T \approx \exp(-N\sigma_T)$), como se muestra esquemáticamente en la figura 30.

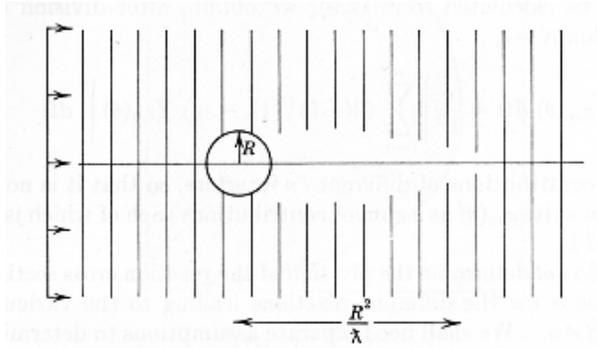


Figura 30. Esquema de scattering de neutrones con efecto “shadow”.

7.5.. El modelo de núcleo compuesto

El modelo propuesto originalmente por Niels Bohr hacia 1936 (publicado en *Nature*) cambió radicalmente el enfoque teórico de las interacciones, ya que este modelo permitió reemplazar las asunciones precedentes de partículas incidentes interactuando con un simple pozo de potencial.

Los modelos basados en pozos de potencial aplicados a neutrones predecían que los procesos de scattering elástico serán dominantes, mientras los efectos de resonancias deberán ocurrir en amplios intervalos de energías de 10 a 20 MeV. Cuando el grupo guiado por el ítalo-americano Enrico Fermi descubrió que las resonancias en la interacción de neutrones con elementos medios y pesados se presentaban tan cercanas (separaciones (Γ) alrededor de 1eV) y que las resonancias eran atribuibles a capturas neutrónicas radiativas, se confirmó la inexactitud del modelo de interacción basado en un simple pozo de potencial.

La teoría de Bohr del núcleo compuesto se basa en la hipótesis que cuando un nucleón incidente alcanza la superficie nuclear, éste interactúa fuertemente con los nucleones internos y “colapsa” formando un núcleo compuesto de masa $A + 1$. La energía de excitación del núcleo compuesto (energía cinética de la partícula incidente mas energía de ligadura del núcleo compuesto) es asociada con la “energía colectiva” de excitación de muchos de los nucleones. Este razonamiento fué basado, principalmente, en la fuerte interacción nucleón-nucleón y la altísima densidad nuclear.

En este modelo, las resonancias son asociadas a una serie de estados cuánticos quasi-estacionarios del núcleo compuesto, y por lo tanto el elevado número de resonancias observadas en núcleos pesados es consecuencia obvia del aumento de posibles modos de excitación, según el número de nucleones presentes.

La hipótesis de Bohr requiere también que el tiempo de vida medio del núcleo compuesto (τ) sea suficientemente largo comparado con el tiempo que le toma a una partícula incidente atravesar el diámetro nuclear. El decaimiento del núcleo compuesto se produce una vez que la energía acumulada en un nucleón o grupo de nucleones exceda un valor umbral, de modo de permitir la penetración de las barreras coulombiana y nuclear para escapar del núcleo.

“A medida que el tiempo de vida medio del núcleo compuesto sea mayor (en escala nuclear), los procesos internos (lentos) de decaimiento electromagnético (emisión γ) inician a ser comparables (competitivamente) con los procesos de emisión de partículas cargadas” es la explicación de la teoría de Bohr para las resonancias in las sección eficaz (n, γ). La vida media de un estado cuántico del núcleo compuesto está relacionado con el ancho de la línea de resonancia por medio de la relación: $\Gamma\tau \approx \hbar$.

Asumiendo que la energía de excitación del núcleo compuesto sea compartida entre los nucleones, resulta posible que el modo de decaimiento resulte independiente de la modalidad de formación, *i.e.* el núcleo “olvida” el modo en que fué formado. El decaimiento del sistema es, entonces, deter-

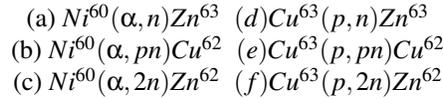
minado por su energía, momento angular y paridad. Generalmente existen diferentes posibles modos de desexcitación representados por anchos de línea parciales Γ_i con $\Gamma = \sum_i \Gamma_i$. En algunas reacciones nucleares es posible calcular las probabilidades relativas de emisión de diferentes partículas.

El modelo de Bohr sirvió, además, para el desarrollo de la teoría de dispersión de Breit-Wigner para las resonancias de reacciones. Para neutrones incidentes con energías >1 MeV no se observan resonancias, debido a que el aumento de la energía de excitación reduce la vida media del núcleo compuesto, y el número de modos posibles de desexcitación (canales de reacción) aumenta. Ambos efectos provocan un ensanchamiento de las líneas de resonancia, y si ésta supera el promedio del espaciado entre líneas, se pierde el concepto de niveles.

7.6.. Núcleo compuesto y experimentos

Ghoshal realizó un serie de importantes experimentos dedicados a comprobar el modelo del núcleo compuesto de la teoría de Bohr. Los experimentos fueron realizados para estudiar el decaimiento del núcleo compuesto de la teoría de Bohr. Los experimentos fueron realizados para estudiar el decaimiento del núcleo compuesto ${}_{30}\text{Zn}^{64}$, que puede ser producido bombardeando ${}_{29}\text{Cu}^{63}$ con protones o ${}_{28}\text{Ni}^{62}$ con partículas α ²¹.

Ghoshal estudió las siguientes reacciones (canales):



De acuerdo a la teoría de Bohr, la sección eficaz para estas reacciones está dada por:

$$\sigma(a, b) = \sigma_c \frac{\Gamma_b}{\Gamma} \quad (259)$$

donde σ_c es la sección eficaz (probabilidad) para la formación del núcleo compuesto por bombardeo con partículas de tipo a y Γ_b es el ancho de línea parcial para el decaimiento por medio de la emisión de partículas de tipo b .

Si la hipótesis de la teoría de Bohr fuera válida, el decaimiento del núcleo compuesto Zn^{64} debería ser independiente del mecanismo de formación, y, por lo tanto, el grado de producción de las reacciones (a) , (b) y (c) deberían coincidir con el grado (proporcionalidad) de producción de las reacciones (d) , (e) y (f) , respectivamente.

Los resultados experimentales obtenidos por Ghoshal se muestran en la figura 31.

Los resultados experimentales confirman la equivalencia entre los correspondientes proporcionalidades de producción para las reacciones consideradas. Además, los valores numéricos de las secciones eficaces son casi iguales tanto para protones incidentes como partículas α . Otro resultado importante es la notable mayor probabilidad relativa de decaimiento del sistema núcleo compuesto por medio de canales p o n respecto del canal $2n$.

7.7.. Teoría de dispersión de Breit-Wigner

La teoría de Breit-Wigner, basada en el modelo del núcleo compuesto propuesto por N. Bohr, permitió obtener una expresión analítica para la fórmula de dispersión de la resonancia de la componente S de la onda incidente de neutrones, dada por:

$$\sigma_s = \frac{\pi \lambda_B^2 \Gamma_s^2}{(E - E_0^2) + \frac{\Gamma_s^2}{4}} \quad (260)$$

²¹Para producir el mismo estado excitado del núcleo compuesto Zn^{64} , el haz de partículas α debe exceder energéticamente al haz de protones en aproximadamente 7MeV.

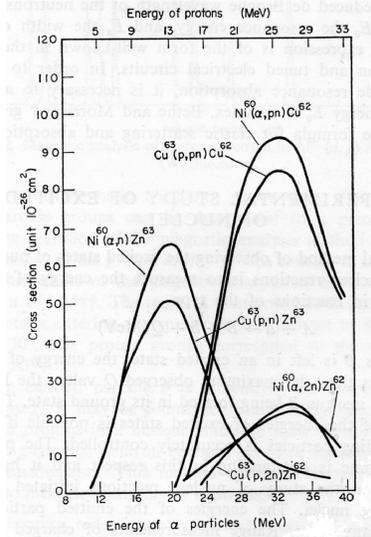


Figura 31. Producción de reacción por decaimiento del núcleo compuesto Zn^{64} .

donde λ_B es la longitud de onda reducida de de Broglie, E es la energía cinética del neutrón incidente, E_0 es la energía de resonancia y Γ_s es el ancho de línea del nivel correspondiente.

La expresión obtenida por Breit-Wigner 260 es, en forma, coincidente con resultados de teorías de dispersión ópticas de circuitos eléctricos acoplados.

Para extender la teoría incluyendo efectos de resonancia, resulta necesario asumir valores complejos para la energía de resonancia E_0 .

7.8.. Estados nucleares de excitación

Los métodos experimentales tradicionales para estudiar los estados nucleares excitados consisten en aprovechar las reacciones nucleares determinando la energía de los grupos de partículas emitidos en reacciones del tipo:

$$A + a \rightarrow B + b + Q(MeV) \tag{261}$$

Si el núcleo B queda en algún estado excitado, la energía de la partícula emitida b (E_b) será menor al máximo valor observado de Q (correspondiente al caso en que el núcleo B es formado en estado fundamental). Controlando de manera precisa la energía de las partículas incidentes (a), es posible obtener determinaciones precisas de las energías de los estados de excitación. En este sentido, la máquina de Van de Graaf ha aportado la posibilidad del estudio de reacciones nucleares provocadas por partículas cargadas incidendo sobre núcleos. De este modo, y por mecanismos y técnicas alternativas, como sentelladores y contadores proporcionales o espectrometría, es posible determinar los espectros de reacción, como se muestra en la figura 32.

Contrariamente, cuando se emiten neutrones, las determinaciones de las energías de excitación resultan menos precisas. Por ello, se consideran métodos alternativos como medición de tiempo de vuelo (time-of-flight).

En este sentido, la evidencia experimental muestra características propias de los niveles energéticos nucleares, a diferencia de los niveles atómicos, que son puramente dominados por efectos coulombianos. Contrariamente, los niveles energéticos nucleares se ven afectados por las fuerzas nucleares inter-nucleones de corto alcance y el nivel de espaciamiento (separación) no tiende a cero

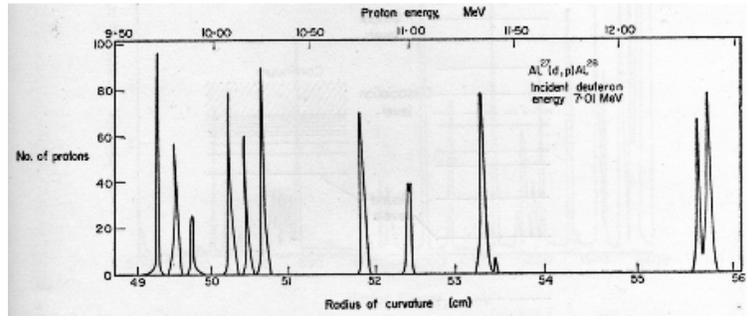


Figura 32. Espectro de reacción $Al^{27}(d,p)Al^{58}$ analizando momentos magnéticos.

al acercarse a la energía de disociación nuclear (mínima energía necesaria para “arrancar un nucleón o grupo de nucleones, en analogía a la ionización atómica), como ocurre en el caso atómico. Esta diferencia cualitativa se muestra esquemáticamente en la figura 33.

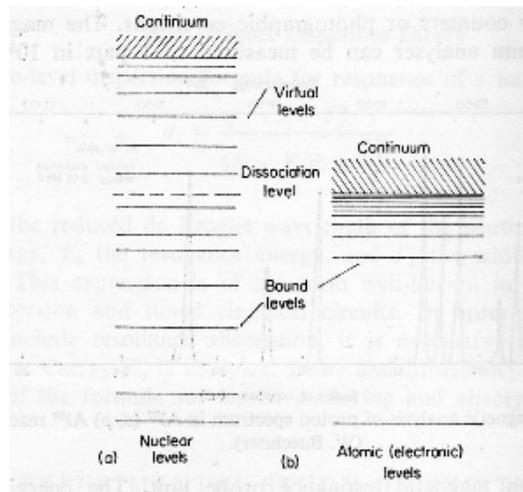


Figura 33. Niveles energéticos nucleares y atómicos.

Por encima de la energía de disociación, los estados nucleares (niveles virtuales) tienen tiempos de vida suficientemente largos (en escala nuclear) para ser determinados experimentalmente, y en estas condiciones no hay mayores diferencias esenciales (excepto el ancho finito de banda) respecto de estados por debajo de la energía de disociación. Sin embargo, para estados ligados (por debajo de la energía de disociación) la desexcitación solo es posible por medio de la emisión γ .

Existen diferentes técnicas que permiten determinar experimentalmente los espectros de emisión γ , por caso espectrómetros scintiladores o magnéticos que posibilitan medir la energía de fotoelectrones, electrones Compton de backscattering y/o pares positrón-electrón.

Utilizando protones incidentes sobre núcleos livianos e irradiando con energías por debajo del umbral endotérmico del proceso (p,n) , la captura radiativa de protones se produce por medio de la reacción (p,γ) , que resulta el único canal disponible, excepto el scattering elástico²². A modo de ejemplo, la figura 34 muestra la producción del espectro de rayos γ emitidos en la reacción $Al^{27}(p,\gamma)Si^{28}$.

²²Sólo en pocos casos muy específicos se observa una competencia con la emisión α .

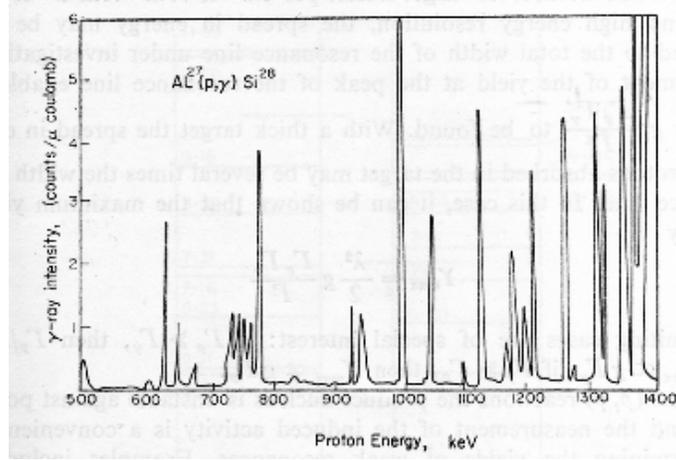


Figura 34. Captura radiativa de protones en Al^{27} .

Los resultados (figura 32) muestran las resonancias en el proceso de captura radiativa de protones. Para niveles (energías) de resonancia bien separados del proceso (p, γ) , la sección eficaz de la reacción (σ_r) en las zonas cercanas a la energía de resonancia (E_0) está dada por:

$$\sigma_r = \pi \lambda_B^2 g \frac{\Gamma_p \Gamma_\gamma}{(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (262)$$

De donde puede determinarse el máximo valor posible de σ_r , dado por:

$$\sigma_{r,MAX} = 4\pi \lambda_B^2 \frac{\Gamma_p \Gamma_\gamma}{\Gamma^2} \quad (263)$$

donde g es un factor estadístico que tiene en cuenta los estados de spin involucrados, y $\Gamma = \Gamma_p + \Gamma_\gamma$.

7.9.. Reacciones Foto-nucleares

Históricamente, la primer reacción fotonuclear observada (hacia 1933) fué la desintegración $H^2 + \gamma \rightarrow H^1 + n$ provocada por fotones de 2.62 MeV. De hecho, aprovechando esta reacción y conociendo con precisión las masas atómicas de hidrógeno y deuterio, pudo estimarse la masa del neutrón (Chadwick 1934).

Dado que los valores de energías de ligaduras nucleares de protones o neutrones (excepto H^2 y Be^9) son del orden de 5MeV, los fotones (rayos γ) emitidos por la gran mayoría de los isótopos radiativos naturales no cuentan con energía suficiente para inducir una reacción fotonuclear.

Debido al valor de la constante de estructura fina ($\frac{1}{137}$), las interacciones nucleares electromagnéticas son particularmente débiles en comparación con las interacciones entre nucleones. Por lo tanto, las secciones eficaces para reacciones fotonucleares son numéricamente bajas²³.

La actividad inducida en un núcleo radiativo producido por una reacción (γ, n) utilizando un espectro (Bremsstrahlung con energía máxima E_0) incidente caracterizado por $N(E, E_0)$ resulta proporcional a:

$$\int_0^{E_0} N(E, E_0) \sigma(E) dE \quad (264)$$

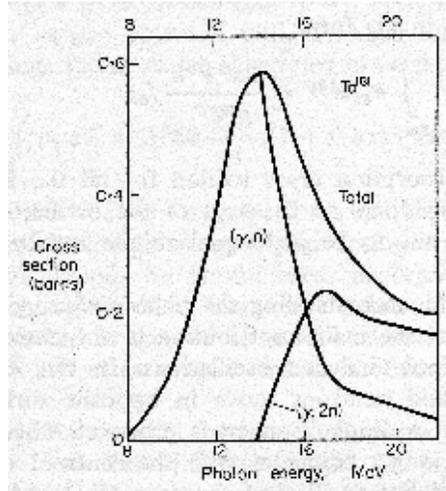


Figura 35. Resonancia fotonuclear gigantesca en Ta^{181} .

En este sentido, se dificulta la discriminación energética del proceso fotonuclear. Y, por lo tanto, más recientemente se desarrollaron métodos basados en haces monocromáticos para estudiar la reacción foto-nuclear. De este modo ha sido posible establecer curvas de secciones eficaces foto-nuclear en un amplio rango energético, siendo la característica más sobresaliente, el hecho de presentar “*resonancias gigantes*” tanto en la reacción (γ, n) como (γ, p) . La energía E_r a la cual se observa la resonancia decrece según el número másico A . La relación establecida empíricamente es:

$$E_r = \frac{80}{A^{1/3}} \text{MeV} \quad (265)$$

Mientras el ancho de la resonancia varía entre 5 y 7 MeV, como muestra la figura 35.

El proceso foto-nuclear puede estudiarse utilizando argumentos análogos al caso del análisis cuántico de absorción de luz por parte de electrones atómicos (C. Smith, 1966) y derivar expresiones para la probabilidad de transición ($P_{m,n}$) entre un estado inicial m a un estado final n en un tiempo t :

$$\int |P_{m,n}(t)| d\omega \quad (266)$$

calculada sobre un entorno de frecuencias alrededor de $\omega_{0,n} = \frac{E_n - E_0}{\hbar}$.

7.10.. Reacciones nucleares con iones pesados

Por “iones pesados” se entiende iones cargados eléctricamente con carga $> 2q_e$. El desarrollo de potentes máquinas (aceleradores lineales, ciclotrones, tandems, etc) capaces de acelerar iones pesados ha permitido alcanzar energías suficientes para realizar experimentos de reacciones nucleares inducidas por iones pesados.

Los procesos de interacción entre iones pesados incidentes y núcleos incluyen scattering elástico, inducción de reacciones nucleares, fisión, scattering inelástico, etc. Originalmente, algunos de los iones más estudiados fueron: Li, C, N, O y Ne con energías que varían entre 2MeV (para Li) a unos 200MeV (para Ne).

²³Generalmente, no mayores a algunos centenares de milibarns.

Algunas de las principales características de las interacciones con iones pesados, fueron predichas teóricamente (Breit, 1952), las cuales prevén: altos valores de energías de excitación del sistema compuesto creado por reacción con iones pesados bombardeando blancos como ^{16}O ; la capacidad de iones pesados para penetrar en regiones de la superficie nuclear; las secciones eficaces muy altas para la excitación coulombiana y la formación de núcleos en estados elevados de momento angular orbital ($l \approx 90$).

Para la detección de productos de reacciones de iones pesados, se emplean blancos gruesos (como contadores de semiconductores) para conseguir “frenar” las partículas de manera efectiva, y por lo tanto se obtiene una baja discriminación energética.

Las interacciones de los núcleos con haces de iones pesados incidentes con suficientemente baja energía, origina, principalmente, repulsión coulombiana y consecuentemente scattering elástico (de Rutherford). En caso contrario, con suficiente energía los iones incidentes pueden alcanzar el núcleo provocando reacciones nucleares. Sea p el momentum relativo y b el parámetro de impacto, resulta pues por conservación del momento angular y de energía:

$$pb = l\hbar = p'X \quad (267)$$

donde p' es el momentum relativo luego de la interacción y X es la mínima distancia de acercamiento durante la interacción.

$$\frac{p^2}{2m} - \frac{Z_n Z_i q_e^2}{R} \frac{R}{X} = \frac{p'^2}{2m} \quad (268)$$

donde m es la masa reducida y Z_n, Z_i indican la cantidad de protones en el núcleo en reposo y en el ión pesado incidente.

Entonces, en términos de la energía de los iones incidentes (E), la condición para que los iones incidentes alcancen al núcleo es:

$$2mR^2 \left(E - \frac{Z_n Z_i q_e^2}{R} \right) \geq l_c^2 \hbar^2 \quad (269)$$

De este modo, puede calcularse la sección eficaz de scattering elástico por medio de la sustracción de los términos parciales correspondientes a $l < l_c$ a la amplitud de scattering coulombiana, siendo R el único parámetro relevante, que puede escribirse en término de las contribuciones del núcleo en reposo y del ión pesado incidente como: $R = r_0 \left(A_n^{\frac{1}{3}} + A_i^{\frac{1}{3}} \right)$.

Por otro lado, en interacciones más distantes, donde las fuerzas nucleares pierden relevancia, los procesos inducidos son principalmente excitaciones nucleares debidas a interacción electromagnética. Mientras que en caso de producirse colisiones entre iones pesados incidentes y núcleos en reposo, se observan reacciones nucleares simples en correspondencia a efectos de transferencia de un nucleón, como ejemplo: $Mg^{26}(N^{14}N^{13})Mg^{27}$, y este tipo de reacciones (figura 36) ocurren incluso inducidas por colisiones periféricas, sin necesidad de formación de núcleo compuesto.

Para energías muy altas, se observan reacciones más complicadas en correspondencia con la formación del núcleo compuesto. Se observa también un particular comportamiento en la distribución angular de las partículas producto de reacción: el núcleo compuesto de momento angular elevado ($> 50\hbar$) dirigido en la dirección perpendicular a la trayectoria del ión incidente provoca que los fragmentos de reacción escapen en un plano perpendicular al momento angular, pero también y con idéntica probabilidad, formando un ángulo θ respecto de la línea de impacto, lo cual “parecería” indicar que la distribución angular varía como $\sin(\theta)$ en la dirección y ambos sentidos respecto de la línea de impacto.

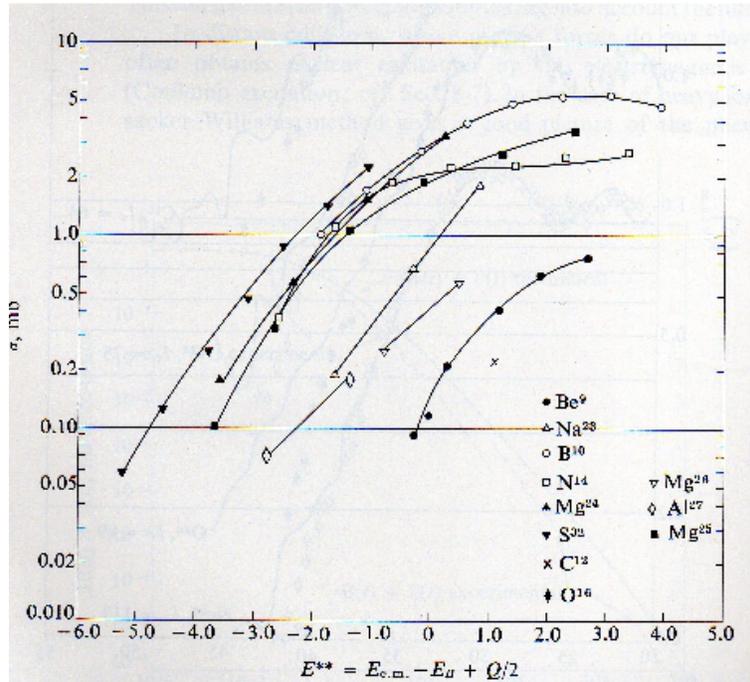


Figura 36. Sección eficaz total de transferencia para algunas reacciones nucleares por iones pesados.

7.11.. Fuentes de neutrones

La fuente de neutrones mas simple es una combinación de substancias radioactivas y algún elemento liviano, como berilio o boro. Los neutrones son generados por procesos de tipo (α, n) o (γ, n) . Este tipo de fuentes es de muy baja eficiencia de producción, comparada con otras, pero ofrecen la ventaja de ser de dimensiones pequeñas y de producción constante. A título de ejemplo, la reacción $Ra - \alpha - Be$ genera $1,4 \cdot 10^7$ neutrones por segundo por gramo de Ra, por cada 10^6 partículas α .

Por otro lado, las reacciones producidas en potentes aceleradores de partículas, también generan neutrones, de mucha mas intensidad. Además, utilizando blancos delgados y seleccionando una dirección específica de neutrones emitidos, puede obtenerse un haz aproximadamente monocromático.

Por ejemplo, la reacción ${}^7\text{Li} + {}^1\text{H} \rightarrow {}^7\text{Be} + n - 1,647\text{MeV}$ (endotérmica) puede producir neutrones con energías de unos pocos keV, como se muestra en la figura 37.

Por último, los reactores nucleares generan la producción de neutrones de mayor eficiencia (10^{14} neutrones por cm^2 por segundo). Los neutrones producidos en el núcleo del reactor pueden ser extraídos por columnas, a través de las cuales se los termalizan por medio de procesos de moderación. Neutrones extremadamente energéticos (ultraveloces con energías de hasta 50MeV), en principio, pueden ser generados por colisiones de protones incidentes con blancos de núcleos livianos.

7.12.. Termalización (*slowing down*) de neutrones

Los neutrones generados en el núcleo de reactores, o por otros mecanismos de producción, son de energías del orden de algunos MeV. Sin embargo, a medida que los neutrones penetran el medio circundante pierden energía debido a las interacciones que sufren, este proceso se conoce como moderación. A diferencia del caso de partículas cargadas, para las cuales los efectos electromagnéticos

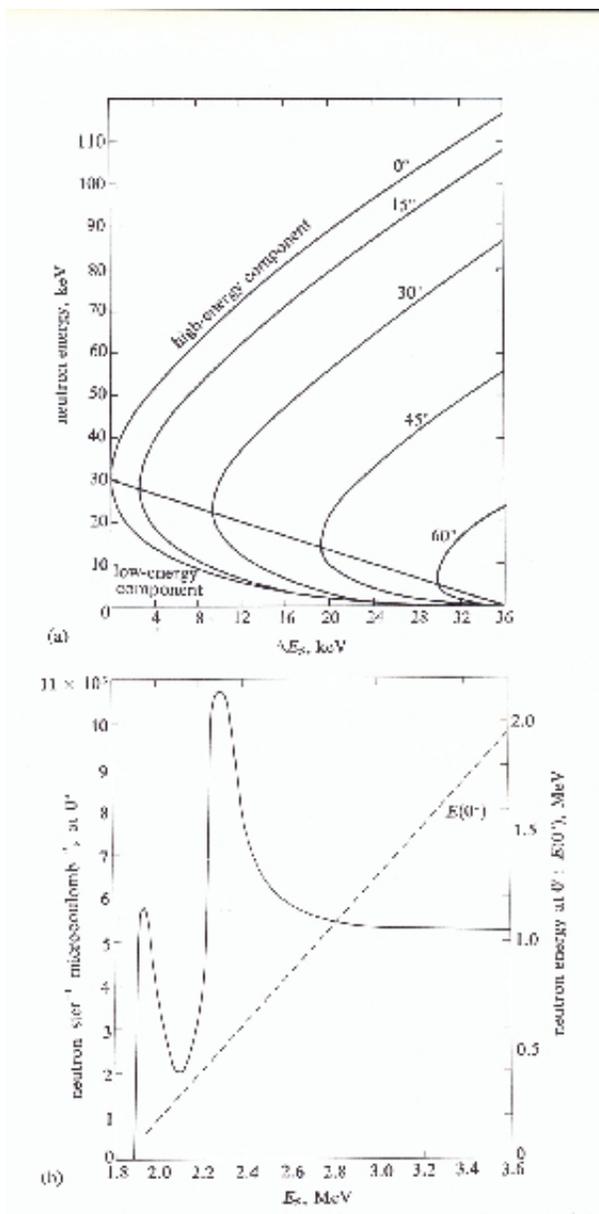


Figura 37. Neutrones producidos al irradiar ${}^7\text{Li}$ con protones en aceleradores.

de ionización, los neutrones pierden energía principalmente por colisiones nucleares, que eventualmente son inelásticas dejando al núcleo en estado excitado o bien elásticas que originan núcleo en movimiento con energía cinética dada por la energía del neutrón incidente.

Para excitar núcleos del medio circundante, el neutrón incidente requiere energías del orden o mayores a 1MeV, aproximadamente. Por debajo de este límite, las interacciones que frenan los neutrones son casi exclusivamente colisiones elásticas, que se suceden una tras otra hasta que el neutrón llega a valores de energía cinética en equilibrio térmico con el entorno (alrededor de 1/40 eV). A este punto, las colisiones elásticas ya no tienen ningún efecto en la energía del neutrón y se alcanza el equilibrio térmico.

7.13.. Fisión y fusión nuclear: conceptos básicos

Entre los diferentes procesos nucleares, la fisión es uno de los más importantes. Núcleos pesados, como el uranio, sometidos a bombardeo, pueden dividirse en fragmentos pedazos.²⁴ Este fenómeno se conoce como fisión nuclear, y dado que es acompañado por la emisión²⁵ de neutrones que pueden catalizar subsiguientes reacciones, se genera la posibilidad de reacciones en cadena. Ocasionalmente, los núcleos pesados presentan fisión espontánea, sin estímulo externo. De hecho, este tipo de decaimiento resulta de probabilidad despreciable frente al decaimiento alfa.

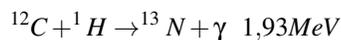
Considerando un núcleo de número másico A , número atómico Z y masa $M(A, Z)$. El núcleo original resultaría ser estable frente a la fragmentación en 2 fragmentos iguales de masa $M(A/2, Z/2)$, según la siguiente relación²⁶:

$$M(A, Z) - 2M(A/2, Z/2) = 17,2A^{2/3} \left(1 - 2^{1/3}\right) + 0,70 \frac{Z^2}{A^{1/3}} \left(1 - 2^{-2/3}\right) [MeV] \quad (270)$$

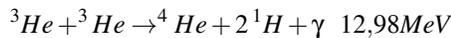
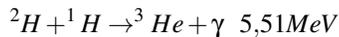
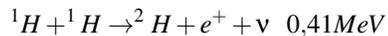
Para núcleos pesados, la aplicación de esta relación empírica (Ec. 6.1) indica que es posible la fragmentación, dando un valor de 169 MeV para el caso de ^{236}U , por ejemplo.

Por otra parte, la fusión de núcleos livianos consiste en la formación de núcleos pesados a través de la unión de núcleos más livianos. Por ejemplo, uniendo 2 neutrones y 2 protones para formar un partícula alfa²⁷.

Como se mencionó en la introducción, el proceso de fusión nuclear es la fuente de energía de las estrellas. En la tierra, este proceso ocurre en las bombas de hidrógeno, y gran interés ha generado la posibilidad de realizar esta reacción de manera controlada para utilizarla como fuente de energía. Algunos ejemplos de reacciones de fusión son²⁸:



o bien, otro ciclo completo:



²⁴en el caso del uranio, éste puede dividirse en ^{139}Ba y ^{97}Kr despedidos con energía alrededor de 170MeV, por ejemplo.

²⁵denominada *evaporación*

²⁶Esta relación se deriva de la posibilidad de deformar al núcleo esférico en elipsoide, para diferentes modelos nucleares, como “modelo a gota” o “modelo compuesto”

²⁷en este caso se requieren 26MeV.

²⁸el primer ejemplo es parte del ciclo del carbono.

7.14.. Reacciones nucleares inducidas por neutrones

Las reacciones inducidas por neutrones tienen una característica fundamental, que es una sección eficaz total σ_t , dada por la suma de la sección eficaz elástica y las contribuciones de las diferentes reacciones nucleares.

La sección eficaz total puede determinarse experimentalmente, midiendo la atenuación de un haz de neutrones²⁹ incidiendo sobre un blanco grueso de espesor conocido, mientras que medir las otras contribuciones a la sección eficaz resulta mucho más difícil y requiere la determinación de los productos de reacción, así como la intensidad del haz incidente.

7.14.1.. Energías bajas e intermedias para núcleos intermedios

Solo pocas reacciones ocurren para energías bajas e intermedias. Para núcleos intermedios, los procesos más importantes son *scattering* elástico y captura radiativa. Todos los demás procesos resultan energéticamente imposibles o tan poco probables que pueden despreciarse.

El *scattering* inelástico no es posible ya que, en general, el primer estado excitado del núcleo *target* está varios cientos de keV por encima del estado fundamental. Las reacciones (n, p) o (n, α) son muy débiles porque la barrera coulombiana actúa como obstáculo para la emisión de partículas cargadas.

7.14.2.. Energías bajas para núcleos pesados

Los únicos procesos de relevancia para energías bajas de neutrones interactuando con núcleos pesados son *scattering* elástico, captura radiativa y, en algunos casos específicos, fisión inducida por neutrones. El efecto de la barrera Coulombiana como obstáculo para la emisión de partículas cargadas de baja energía, resulta aún más importante que para núcleos intermedios. Solo neutrones incidentes de estado S ($l = 0$) contribuyen significativamente a las reacciones en este ámbito.³⁰

Las reacciones entre neutrones incidentes de baja energía con núcleos pesados se caracterizan por el hecho de que la sección eficaz generalmente muestra resonancias, muy próximas en energías.

7.14.3.. Energías intermedias para núcleos pesados

Como se mencionó, para neutrones de baja energía incidiendo sobre núcleos pesados, los anchos de resonancia satisfacen la relación $\Gamma_n^s \Gamma_{rad}^s$, donde Γ_n^s es el ancho de línea de neutrones en la resonancia y Γ_{rad}^s es el correspondiente ancho de captura radiativa. Se observa que Γ_n^s aumenta³¹ al crecer la energía, mientras que Γ_{rad}^s no depende fuertemente de la energía de los neutrones.³²

Pero, para este ámbito y asumiendo neutrones con energías alrededor de 1 MeV, la sección eficaz de captura radiativa es del orden de 10^{-25} cm², excepto para núcleos de números mágicos llamados *mágicos*, como bario, plomo y bismuto.

7.14.4.. Energías altas para núcleos pesados e intermedios

Para energía de neutrón incidente superior a 1 MeV, aproximadamente, inicia a ser apreciable la posibilidad de ocurrencia de nuevos procesos. Se observa *scattering* inelástico y reacciones de las cuales se emiten partículas cargadas. El núcleo compuesto puede decaer por canales diferentes al canal de entrada.

²⁹bien colimado.

³⁰ya que $\lambda/2\pi \sim R$.

³¹de acuerdo con $\sqrt{|E - E_{res}|}$

³²al menos para variaciones de $E - E_{res}$ de hasta 0.5 MeV.

La distribución energética de neutrones dispersados inelásticamente refleja los niveles energéticos del núcleo *target*. La producción de reacciones (n, p) y (n, α) es, naturalmente, muy baja en comparación con reacciones (n, n) .

7.14.5.. Energías muy altas para núcleos pesados e intermedios

La sección eficaz en la región de energías muy altas muestra un comportamiento simple. La sección eficaz total, así como la de reacción, prácticamente no dependen de las propiedades individuales de cada núcleo *target*. La sección eficaz total se aproxima a $2\pi R^2$, siendo levemente mayor.

7.15.. Reacciones de iones pesados

Hacia 1970 el desarrollo tecnológico permitió la aceleración de iones, como Li, C, N, etc., hasta Ne; consiguiendo energías de hasta unos 10MeV por nucleón. Los iones muestran una serie de fenómenos muy interesantes, y el estudio de este tipo de colisiones nucleares constituye una rama muy importante en física nuclear.

A continuación se describen, de manera muy sencilla, los rasgos generales de este tipo de procesos. Para energías suficientemente bajas, los iones sufren una importante repulsión Coulombiana, y por lo tanto sólo se presenta dispersión Rutherford. Pero, si el ión alcanza el blanco, puede ocurrir una reacción. Para describir este proceso, se introduce el parámetro de impacto b típico del proceso de dispersión Rutherford, y sea p el momentum relativo. Aplicando los principios de conservación, se tiene:

$$pb = l\hbar = p'X \quad (271)$$

donde $l\hbar$ es el momento angular, X es la distancia mínima entre el ión incidente y el núcleo del *target*, y p' es el momentum relativo. Se tiene, también:

$$2mR^2 (E - Z_{nuc}Z_{ion}q_e^2/R) \geq l_c^2\hbar^2 \quad (272)$$

donde $p^2/2m = E$, y asumiendo que los iones incidentes con momento angular orbital menor a $l_c\hbar$ son absorbidos en el proceso de colisión. El parámetro R puede obtenerse de la expresión empírica:

$$R = r_0 (A_{nuc}^{1/3} + A_{ion}^{1/3}) \quad (273)$$

Este método semi-clásico ofrece una satisfactoria descripción del proceso, como sugiere la figura 38.

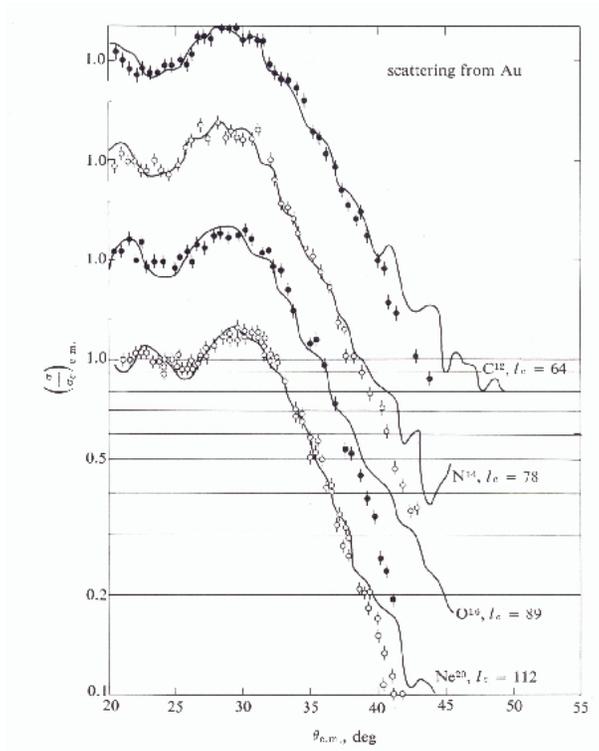


Figura 38. Razón de sección eficaz elástica a Coulombiana para haces de iones pesados dispersados por un target de oro para energías de incidencia de unos 10MeV por nucleón.

7.16.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo VII

7.16.1.. Reacciones nucleares y fuentes de neutrones

Ejercicio 7.1:

Ejercicio 7.2:

Ejercicio 7.3:

8.. Interacción de partículas cargadas en material biológico

Esta sección se dedica al tratamiento de los conceptos principales de la interacción de partículas cargadas con material biológico. Se inicia con una introducción a los efectos de la radiación ionizante sobre medios acuosos que describe los principales mecanismos de transferencia de energía entre el haz incidente y el medio irradiado. Luego, se exponen modelos y evidencia empírica sobre la interacción de partículas cargadas con materiales biológicos. Se focaliza la exposición sobre conceptos de interés y utilidad en el campo de las terapia con haces de partículas. En este sentido, se desarrollan los conceptos de *stopping power* y rango para haces de partículas. Hacia el final del capítulo se dedica una sección a un compendio de las consideraciones dosimétricas para haces de partículas.

8.1.. Elementos de Radioquímica

La radiación ionizante produce electrones secundarios, los cuales rápidamente son frenados (termalizados) en el medio material irradiado. Para el caso del agua, el umbral energético para producir transiciones electrónicas es 7.4 eV. Para partículas cargadas, primarias o secundarias generadas en el medio irradiado, el proceso de termalización se realiza por medio de una secuencia de eventos discretos, tanto de colisión como radiativos.

En el caso de medios acuosos, dependiendo de la cantidad de energía transferida al electrón, la molécula puede sufrir alguno de estos procesos:

- Ionización (umbral energético de 13 eV)
- Excitación (umbral energético de 7.4 eV)
- Transferencia térmica (vibración, rotación, traslación)³³

La dinámica de evolución del proceso de transferencia de energía del haz incidente al medio irradiado puede dividirse temporalmente en procesos que requieren escalas de tiempos diferentes para realizarse, como se indica a continuación en la tabla 8.1..

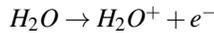
Evento	Escala temporal [s]
Partíc. ioniz. atravesando molécula	10^{-18}
Intervalo entre ioniz. sucesiva	10^{-15}
Disociación especies excit., transf. térm. e inicio reacc.	10^{-14}
Electrones sec. reducidos a energías térmicas	10^{-13}
Difusión de radicales	10^{-12}
Prod. molec. formados. Decaim. radiat. estad. excit. ³⁴	10^{-8}
Mayoría de reac. químicas terminadas ³⁵ .	10^0

El evento inicial es la transferencia de alrededor de 7 a 100 eV, energía suficiente para causar ionizaciones o excitaciones múltiples in moléculas de agua. La transferencia de energía al medio en sistemas biológicos típicamente involucra ionización de moléculas de agua, aunque puede también involucrar directamente macromoléculas celulares, como ADN.

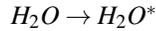
Por medio de ionizaciones y excitaciones, el paso de partículas cargadas a través de material biológico crea 3 tipos de especies en las proximidades del *track* de la partícula:

- Ionización directa de agua produciendo un ión radical y un electrón libre de subexcitación ($E > 13 \text{ eV}$).

³³Para que la transferencia térmica tenga algún efecto en la bioquímica celular se requiere dosis de al menos 10^4 Gy , que implicaría aumentar la temperatura algunos grados.



- Transferencia de energía puede producir una molécula de agua en estado excitado.



La escala de tiempo para la creación de estas 3 especies es del orden de 10^{-16} s. Luego de ser creadas, estas tres especies inician a difundir y reaccionar entre ellas o con otras moléculas del medio.

Existen diferentes reacciones que ocurren para termalizar las partículas cargadas en medios acuosos, y los productos de reacción se caracterizan por medio del factor G denominado producción química (*chemical yield*), definido como la cantidad de una especie particular que se produce, cada 100 eV, de pérdida de energía por parte de la partícula cargada y sus secundarios cuando son termalizados en agua.

8.2.. Relación energía-rango para haces de iones terapéuticos

El espectro energético de un haz de partículas incidente varía en función de la profundidad de penetración. Este espectro, en cualquier profundidad, puede caracterizarse por diferentes parámetros, como energía máxima, energía mas probable, energía media y por supuesto, el espectro energético entero. La variación de estos parámetros energéticos en función de la profundidad de penetración en el medio material está determinada por la ecuación de transporte de Boltzmann. De hecho, existen varios trabajos (A. Brahme, National Institute of Radiation Protection, Stockholm, Sweden, 1975 y P. Andreo, A. Brahme. Mean energy in electron beams, Med. Phys. 8, 1981.) para el caso de electrones que proveen expresiones analíticas para esta dependencia.

Las principales diferencias de rango y energía media entre haces de electrones y iones terapéuticos provienen del hecho de que para electrones la dispersión múltiple y generación de Bremsstrahlung son dominantes, mientras que en el caso de iones las interacciones electrónicas son despreciables frente a las de origen nuclear, las cuales determinan el transporte de los iones.

Para lograr un aprovechamiento efectivo de las ventajas físicas y biológicas de los haces de iones, debe caracterizarse la dependencia de la energía media según la profundidad, $\bar{E}(z)$, para el cálculo del depósito de energía y de dosis absorbida. De hecho, relaciones energía-rango para haces terapéuticos de iones livianos y electrones resultan fundamentales para realizar cálculos dosimétricos precisos.

La dependencia de la energía media con la profundidad puede determinarse a partir del siguiente cociente de integrales:

$$\bar{E}(z) = \frac{\int E \Phi_E(z) dE}{\int \Phi_E(z) dE} \quad (274)$$

donde Φ_E es fluencia del haz incidente diferencial en energía.

Debido a que el *straggling* es despreciable para iones, el *stopping power* ($S(E)$) es aproximadamente lineal en el rango de energía del espectro incidente. Entonces, la integral en la ecuación 274 puede aproximarse por:

$$\bar{E}(z) = \bar{E}_0 - \int_0^z S(\bar{E}(z')) dz' \quad (275)$$

La expresión 274 puede resolverse para varias situaciones, por medio de diferenciación y posterior integración, utilizando $\frac{d\bar{E}}{S(\bar{E})} = -dz$. Se distinguen, en particular, 6 casos: electrones de baja, media y alta energía y iones con energía media, alta y relativista, como se describe a continuación:

Electrones de energía media

Electrones de energía baja (1-10 MeV) resultan ser el caso mas simple, ya que el *stopping power* S puede asumirse constante e independiente de la energía, de modo que $\bar{E}(z)$ puede resolverse de las ecuaciones 274 y 275 por integración directa:

$$\bar{E}(z) = \bar{E}_0 - \int_0^z S_{col,0} dz' = \bar{E}_0 \left(1 - \frac{S_{col,0} z}{\bar{E}_0} \right) \quad (276)$$

Lo cual funciona muy bien para valores de profundidad próximos a la superficie de incidencia. Sin embargo, para profundidades mayores, puede verse que se obtiene la siguiente relación³⁶, que se ajusta mejor en zonas cercanas al final del rango de las partículas:

$$\bar{E}(z) = \bar{E}_0 \left(1 - \frac{z}{r_0} \right) \quad (277)$$

donde r_0 es muy próximo al rango práctico R_p , para el caso de elementos de bajo número atómico y energías intermedias³⁷. En la aproximación de S independiente de la energía, se tiene:

$$r_0 \approx \frac{\bar{E}_0}{S_{col,0}} \quad (278)$$

Electrones de alta energía

En este caso, se utiliza una expresión modificada para ecuación diferencial directamente integrable:

$$\frac{\bar{E}(z)}{1 + \frac{S_{rad,0} \bar{E}(z)}{S_{rad,0} \bar{E}_0}} = -dz S_{col,0} \quad (279)$$

cuya solución es:

$$\bar{E}(z) = \frac{\bar{E}_0}{S_{rad,0}} \left[(S_{col,0} + S_{rad,0}) e^{-\frac{S_{rad,0}}{\bar{E}_0} z} - S_{col,0} \right] \quad (280)$$

Esta última expresión (280) resulta de mejor ajuste a datos experimentales que 276, ya que toma en cuenta la dependencia energética de las pérdidas radiativas. Partiendo de la definición de energía media, el rango en la aproximación CSDA se obtiene de colocar $\bar{E}(z = r_0) = 0$, entonces:

$$r_0 = \frac{\bar{E}_0}{S_{rad,0}} \ln \left[1 + \frac{S_{rad,0}}{S_{col,0}} \right] \quad (281)$$

Combinando las últimas 2 ecuaciones, se obtiene:

$$\bar{E}(z) = \bar{E}_0 \left[\frac{e^{S_{rad,0}(r_0-z)/\bar{E}_0} - 1}{e^{S_{rad,0}r_0/\bar{E}_0} - 1} \right] \quad (282)$$

Para electrones de menores energías, el rango CSDA es fuertemente afectado por dispersión múltiple de modo que el rango práctico R_p , resulta algo menor al previsto por estas relaciones.

³⁶Conocida como relación de Harder, obtenida en la aproximación CSDA.

³⁷situación en la que las pérdidas radiativas son despreciables

8.3.. *Stopping Power* para haces de iones

Para el caso de iones livianos, las colisiones inelásticas con electrones atómicos son el mecanismo fundamental de pérdida de energía del ión en el medio. En base al desarrollo a primer orden de la aproximación de Born, se obtiene la ecuación de Bethe para el *stopping power* de un proyectil genérico de carga Z_p y masa M en un medio de carga Z_A y masa M_A :

$$\frac{1}{\rho} \frac{dE}{dz} = 4r_e^2 m_e c^2 \frac{Z_A}{M_A} \frac{Z_p^2}{\beta^2} \left[\frac{1}{2} \ln(2m_e c^2 \beta^2 W_{max} \gamma^2) - \beta^2 - \ln(I) - \frac{C}{Z_A} - \frac{\delta}{2} \right] \quad (283)$$

donde r_e es el radio clásico del electrón, m_e la masa del electrón, $\beta \equiv v/c$, $\gamma \equiv \sqrt{1 - \beta^2}$, I es la energía media de ionización/excitación, δ es la corrección por efecto de densidad y C/Z_A es el término de corrección de *shell*. La máxima energía que puede transferirse en una colisión W_{max} está dada por:

$$W_{max} = \frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2}{1 + 2\frac{m_e}{M} \gamma + \left(\frac{m_e}{M}\right)^2} \quad (284)$$

que en el límite práctico $M \gg m_e \Rightarrow \frac{m_e}{M} \rightarrow 0$, resulta:

$$W_{max} \approx 2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2 \quad (285)$$

Iones livianos con energías de bajas a intermedias

En el rango de 10 a 500 MeV/u, el cuadrado de la velocidad (normalizada) tiene mayor influencia en la dependencia energética del *stopping power* que el término logarítmico, entonces la fórmula de Bethe se reduce a dependencia con la energía según el inverso, resultando en la siguiente ecuación diferencial:

$$\bar{E}(z) d\bar{E}(z) = -S_0 \bar{E}_0 dz \quad (286)$$

de donde, resolviendo resulta:

$$\bar{E}(z) = \bar{E}_0 \sqrt{1 - \frac{2S_0 z}{\bar{E}_0}} \quad (287)$$

y esta expresión es bastante precisa en vecindades de la superficie de incidencia; mientras que conociendo el rango de CSDA (R_0), se obtiene una expresión aplicable a mayor profundidad:

$$\bar{E}(z) = \bar{E}_0 \sqrt{1 - \frac{z}{R_0}} \quad (288)$$

Una vez más, al igual que para el caso de electrones, por medio de estas relaciones obtenidas por aproximaciones, el rango de CSDA puede obtenerse conociendo el *stopping power*, la energía media inicial y la condición de conorno $\bar{E}(z = R_0)$, resultando:

$$R_0 \approx \frac{\bar{E}_0}{2S_0} \quad (289)$$

y puede verse que es la mitad del *stopping power* calculado para electrones, debido al altísimo valor del *stopping power* hacia el final del rango, que da lugar al pico de Bragg.

Iones livianos con energías de bajas a intermedias

Para el tratamiento de haces de iones livianos de alta energía, se procede considerando el término en el cuadrado de la velocidad (normalizada), se considera una relación potencial mas general para la ecuación diferencial:

$$\bar{E}^{k-1} dE = -S_0 \bar{E}^{k-1} dz \quad (290)$$

cuya solución resulta:

$$\bar{E}(z) = \bar{E}_0 \left(1 - \frac{kS_0}{\bar{E}_0} z \right)^{1/k} \quad (291)$$

de donde puede determinarse el rango de CSDA: $R_0 = \bar{E}_0/kS_0$.
Combinando los últimos resultados, se obtiene:

$$\bar{E}(z) = \bar{E}_0 \left(1 - \frac{z}{R_0} \right)^{S_0 R_0 / \bar{E}_0} \quad (292)$$

Para energías muy bajas ($< 10 \text{ MeV}/u$), la ecuación standard de Bethe requiere correcciones, como los modelos de Barkas o Bloch, debido principalmente al aumento del *stopping power* nuclear (S_{nuc}) para energías (velocidades) bajas, como se muestra en la figura 39.

Iones livianos con energías relativistas

En este regimen, las pérdidas radiativas por Bremsstrahlung son muy importantes. En el límite relativista, las correcciones de Barkas-Bloch son despreciables para valores grandes de γ . En aproximación, el *stopping power* de la ecuación de Bethe está dominado por el término logarítmico, obteniéndose:

$$S[\bar{E}(z)] = \frac{(S_{el,0} + S_{rad,0})\bar{E}_0}{\bar{E}(z) \ln[C(1 + \bar{E}(z)/E_0)]} \quad (293)$$

el valor de la constante C depende de la energía media de ionización I .

8.4.. Relación entre energía y rango de CSDA

Desde el punto de vista teórico, a partir de la dependencia energética del *stopping power*, la relación energía-rango de CSDA, resulta:

$$R_p(E_p) = \int_0^{E_p} \frac{dE}{S[\bar{E}(z)]} = \frac{1}{S_{el,0} + S_{nuc,0}} \int_{\Delta}^{E_p} \left(\frac{\bar{E}(z)}{\bar{E}_0} \right)^{k-1} + \int_0^{\Delta} \frac{dE}{S} \quad (294)$$

de donde:

$$R_p(E_p) = \frac{E_p^k}{k(S_{el,0} + S_{nuc,0})\bar{E}_0^{k-1}} + R_{\Delta} \quad (295)$$

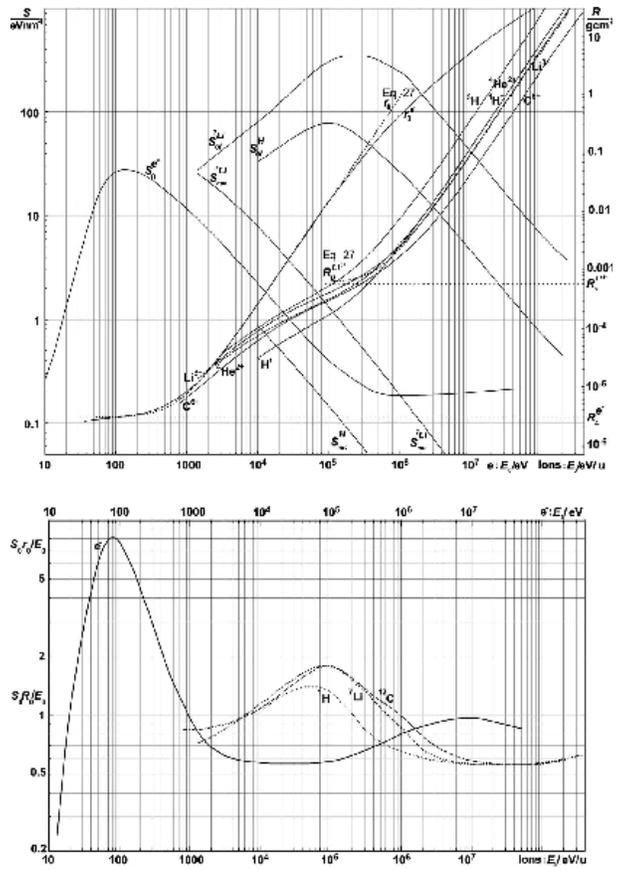


Figura 39. Stopping power en función de la energía.

donde E_p es la energía mas probable, Δ es la mínima energía para la cual se asume válida la dependencia en energía planteada para el *stopping power* y R_Δ es el correspondiente rango residual.

Entonces, el rango práctico para iones livianos puede obtenerse de una relación simple (potencial), a partir de $k = \frac{\bar{E}_0}{R_0 S_0}$, como sigue:

$$R_p(E_p) = R_0 \left(\frac{E_p}{\bar{E}_0} \right)^{E_0/R_0 S_0} + R_\Delta \quad (296)$$

y la generalización de esta expresión resulta:

$$\frac{S}{\rho} = \frac{Z_A Z_p^2}{M_A} \left(\frac{M_p}{E_p} \right)^{k-1} \quad (297)$$

o bien:

$$R = \frac{M_A M_p}{\rho Z_A Z_p^2} \left(\frac{E_p}{M_p} \right)^k \quad (298)$$

En base a la ecuación anterior (298), puede calcularse el rango práctico para cualquier ión (Z_p, M_p) en un medio arbitrario (Z_A, M_A), en la aproximación en que k es casi independiente del *stopping power*.

Resulta conveniente expresar el rango práctico de cualquier ión en términos del rango de protones en agua, como sigue:

$$R_p(E_p/M_p, Z_p, M_p, Z_A, M_A) = \frac{\rho_{Agua} Z_{Agua} M_A M_p}{\rho_A Z_A M_{Agua} Z_p^2} (E_p/1, 1, 1, Z_{Agua}, M_{Agua}) \quad (299)$$

Nótese que este resultado prevé valores iguales de rango para haces de iones diferentes con igual energía por nucleón, siempre que se mantenga la razón carga-masa (M_p/Z_p^2). Cabe destacar que este hecho es también válido para electrones, con la salvedad de reemplazar la razón carga-masa por $1,27M_e/Z_e^2$, para energías bajas de electrones.

8.5.. Consideraciones dosimétricas para haces de iones pesados

La conversión, basada en modelos a primer orden, en dosis efectiva D_{ef} , a partir la fluencia puede calcularse a partir de la dosis absorbida por unidad de fluencia en cada órgano o tejido (D_T), utilizando los correspondientes factores de conversión y los valores de los parámetros w_T y w_R según definiciones del ICRP³⁸:

$$D_{ef} = \sum_T w_T H_T = w_R \sum_T w_T D_T \quad (300)$$

donde H_T es la dosis equivalente en el órgano o tejido T , por unidad de fluencia. Los valores numéricos para w_R para haces de iones es alrededor de 20.

Puede también introducirse una distinción según los factores de calidad ($Q(L)$ y $Q(y)$) del haz de iones, de acuerdo con el LET de la radiación y las definiciones del ICRP, resulta entonces:

$$H_{T,j} = D_T \int_L Q(L) d_T DL \quad j = T, y \quad (301)$$

³⁸Publicación 103

y las densidades de probabilidad para la dosis absorbida en un órgano o tejido $d_T(L)$ y $d_T(y)$ satisfacen:

$$\int_0^{\infty} d_T(j) dj = 1 \quad j = L, y \quad (302)$$

Así los factores de conversión, basados en los parámetros de calidad del haz de iones, resultan:

$$H_{T,j} = \sum_T w_T H_{T,j} \quad j = L, y \quad (303)$$

Finalmente, los factores medios de calidad promediados para el cuerpo humano (*human-body-averaged mean quality factors*) $q_{D_{ef},j}$, se obtienen de:

$$q_{D_{ef},j} = \frac{H_{D_{ef},j}}{\sum_T D_T} \quad j = L, y \quad (304)$$

La figura 40 muestra algunos resultados obtenidos, por simulación, para la dosis absorbida por unidad de fluencia.

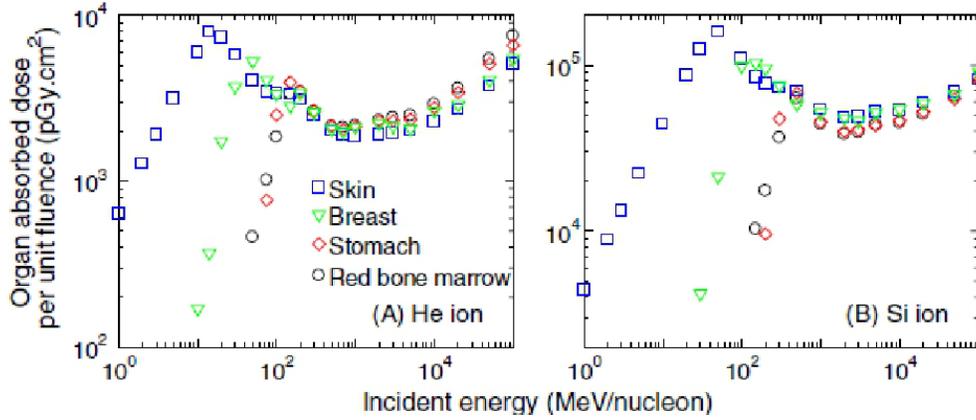


Figura 40. Dosis absorbida en órganos por unidad de fluencia.

La figura 41 muestra algunos resultados obtenidos, por simulación, para la dosis efectiva por unidad de fluencia.

8.6.. Efecto densidad en el transporte de partículas cargadas

Esta sección es un breve resumen de los resultados mas relevantes obtenidos en estudios muy completos y complejos realizados a mediados del siglo pasado³⁹.

El cambio (reducción) en la pérdida de energía debido a la consideración de la densidad del material que está siendo irradiado, está dado por:

$$\Delta \frac{dE}{dx} = \frac{2\pi N q_e^2}{m_e v^2} \left[\sum_i f_i \ln \left(\frac{(v_i^2 + l^2)/v_i^2}{v_i^2} \right) - l^2 (1 - \beta^2) \right] \quad (305)$$

³⁹Véase, por ejemplo, Sternheimer. The density effect for the ionization loss in various materials, Phys. Rev. 1952.

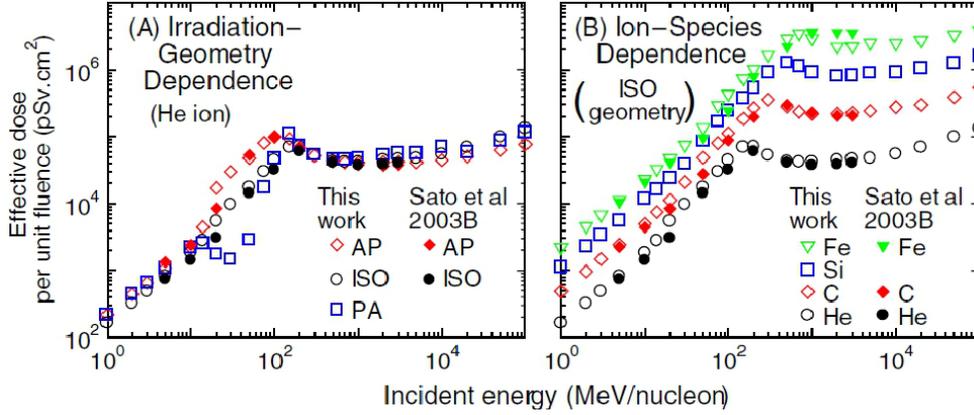


Figura 41. Dosis efectiva por unidad de fluencia.

donde N es el número de electrones por unidad de volumen (cm^3), $\beta = v/c$, f_i es la amplitud del oscilador de la i -ésima transición, cuya frecuencia es ν_i y l es la solución de:

$$\beta^{-2} - 1 = \sum_i \frac{f_i}{\nu_i^2 + l^2} \quad (306)$$

y las frecuencias ν_i pueden escribirse en término de la frecuencia de plasma del medio (ν_{pl}), dada por:

$$\nu_{pl} \equiv \sqrt{\frac{Nq_e^2}{m_e\pi}} \quad (307)$$

La ecuación de Bethe-Bloch, para el *stopping power* para electrones es:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi Nq_e^2}{m_e v^2} \left[\ln \left(\frac{2m_e v^2}{I(1-\beta)} \right) - \beta^2 \right] \quad (308)$$

Según la teoría de Bloch, la energía media de ionización/excitación I es proporcional a Z , obteniéndose⁴⁰ $I \approx 9,4ZeV$. Para valores de Z bajos, I es algo mayor a los valores predichos por este modelo.

Incorporando las correcciones sobre consideraciones de la densidad del medio irradiado, se obtiene la ecuación de Bethe-Bloch modificada:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{2\pi Nq_e^2}{m_e v^2} \left[\ln \left(\frac{m_e v^2 T}{(h\nu_m)^2 (1-\beta)} \right) + 1 - \beta^2 - \delta \right] \quad (309)$$

donde T es el máximo de transferencia de energía y, para cualquier partícula de masa m y energía E , está dado por:

$$T \equiv \frac{E^2 - m^2 c^4}{mc^2 \left(\frac{m}{2m_e} + \frac{m_e}{2m} + \frac{E}{mc^2} \right)} \quad (310)$$

⁴⁰para $Z > 26$

donde δ es la corrección por densidad que puede modelarse de acuerdo con la aproximación que se utilice. Para realizar cálculos de *stopping power* teniendo en cuenta los efectos de densidad, puede utilizarse la siguiente expresión:

$$\frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx} = \frac{A}{\beta^2} \left[B + 2 \ln\left(\frac{P}{mc}\right) + \ln(T') + 1 - \beta^2 - \delta \right] \quad (311)$$

donde:

$$A \equiv \frac{2\pi N q_e^2}{m_e c^2 \rho}$$

y

$$B \equiv \ln \left[\frac{m_e c^2 [\text{MeV}]}{(h\nu_m)^2} \right]$$

T' es la energía transferida en MeV, ν_m se define de: $\ln(\nu_m = \sum_i f_i \ln(\nu_i))$ y la corrección por densidad δ se expresa como:

$$\delta = \sum_i f_i \ln \left[\frac{(\nu_i^2 + l^2)}{\nu_i^2} \right] - l^2 (1 - \beta^2) \quad (312)$$

la figura 42 muestra el comportamiento de la corrección por densidad en función del cociente momento-masa.

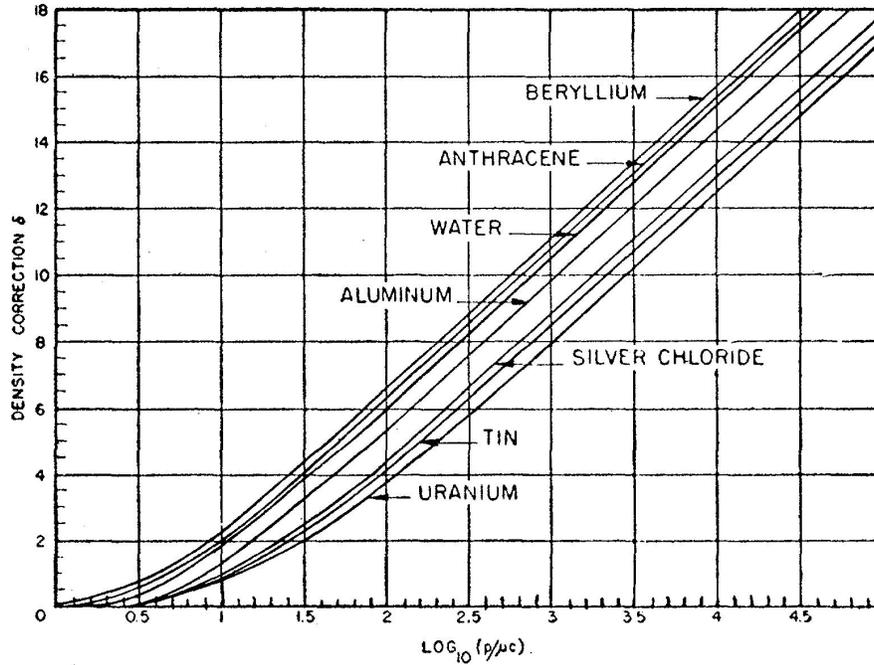


Figura 42. Corrección por densidad en función de la razón momento/masa.

8.7.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo VIII

8.7.1.. Interacción de iones con material biológico y detección de radiaciones

Ejercicio 8.1:

Ejercicio 8.2:

Ejercicio 8.3:

9.. Pérdida-depósito de energía en terapia con iones pesados

En capítulo 9. desarrolla los aspectos principales sobre las funciones de pérdida de energía para protones e iones, principalmente de carbono y sin incluir la fragmentación, utilizando métodos que calculan por convoluciones. Se presentan los efectos a escala macroscópica y microscópica, y los principales efectos estocásticos, lo que se presentan de manera diferente según la escala.

9.1.. Pérdida de energía de iones a nivel macroscópico

Esta sección representa un enfoque complementario de la teoría de las colisiones energéticas entre iones pesados y la materia, con el interés concentrado en tejidos biológicos, aplicando métodos analíticos y estocásticos. La teoría en este campo ofrece una gran cantidad de bases de datos importantes de utilidad inmediata en investigaciones recientes en áreas científicas y clínicas. La información más relevante de esta de la física de colisiones es la sección eficaz diferencial y total, el poder de frenado electrónico, los rangos y las energías medias de excitación. Todos éstos constituyen datos de entrada críticos para modelar la pérdida de energía de los iones pesados que pasan a través de la materia. La precisión en la estimación de los efectos biológicos de los iones, especialmente cerca de la posición del pico de Bragg, la que depende fuertemente de las cantidades físicas relevantes.

La teoría utilizada en este capítulo para los cálculos se basa en el método Bethe-Fano, la que provee una concordancia del 1 % o mejor con los datos experimentales y calculados existentes para energías de partículas superiores a 2-5 MeV/u para iones desde protones hasta iones de carbono. En la radioterapia, un problema importante es la determinación del efecto de la dosis de radiación sobre los tejidos irradiados. Se ha encontrado que las funciones de dosis-efecto son pronunciadas: para lograr el control del tumor entre 25% y 75%, la diferencia de dosis es de aproximadamente 20%. Por lo tanto, es razonable apuntar a incertidumbres de $\pm 2\%$ en cantidades físicas en dosimetría.

Los efectos bioológicos de la radioterapia ocurren en las células. Por lo tanto, debe estudiarse las pérdidas de energía y la deposición de energía en volúmenes microscópicos. En la radioterapia clínica, las células de interés generalmente se encuentran en lo profundo del cuerpo. Para partículas cargadas pesadas (protones: $m_0c^2 = 0,938 GeV$, iones de carbono: $m_0c^2 = 11,178 GeV$) se utilizan haces de iones para penetrar hasta estos volúmenes. Un método utilizado para la terapia es el escaneo del volumen del tumor con haces de tipo *pencil beam*.

Dado que los cálculos descritos se realizan computacionalmente, pueden ampliarse fácilmente para otras geometrías de haz, así como para geometrías de de cálculo. Las principales componentes del método son:

- Cálculo de funciones de Bragg con mayor énfasis en la generación de espectros de energía de las partículas para cada capa de material absorbente a lo largo de la trayectoria.
- Cálculo de espectros de deposición de energía detallados para dosis de terapia en el pico Bragg.
- Para los efectos biológicos, un problema importante es la estocasticidad del tipo de partículas.

Para estudiar las limitaciones de los cálculos y medidas de los procesos físicos en las células biológicas se determinan los espectros de energía específica que se imparte a los volúmenes cúbicos V_c dados por:

$$V_c = 10 \times 10 \times 10 \mu m^3 \quad (313)$$

Lo que aplica al volumen en que alcanzan partículas que inciden perpendicularmente sobre una de las superficies. Para volúmenes con diferentes geometrías, los datos derivados tendrán mayores márgenes.

9.2.. Pérdida de energía de iones a nivel macroscópico

El enfoque *clásico* basado en las teorías de pérdidas continuas de energía de Bohr, Bethe y Fano, *i.e.*, el poder de frenado, como se describe en la sección 9.2.1.. El estudio más detallado que utiliza funciones de *straggling* (rezagadas) se describe en la sección 9.2.2.. Por otro lado, el método de seguimiento de partículas individuales a lo largo de sus trayectorias con simulaciones Monte Carlo se analiza en la sección 9.2.3..

9.2.1.. Aproximación clásica del transporte continuo de partículas a través de la materia

9.2.2.. Convolución por rango de straggling

Para el transporte a través de absorbentes gruesos se puede usar un cálculo de convolución. Supóngase que se conoce el espectro de energía $\Phi(y, T)$ para $T \in [T_1, T_2]$ en una superficie plana en y , como indica la Figura 43.

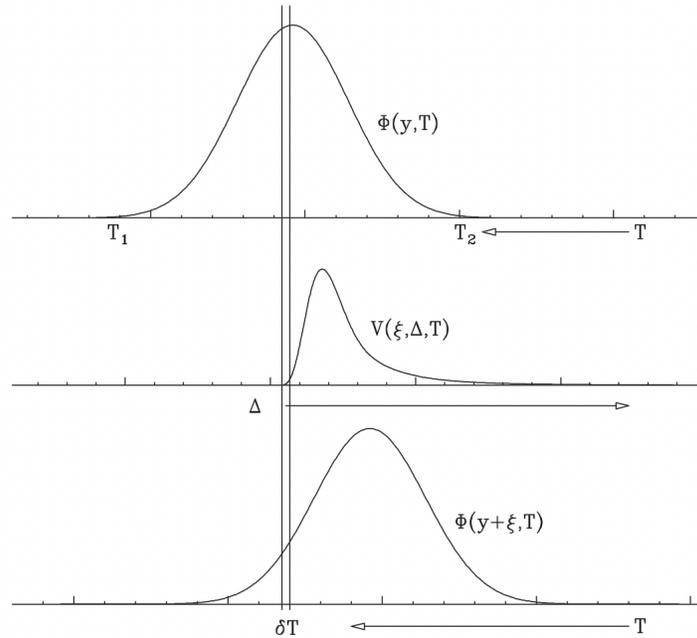


Figura 43. Esquema ilustrativo del método de convolución. El espectro de energía inicial $\Phi(y, T)$ se muestra en la parte superior. Para cada banda estrecha de energía cinética (líneas paralelas verticales) el espectro de straggling (rezagado) $V(\xi, \Delta, T + \Delta)$ se agrega sucesivamente al espectro $\Phi(y + \xi, T)$ que se muestra en la parte inferior. Fig 1.1 D. Belkic, p. 6.

Para calcular el espectro $\Phi(y + \zeta, T)$ luego del recorrido de una capa delgada *zeta*, se usan las *funciones de straggling* $V(\zeta, \Delta, T)$ para determinar la pérdida de energía de los iones con energía Δ entre T y $T + \delta T$ (donde $\delta T \ll (T_1 - T_2)$), para cada volumen contenedor de energía δT entre T_1 y T_2 . Estas pérdidas de energía se suman para producir el espectro en $y + \zeta$ para $T + \Delta$, como indica la Figura 43. Los espectros de straggling $V(\zeta, \Delta, T)$ para absorbentes delgados se calculan con los métodos que se describen a continuación y en la sección 9.2.3..

Para la descripción de muchas de las interacciones de las partículas, la velocidad de partícula $v = \beta c$ puede ser el parámetro relevante en lugar de la energía E . También se utiliza el parámetro

$\gamma \equiv \sqrt{\frac{1}{1-\beta^2}}$, donde: $m_0c^2(\gamma 1)$ es la energía cinética., Para un segmento de trayectoria ζ , como indica la Figura 43, se calcula una integral de convolución para cada intervalo de energía T , $T + \delta T$, entre $T1$ y $T2$ (s es el rango en Δ de $V(\zeta, \Delta, T + \Delta)$).

$$\Phi(y + \zeta, T) = \int_0^s \Phi(y, T + \Delta) \otimes V(\zeta, \Delta, T + \Delta) d\Delta \quad (314)$$

$$\Phi(y + \zeta, T - \Delta) = \int \Phi(y, T) \otimes V(\zeta, \Delta, T) d\Delta \quad (315)$$

Cabe remarcar que hace casi un centenio que se han desarrollado métodos analíticos para calcular el *straggling* de medios absorbentes delgados. La propuesta presentada en esta sección se basa en el método de convolución para *straggling*, el cual provee buena concordancia con mediciones y cálculos más elaborados.

9.2.3.. Abordaje Monte Carlo para el transporte de iones

Varios y diversos programas computacionales se utilizan para implementar el métodos Monte Carlo (MC) para calcular los espectros de partículas. Se necesitan cálculos que requieren mucho tiempo para obtener datos precisos para las funciones que describen las funciones de dosis en profundidad. A continuación, se proporciona un resumen del método general, cuyos detalles pueden profundizarse en literatura especializada, y ponerse en práctica en las secciones de aplicaciones del presente curso. Básicamente, en un dado sistema, las interacciones que ocurren durante el paso de las partículas (ion es pesados) a través de la materia se simulan una a la vez, colisión por colisión, e incluyen colisiones secundarias por los rayos δ producidos. Así, una partícula j viaja distancias aleatorias x_i entre colisiones sucesivas, calculadas seleccionando un número aleatorio r_r y determinando la distancia x_i a la siguiente colisión a partir del camino libre medio entre colisiones $\lambda(v) = 1/m_0(v)$ (donde se usa la velocidad de la partícula v en lugar de la energía cinética T):

$$x_i = -\lambda(v) \ln(r_r) \quad (316)$$

La pérdida de energía E_i se selecciona con un segundo número aleatorio del espectro de colisión acumulativo y este proceso se repite hasta que $\sum_i x_i$ excede la longitud del segmento x . La pérdida total de energía Δ_j de la partícula es $\Delta_j = \sum_i E_i$. Para obtener E_i de manera práctica, la función inversa $E(\Phi, \beta, y)$ de $\Phi(E, \beta, y)$ se calcula con, por ejemplo, interpolación spline cúbico. Agrupando los Δ_j se obtiene la función de *straggling* $f(\Delta)$.

9.3.. Funciones de Bragg

Una función de Bragg describe las propiedades del espectro de energía $\Phi(y, T)$ de los iones en el material absorbente en función de la penetración y en el absorbente. Los métodos propuestos se utilizan para calcular $\Phi(y, T)$ y sus propiedades en y basados en:

- fluencia de partículas
- energía media de partículas $\langle T \rangle(y)$
- pérdida media de energía $D(y)$ en una capa delgada ζ
- desviación estándar $\sigma(y)$ de $\Phi(y, T)$
- energía específica impartida z a las células en y
- número de partículas $s(y)$ que se detienen en ζ

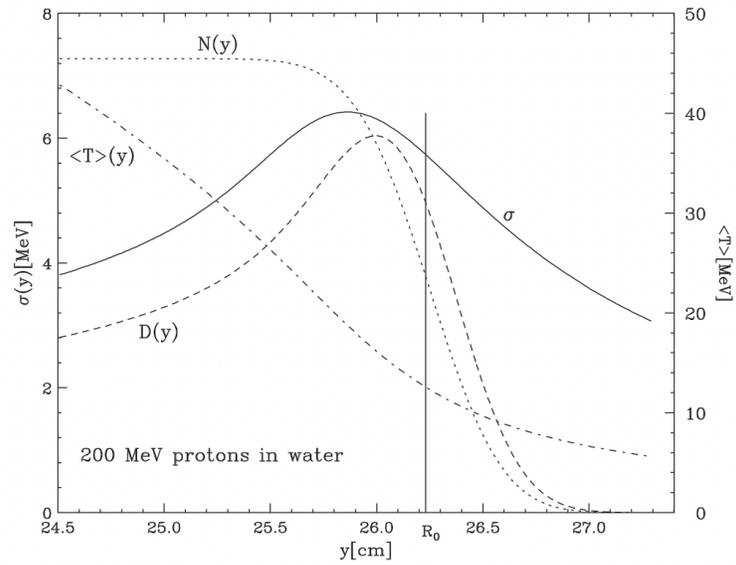


Figura 44. Funciones de Bragg para protones de 200 MeV en agua. El espesor del agua atravesada es y , la dosis es $D(y)$, el número de protones residuales es $N(y)$, la energía media del espectro $\Phi(y, T)$ es $\langle T \rangle$, y la desviación estándar de $\Phi(y, T)$ es $\sigma(y)$. Fig 1.2 D. Belkic, p. 9.

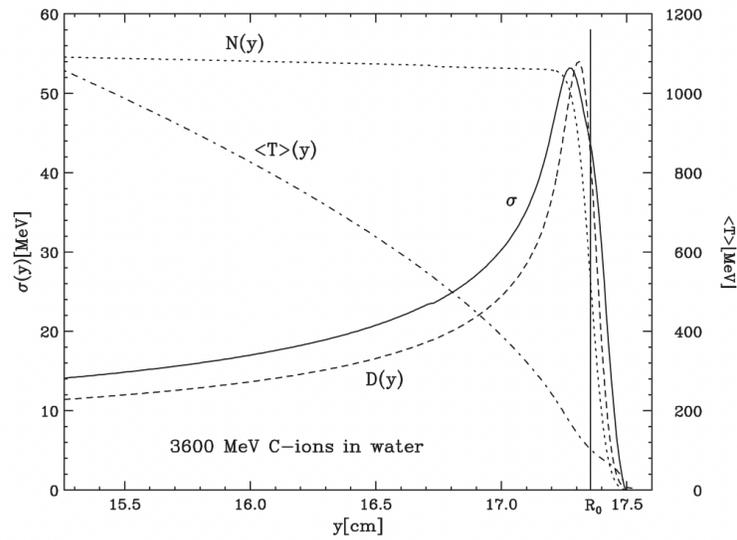


Figura 45. Funciones de Bragg para iones C de 3600 MeV en agua. El espesor del agua atravesada es y , el número de iones residuales es $N(y)$. Fig 1.5 D. Belkic, p. 13.

as funciones de Bragg que se muestran en las Figuras 44 y 45 han sido calculadas con el método de convolución. En la mayoría de las publicaciones sobre funciones de Bragg, la única función que se muestra, normalmente es $D(y)$.

Las cantidades definidas anteriormente se calculan de la siguiente manera usando el método se muestra en la Figura 43:

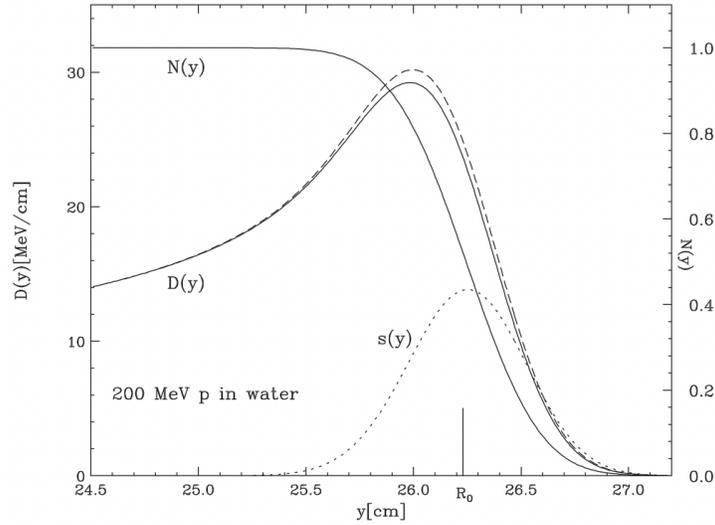


Figura 46. Funciones de Bragg adicionales para protones de 200 MeV en agua. El espesor del agua atravesada es y , el número de protones residuales es $N(y)$ y la función de distancia de straggling es $s(y)$. Su FWHM es $w = 6,4mm$. Se presentan dos funciones de dosis: la línea discontinua es $D(y)$, la línea continua da la energía depositada $D_d(y)$, en cada segmento ζ . El número de iones que se detienen dentro de ζ en R_0 es $\sim 0,2\%$. Fig 1.5 D. Belkic, p. 11.

$$N(\gamma) = \int \Phi(\gamma, T) dT \quad (317)$$

En cada intervalo de seguimiento ζ , el número $N(y)$ se reduce por el número de iones que alcanzan $T = 0$, como lo indica $s(y)$ en la Figura 46. La dosis específica $D_s(y)$ en y se expresa en términos de un promedio del *stopping power*:

$$D_s(\gamma) = \int \Phi(\gamma, T) S(T) dT \quad (318)$$

donde $S(T)$ es el *stopping power* para la energía del ión T . La energía a media del ión en y se obtiene de:

$$\langle T \rangle(\gamma) = \int \Phi(\gamma, T) T dT \quad (319)$$

Como se sabe, existe diferencias entre $D_s(y)$ y $S(\langle T \rangle(y))$, y la varianza σ^2 de la distribución de pérdidas de energía en y se calcula según:

$$\sigma^2(\gamma) = \int \Phi(\gamma, T) [T - \langle T \rangle]^2 dT \quad (320)$$

9.4. Pérdida de energía de iones a nivel microscópico

Para evaluar las limitaciones de los cálculos y medidas exploramos los espectros de energía específica z impartida, a volúmenes cúbicos ($V_c = 10 \times 10 \times 10 \mu m^3$), expresión 313, donde z es una cantidad estocástica y la determinación de sus valores y variaciones locales es un objetivo principal de este estudio. Dado que la variación estocástica de la fluencia de partículas es mayor para los iones C, considerando principalmente haces de iones C con energía cinética $T = 3600 MeV$ (o 300 MeV/u). Además, restringiendo al hecho que el material absorbente sea agua, se consideran tres tipos de interacciones de los iones:

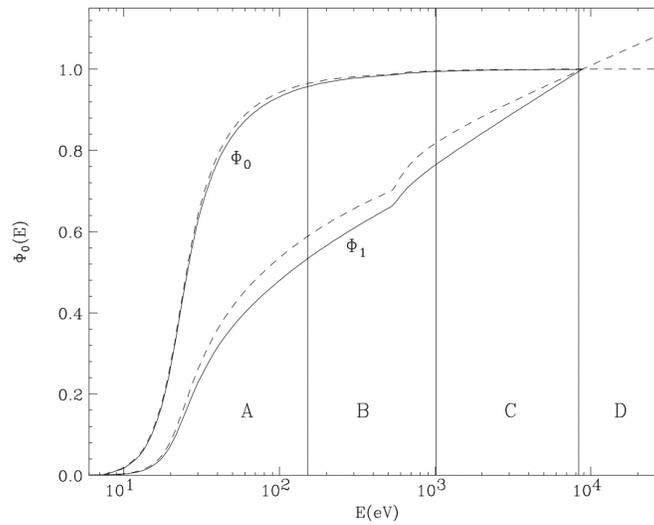


Figura 48. Secciones eficaces acumulativas de colisión $\Phi(E, v)$ de iones C en agua para dos energías diferentes. Fig B.4 D. Belkic, p. 31

Ejemplo

Considérese un volumen homogéneo de agua, subdividido en capas espesor $\zeta = 1$.

En base a los datos de la Tabla en la Figura 49 se procede a la estimación del transporte y dosimétrica:

cyl.	Eu	r	Vu	Φ_0	Φ_1	z
A	152	3	$3 \cdot 10^4$	2160	68.5	365000
B	1012	35	$4 \cdot 10^6$	78	28.6	1100
C	8371	1000	$4 \cdot 10^9$	11	26.6	1
D	28000	15000	$7 \cdot 10^{11}$	1	14.0	0.003

Figura 49. Datos para la deposición de energía alrededor del *track* de un ión C de 150 MeV, atravesando $\zeta = 1$ de agua, z (Gy) representa la energía específica dentro de cada subvolumen cilíndrico. Datos: D. Belkic.

La pérdida total de energía del ión por los rayos delta que se detienen en un cilindro es Φ_1 keV. Se da la deposición de energía por un ión C, mientras que las sumas son $\Phi_0 = 2250$ colisiones primarias/ μm , $\Phi_1 = 137$. La pérdida de energía total es de $3 \text{ keV}/\mu\text{m}$ y la pérdida de energía promedio por colisión es $\langle E \rangle = 61 \text{ eV}$. Nótese que, en promedio, un sólo rayo delta se lleva el 10% de la pérdida de energía en volumen.

9.5.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo IX

9.5.1.. Pérdida de energía y micro- y macro-dosimetría

Ejercicio 9.1: Estimar la deposición de energía en agua por parte de la componente primaria de un haz de protones de 100 MeV, utilizando un paso (ζ) de 0.1 mm y de 0.001 mm. Analizar y discutir los resultados.

Ejercicio 9.2: Utilizar el método de convolución con *kernels* tipo pencil beam obtenidos por simulación Monte Carlo, para un haz $1 \times 1 \text{ cm}^2$ de protones de 150 MeV irradiando la zona central de un fantoma cúbico de agua de 30 cm de lado conteniendo un cubo concéntrico de 5 cm de lado de hueso compacto en su interior.

Ejercicio 9.3: Realizar modelos de simulación Monte Carlo para comparar los resultados obtenidos en los ítems precedentes 9.1 y 9.2. Analizar y discutir los resultados.

10.. Detectores de radiación y sistemas de conteo

Se trata sobre los detectores de radiación que son comúnmente utilizados en el ámbito de la física médica, sea para dosimetría, radioprotección o técnicas de diagnóstico por imágenes. En general, los métodos de detección de radiación se basan tanto en los procesos de ionización como excitación que se producen por el paso de la radiación incidente en los materiales que constituyen los dispositivos detectores de radiación. Si bien la cantidad y variedad de detectores existentes es extremadamente amplia, un estudio pormenorizado está fuera de los objetivos de este curso. Se concentrará la atención sólo en las características principales de los detectores típicamente empleados para aplicaciones médicas.

10.1.. Detectores gaseosos

Los detectores gaseosos forman parte de una categoría especial de detectores denominada *detectores de ionización*. Este tipo de dispositivos responden a la radiación por medio de corrientes inducidas por ionización, tal como se esquematiza en la figura 50.

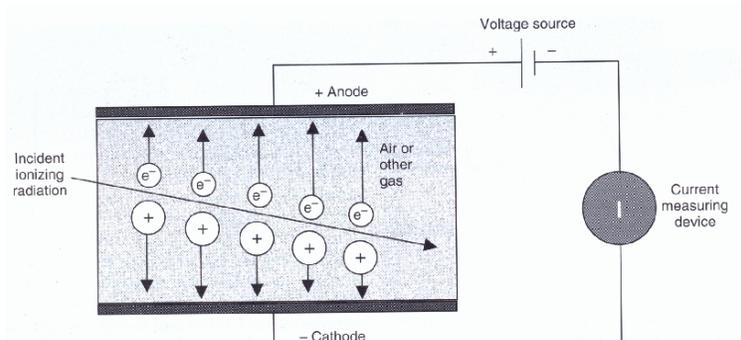


Figura 50. Figura esquemática de detectores gaseosos. Las cargas eléctricas producidas por el paso de la radiación ionizante se colecta en los electrodos. fig 7.1 Cherry, p. 90

La radiación interactúa con el volumen de gas contenido entre los electrodos, que sirven a mantener una diferencia de potencial (y por lo tanto un campo eléctrico) fijo entre ellos. En general, los electrodos pueden ser rectos o curvos, por ejemplo cilindros concéntricos. En condiciones normales, el gas se comporta como un aislante y no hay corriente eléctrica entre los electrodos. Sin embargo, el paso de radiación ionizante atravesando el volumen de gas produce ionizaciones⁴¹. Los electrones y los iones positivos producidos en el gas son atraídos hacia el ánodo y cátodo, respectivamente, provocando momentáneamente el flujo de una corriente eléctrica.

Existen diferentes tipos de detectores gaseosos, entre ellos se destacan la cámara de ionización, el contador proporcional y los contadores de tipo Geiger-Müller. La figura ?? muestra el régimen de funcionamiento, en función de la respuesta, para cada uno de los diferentes tipos de detectores. Este tipo de detectores fue, y a veces es aún actualmente, empleado frecuentemente en radioterapia, radioprotección y radiodiagnóstico. Aunque debe mencionarse que en el caso específico de la medicina nuclear, el uso de estos detectores se ve limitado, principalmente debido al *stopping power* y baja eficiencia de conteo.

Cámara de ionización

En las cámaras de ionización el gas es generalmente aire, aunque existen algunos modelos con otros gases. La cámara puede ser sellada herméticamente de la atmósfera o no. Se han utilizado

⁴¹Directas o indirectas por medio de los electrones (rayos δ) secundarios.

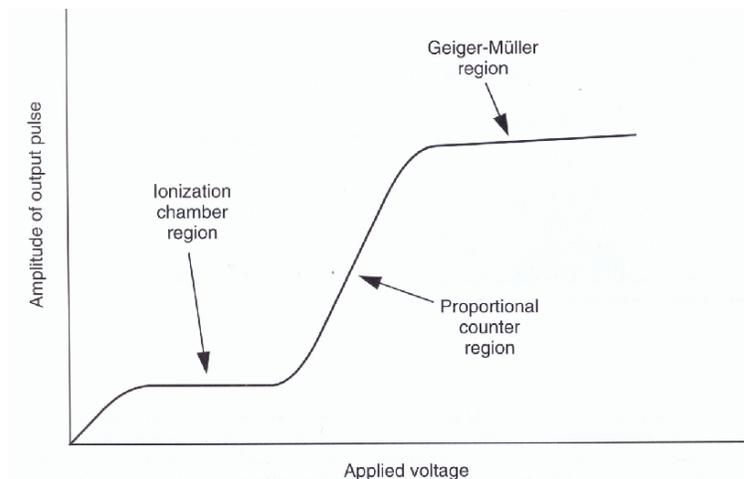


Figura 51. Curva de respuesta al voltaje aplicado para cada detector gaseoso. fig 7.9 Cherry, p. 96

muchos diseños diferentes para los electrodos, aunque el mas común es un alambre central dentro de un cilindro, o bien un par de cilindros concéntricos.

Para maximizar la eficiencia de operación el voltaje aplicado entre los electrodos debe ser suficientemente alto para lograr coleccionar los iones generados dentro de la cámara. Cuando esto ocurre, se alcanza el voltaje de saturación V_s , a partir del cual es posible utilizar el instrumento con buena eficiencia; típicamente $V_s \approx 50 - 300V$, dependiendo del diseño de la cámara.

La carga eléctrica neta W producida en una cámara de ionización debido a un único evento de ionización resulta ser extremadamente pequeña⁴². Debido a la cantidad tan baja de carga generada, las cámaras de ionización no contabilizan eventos (ionizaciones) individuales, sino que determinan la corriente total que se genera mientras el haz de radiación incide sobre la cámara.

Contadores proporcionales

En el caso de la cámara de ionización, el voltaje aplicado resulta ser aquel suficiente para coleccionar solo las cargas liberadas por acción directa de la radiación incidente. Sin embargo, si se aumenta aún mas el voltaje aplicado, los iones atraídos ganan tanta energía que podrían generar ionizaciones adicionales durante el recorrido hacia los electrodos, y los electrones producidos por estas ionizaciones pueden, a su vez, generar otros, constituyendo un efecto en cascada, lo que se conoce como *efecto de amplificación de la carga por el gas*. El factor por el cual la ionización original es “multiplicada” se denomina *factor de amplificación del gas*. El valor de este factor aumenta rápidamente al aumentar el voltaje aplicado y puede llegar a valores cercanos a 10^6 . Los detectores que operan en este régimen se conocen como contadores proporcionales, y la carga neta puede obtenerse de $Q = W * f$, donde f es el factor de amplificación del gas, por lo tanto la carga total producida resulta proporcional a la energía depositada por la radiación ionizante incidente. En general, los contadores proporcionales utilizan gases que permiten la migración de los iones producidos con muy alta eficiencia, como los gases nobles, entre los cuales Ar y Xe son los mas comúnmente empleados.

Detectores Geiger-Müller

Los detectores Geiger-Müller son detectores gaseosos diseñados para obtener la máxima amplificación posible, como se muestra en la figura ??.

⁴²Para el caso del aire, alrededor de 34eV. Por ejemplo, partículas β de 1MeV producen alrededor de $10^6/34$ ionizaciones que generan una carga neta del orden de $10^{-15} C$.

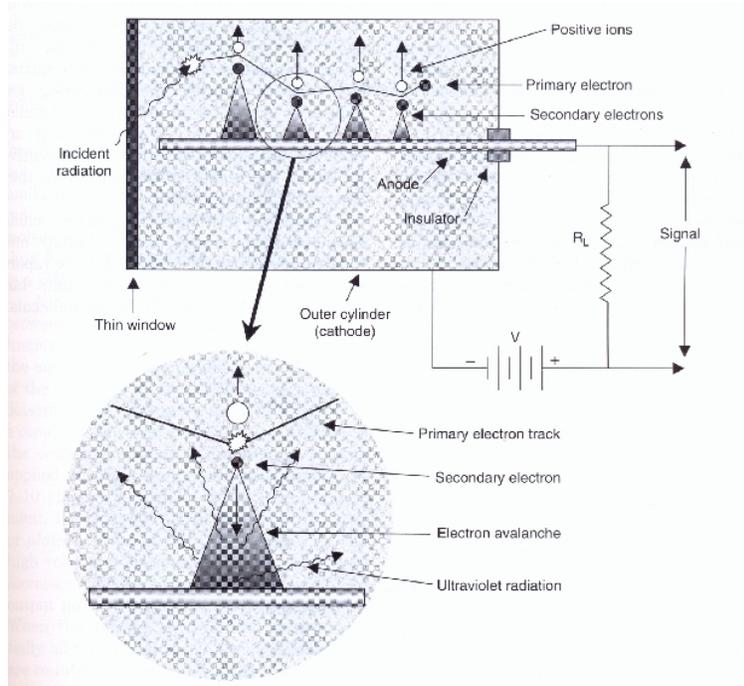


Figura 52. Detector Geiger-Müller. fig 7.8 Cherry, p. 95

El ánodo central es mantenido a muy alto potencial en relación al cilindro exterior (cátodo). Al producirse ionizaciones dentro de la cavidad de gas por interacción de la radiación incidente, los electrones son acelerados hacia el ánodo central y los iones positivos al cátodo exterior. En este proceso ocurre la amplificación del gas. Pero, debido a que el voltaje aplicado es tan alto, los electrones colectados pueden causar excitaciones de las moléculas del gas. Estas moléculas se desexcitan rápidamente ($\approx 10^{-9}$ s) emitiendo fotones visibles o UV. Si alguno de estos fotones UV interactúa con el gas o en el cátodo, puede ocurrir fotoabsorción, lo cual genera otro electrón para contribuir en el efecto cascada.

10.2.. Detectores a base de semiconductores

Los detectores semiconductores son, esencialmente, análogos a los detectores gaseosos. Sin embargo, los materiales sólidos de los semiconductores ofrecen importantes ventajas comparativas, ya que cuentan con densidad muy superior a la de los gases⁴³. Por lo tanto, presenta valores mucho mas altos para el *stopping power*, resultando materiales mucho mas eficientes para la detección de radiación.

Los semiconductores son, en general, pobres conductores de corriente eléctrica, sin embargo cuando están ionizados por acción de la radiación incidente, por ejemplo, la carga eléctrica producida puede colectarse por medio de la aplicación de un voltaje externo. Los materiales mas comunes para construir detectores semiconductores son silicio y germanio, aunque más recientemente se está estableciendo también el telurio de cadmio. Para estos materiales, una ionización ocurre cada 3 a 5 eV de energía absorbida de la radiación incidente, aproximadamente, lo cual constituye otra importante ventaja comparativa respecto de los detectores gaseosos. Además, el tamaño de la señal

⁴³entre 2 y 5 mil veces mayor, aproximadamente. Por ejemplo: $\rho_{Si(Li)} = 2,33gcm^{-3}$, $\rho_{Ge(Li)} = 5,32gcm^{-3}$, $\rho_{Cd(Te)} = 6,06gcm^{-3}$ y $\rho_{Aire} = 0,001297gcm^{-3}$

eléctrica detectada está relacionado proporcionalmente con la energía absorbida, y por ello pueden ser utilizados para discriminar en energía.

Algunas desventajas o inconvenientes de estos dispositivos son: generan corrientes no despreciables a temperatura ambiente, lo cual genera un ruido tipo *background* en la señal medida, y por tanto deben ser operados a bajas temperaturas. Otro inconveniente es la presencia de impurezas en la matriz del material, lo cual arruina la configuración cristalina pura, estas impurezas crean “trampas” electrónicas que pueden atrapar electrones generados en ionizaciones, evitando que sean colectados por los electrodos. Este efecto puede resultar en una apreciable disminución en la señal eléctrica medida y limita el espesor práctico del material sensible a tamaños no mayores a 1cm, aproximadamente. Y, debido al bajo número atómico de Si y Ge, este hecho limita la posibilidad de emplearlos para detectar rayos γ de alta energía. La figura 53 muestra un esquema de un detector semiconductor típico.

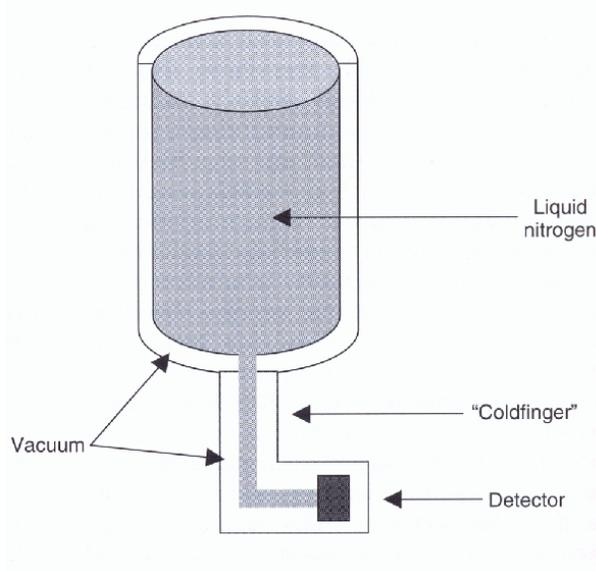


Figura 53. Detector semiconductor típico. fig 7.12 Cherry, p. 100

10.3.. Centelladores

El paso de la radiación ionizante a través de los materiales genera ionizaciones y/o excitaciones. En el caso particular en que las especies producidas (ionizadas o excitadas) sufran procesos de recombinación, se obtiene como resultado la liberación de energía. En general, la mayor parte de esta energía es disipada en el medio como energía térmica, por medio de vibraciones moleculares en el caso de gases y líquidos o vibraciones de red en el caso de sólidos cristalinos. Sin embargo, existen materiales en los que parte de esta energía es transferida a emisión de luz visible. Estos materiales particulares se denominan centelladores y los detectores de radiación que los utilizan son llamados detectores centelladores.

Los materiales mas comúnmente utilizados para detectores de aplicación en medicina son de tipo orgánico (substancias orgánicas diluidas en solución líquida) o inorgánicos (substancias inorgánicas en forma de sólido cristalino). Si bien los mecanismos precisos de centelleo son diferentes para estos dos tipos de materiales, comparten características comunes. La cantidad de luz producida como consecuencia de la interacción con un único rayo incidente (γ , β , etc.) resulta proporcional a la

energía depositada por la partícula incidente en el material centellador. La cantidad de luz neta producida es pequeña, típicamente unos pocos cientos (a lo sumo miles) de fotones por cada interacción de partícula γ incidiendo con energía de entre 70 y 511 keV.

Originalmente, se utilizaban cuartos oscuros para observar la luz emitida por este tipo de materiales⁴⁴ y contabilizar así la producción de ionizaciones. Esta metodología presenta insalvables limitaciones y fue posteriormente reemplazada por tecnologías de dispositivos electrónicos ultrasensibles a la luz, como los fotomultiplicadores.

Tubos fotomultiplicadores

Básicamente, un tubo fotomultiplicador es un dispositivo electrónico, en forma de tubo, que produce un pulso de corriente eléctrica al ser estimulado por señales muy débiles, como el centelleo producido por rayos γ o β en un detector centellador. La figura ?? ilustra el funcionamiento básico del fotomultiplicador.

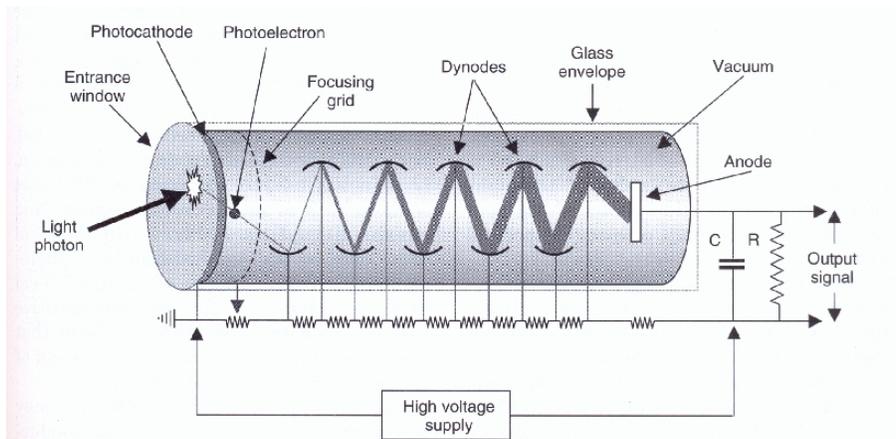


Figura 54. Tubo fotomultiplicador. fig 7.13 Cherry, p. 101

Se coloca una película de material fotoemisor en la ventana de vidrio de entrada, esta sustancia⁴⁵ eyecta electrones cuando son alcanzados por fotones visibles. La superficie de fotoemisión se denomina fotocátodo, y los electrones eyectados son fotoelectrones.

La eficiencia de conversión de luz visible en electrones liberados se denomina eficiencia cuántica, y es típicamente de entre 1 a 3 fotoelectrones por cada 10 fotones visibles que interactúan con el fotocátodo. Claramente, la eficiencia cuántica depende de la energía de la luz incidente.

Los dinodos son mantenidos a diferentes valores de potencial (creciente) para atraer a los electrones producidos, y los secundarios que éstos generan, de modo de producir el efecto de multiplicación. Este proceso se repite usualmente unas 10 veces antes de que la corriente de electrones resultante sea colectada por el ánodo. Los factores de multiplicación que se obtienen son de 3 a 6, por dinodo, resultando en un factor global típico de $\times 10^7$, aproximadamente. Los tubos fotomultiplicadores se sellan herméticamente y se mantienen en vacío; y se construyen en diferentes formas y tamaño, como se muestra en la figura ??.

Centelladores inorgánicos

Son sólidos cristalinos que centellean debido a características específicas de la estructura cristalina. Por ello, átomos o moléculas individuales de estas sustancias no centellean, se requiere el arreglo cristalino, como indica la tabla 1.

⁴⁴Por entonces típicamente centelladores de sulfuro.

⁴⁵ejemplo típico es el CsSb antimonio de cesio o materiales alcalinos.



Figura 55. Fotografía de tubos fotomultiplicador. fig 7.15 Cherry, p. 103

Propiedad	NaI(Tl)	BGO	CsI(Tl)	Plástico
Densidad [gcm^{-3}]	3.67	7.13	4.51	1.03
Z_{eff}	50	74	54	12
Producción fotones por keV	38	8	1.80	1.58
Pico de emisión [nm]	415	480	540	varios

Cuadro 1. Propiedades de algunos centelladores de uso en aplicaciones médicas.

Algunos cristales inorgánicos, como el NaI a temperaturas de N líquido, son centelladores en su estado puro, aunque la mayoría son “activados con impurezas”, y por ello los átomos de impurezas⁴⁶ en la matriz cristalina, responsables del centelleo, se denominan “centros de activación”. La figura 8.7 muestra un esquema típico de un detector a base de centellador de NaI, formando parte del sistema fotomultiplicador.

Centelladores orgánicos

A diferencia de los centelladores inorgánicos, en este caso el proceso de centelleo es una propiedad inherente de la molécula de la sustancia. El centelleo es un mecanismo de excitación molecular/desexcitación al interactuar con la radiación. Este tipo de sustancias producen centelleo en estado gaseoso, líquido o sólido, aunque se utilizan normalmente líquidos⁴⁷. En los centelladores orgánicos líquidos se disuelve el material centellador en un solvente dentro de un contenedor típicamente de vidrio o plástico y se agrega también la sustancia radioactiva a esta mezcla. Se coloca el contenedor entre un par de tubos fotomultiplicadores, como se indica en la figura 57, y de este modo se detecta la luz emitida que guarda correlación con la energía impartida por el material radioactivo.

Las soluciones de centelladores orgánicos líquidos consisten de 4 componentes:

1. Solvente orgánico, que compone la mayor parte de la solución. Debe disolver el material centellador y también la muestra radioactiva.
2. Soluto primario, que absorbe energía del solvente y emite luz. Algunos materiales centelladores típicamente utilizados son difenil-oxazol y metilestireno-benceno.

⁴⁶Indicado como el elemento entre paréntesis en la notación del compuesto.

⁴⁷Más recientemente han cobrado importancia los centelladores plástico, véase 1

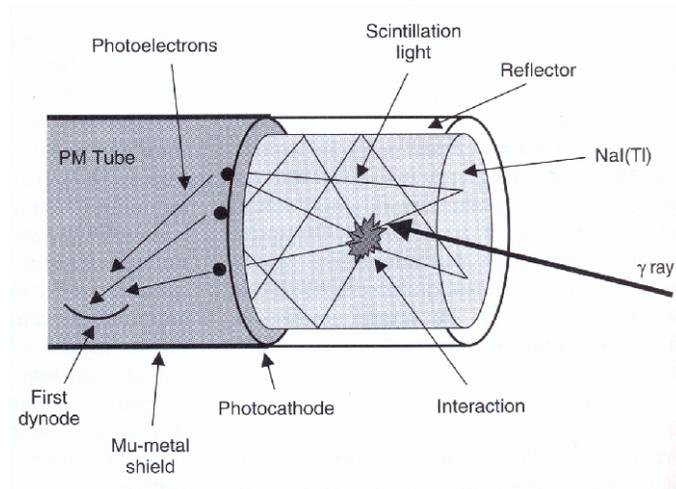


Figura 56. Esquema de fotomultiplicador y cristal centellador de NaI. fig 7.16 Cherry, p. 104

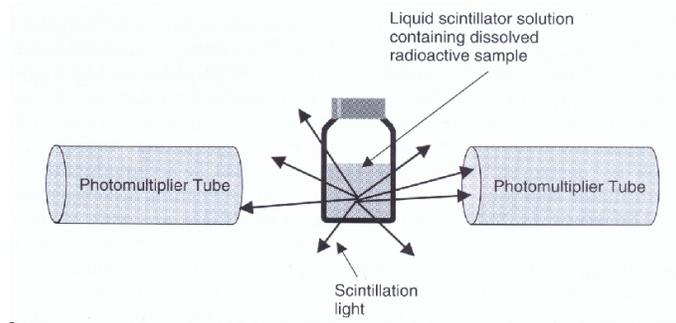


Figura 57. Setup típico detector-muestra para centelladores orgánicos líquidos. fig 7.18 Cherry, p. 107

3. A veces la emisión del soluto primario no es la más adecuada para ser detectada por los fototubos, y entonces se utiliza un soluto secundario, cuya función es absorber la emisión del soluto primario y re-emitir fotones, de mayor longitud de onda que los del soluto primario, beneficiando la detectabilidad de la luz por parte de los fototubos.
4. Frecuentemente se incorporan aditivos a la mezcla para mejorar ciertas propiedades como la eficiencia de transferencia de energía.

10.4.. Detección y conteo con detectores de estado sólido NaI(Tl) en forma de campana

El detector de NaI(Tl) en forma de campana está formado por el cristal de NaI(Tl) ahuecado en un extremo para la inserción de la muestra como se indica en la figura 58.

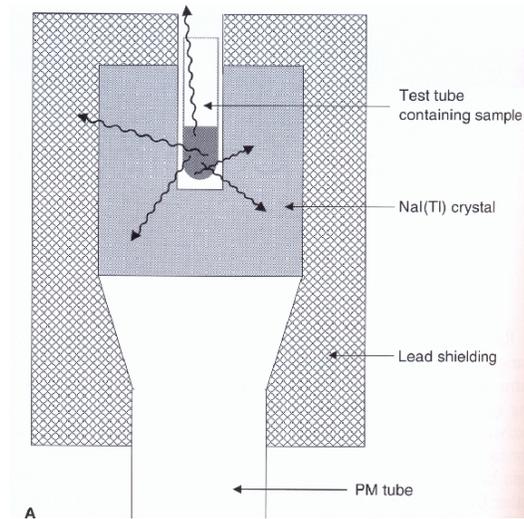


Figura 58. Setup típico detector-muestra para centelladores orgánicos líquidos. fig 12.1 Cherry, p. 186.

La transferencia de luz entre el cristal de NaI(Tl) y el fotomultiplicador resulta ser muy eficiente, aunque existen algunas pérdidas debido a la dispersión dentro del detector.

La eficiencia de detección D de un contador de NaI(Tl) en forma de campana para un amplio rango de emisores γ es muy alta, principalmente debido a que la disposición geométrica adoptada implica una eficiencia geométrica g muy buena. Entonces, la combinación con una alta eficiencia de detección y un bajo nivel de *background* en el conteo, generan un detector muy eficiente, que puede utilizarse para muestras conteniendo cantidades chicas (Bq-kBq) de actividad de emisores γ . La eficiencia geométrica g para muestra de alrededor de 1ml es del 93 %, aproximadamente.

La eficiencia intrínseca ϵ está dada por:

$$\epsilon \equiv \frac{\# \text{eventos que dan señal detect.}}{\# \text{part. interact. detec.}} \quad (321)$$

y, para detector de NaI(Tl) en forma de campana, dependen de la energía, como se muestra en la figura 59.

La eficiencia intrínseca puede utilizarse para calcular la tasa de conteo por unidad de actividad, siempre que todos los pulsos generados sean efectivamente contabilizados. Sin embargo, si sólo se contabilizan los pulsos provenientes del fotopico, debe considerarse la fracción de fotones f_p que efectivamente contribuye a la medida.

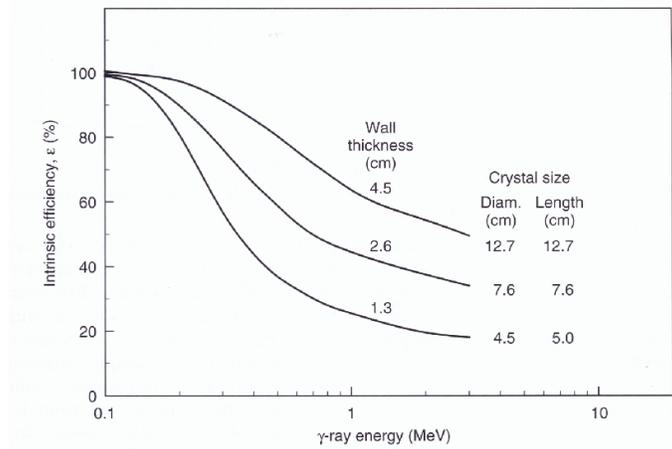


Figura 59. Eficiencia intrínseca ϵ en función de la energía para detector de NaI(Tl) en forma de campana, para diferentes espesores del cristal de NaI(Tl). fig 12.2 Cherry, p. 187.

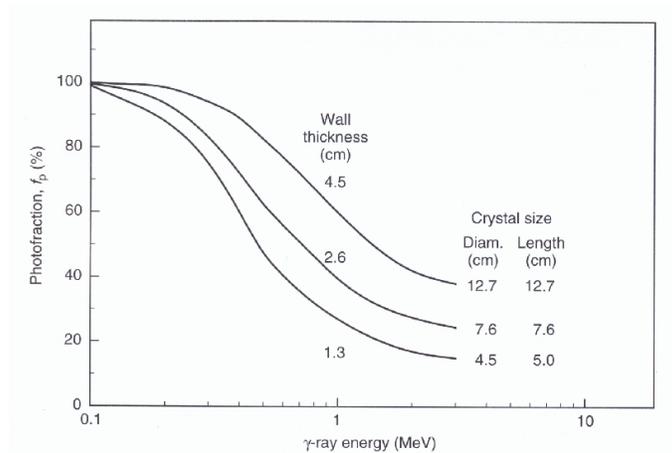


Figura 60. Fotofracción f_p en función de la energía para detector de NaI(Tl) en forma de campana. fig 12.3 Cherry, p. 188.

La fracción f_p disminuye al aumentar la energía de la emisión γ , como se indica en la figura 60. Entonces, se define la eficiencia intrínseca en el fotopico ϵ_p , dada por:

$$\epsilon_p = \epsilon \cdot f_p \quad (322)$$

y varía con la energía como se muestra en la figura 61.

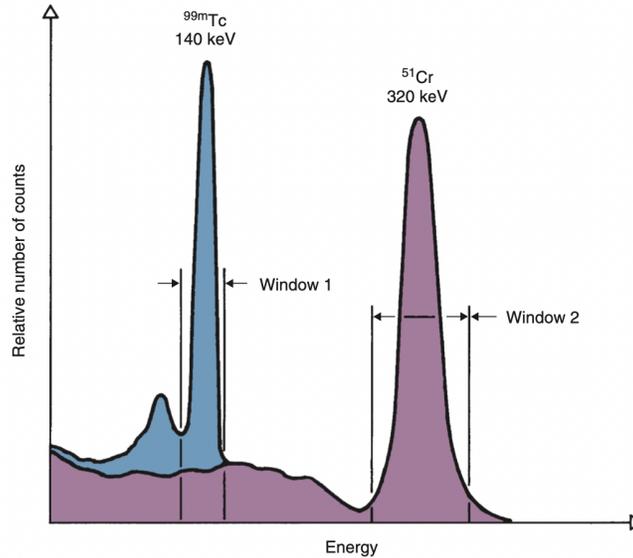


Figura 61. Eficiencia según fotopico. fig. 12.6 Cherry, p. 188.

En el caso de aplicaciones en medicina nuclear, el volumen de la muestra dentro del detector también afecta la eficiencia de detección, ya que una fracción de los rayos γ escapa del detector, dependiendo de la geometría de éste y de la posición de la muestra. Esta fracción de pérdida puede estimarse, para detectores de NaI(Tl) típicos en un 7% en la parte profunda del hoyo y de hasta un 50% cerca de la parte superior. La figura 62 muestra la variación típica de la eficiencia según el volumen de la muestra.

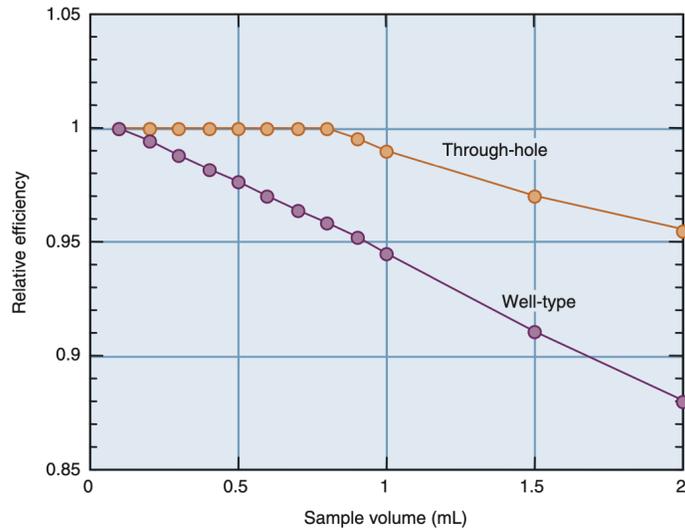


Figura 62. Tasa de conteo en función del volumen de muestra en detector de NaI(Tl) en forma de campana. fig 12.9 Cherry, p. 181.

10.5.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo X

10.5.1.. Detectores de radiación de uso médico

Ejercicio 10.1: Estimar la eficiencia relativa de un detector tipo *pozo* similar al de la Figura ??, otorgando dimensiones y propiedades representativas de detectores reales, y considerando que la muestra (de 1 ml) contiene 10 mCi de ^{99}Tc , al comparar una profundidad de pozo representativa con una de la mitad. Analizra los resultados obtenidos.

Ejercicio 10.2: Realizar un modelo simplificado de una cámara de ionización y estudiar su respuesta en condiciones de irradiación típicas del protocolo TRS-398.

Ejercicio 10.3:

11.. Procesamiento digital de imágenes de radiodiagnóstico: elementos básicos

Esta sección se dedica a las técnicas de diagnóstico por imágenes en medicina. Se introducen conceptos generales sobre los métodos de obtención y procesamiento de imágenes médicas, incluyendo criterios para establecer la calidad de las imágenes. Se focaliza el interés en técnicas de *imaging* típicas de medicina nuclear, aunque la mayor parte de los conceptos desarrollados se aplica a cualquier técnica de diagnóstico médico. Hacia el final del capítulo se describen las características principales de los métodos y algoritmos para la reconstrucción tomográfica, que resulta de particular interés para varias de las técnicas de *imaging* médico.

11.1.. Introducción: Calidad de imágenes

La *calidad de imagen* se refiere a la verosimilitud con que una imagen representa al objeto que se le practicó la imagen. En el ámbito médico, la calidad de las imágenes de las técnicas de diagnóstico se ve limitada por una serie de factores, alguno de los cuales pueden ser medidos y/o caracterizados.

En principio, existen 2 diferentes métodos para caracterizar o evaluar la calidad de una imagen. El primero se basa en las características físicas que pueden ser medidas cuantitativamente o calculadas para la imagen o conjunto de imágenes, de interés. Algunas de estas características ⁴⁸ son:

- Resolución espacial (detallada o borrosa).
- Contraste (diferencia en intensidades entre regiones dentro de la imagen).
- Ruido (ruido estadístico debido a fluctuaciones aleatorias o artefactos creados por el sistema de *imaging*).

Si bien cada uno de estos factores describen aspectos diferentes sobre la calidad de la imagen, de hecho no pueden ser tratados como parámetros absolutamente independientes uno de otro⁴⁹.

El segundo método para caracterizar y evaluar la calidad de una imagen se basa en estudios de *performance* por parte de observadores (*observer performance study*), utilizando imágenes obtenidas por medio de diferentes sistemas de *imaging* o bajo diferentes condiciones. Si bien este método puede ser objetivo, las relaciones entre los factores que afectan la imagen no resultan estar bien establecidas, debido a la complejidad del sistema humano de visión, pensamiento y experiencia.

11.2.. Resolución espacial, contraste y ruido

La resolución espacial se refiere al grado con que se describen los detalles en la imagen, puede ser borroso o detallista. También se utiliza el concepto aplicado a la capacidad del instrumento de *imaging* para proveer esa calidad en los detalles. En el caso particular de las técnicas de *imaging* de medicina nuclear, la resolución espacial resulta ser menor a la correspondiente a las técnicas anatómicas como fotografías o imágenes por radiografías. Varios factores influyen para el deterioro de la resolución espacial:

- Resolución de colimación. Es, tal vez, el principal factor limitante para la calidad en resolución espacial de las imágenes en medicina nuclear. Debido a que el diámetro de los huecos de los colimadores, debe ser relativamente grande para obtener eficiencia de colimación acep-

⁴⁸típicamente utilizadas en técnicas de *imaging* en medicina nuclear.

⁴⁹Mejorías en uno de estos factores, generalmente afecta a los demás, generando un deterioro. Por ejemplo, el aumento en la resolución que se logra incorporando colimadores genera una disminución en la eficiencia de colimación, afectando la tasa de conteo y, por lo tanto, aumentando el ruido estadístico.

table, se produce un efecto de *blurring* (difusión o borrosidad) en la imagen⁵⁰. La resolución de colimación también depende de la distancia fuente-detector.

- Resolución intrínseca. Depende de las características específicas del sistema de detección. En el caso particular de las cámaras de Anger⁵¹ la limitación principal se debe a la detección de los fotones visibles en los tubos fotomultiplicadores. La resolución intrínseca es una función de la energía del rayo γ , generalmente siendo más pobre para energías bajas, como se indica en las figuras 63 y 64

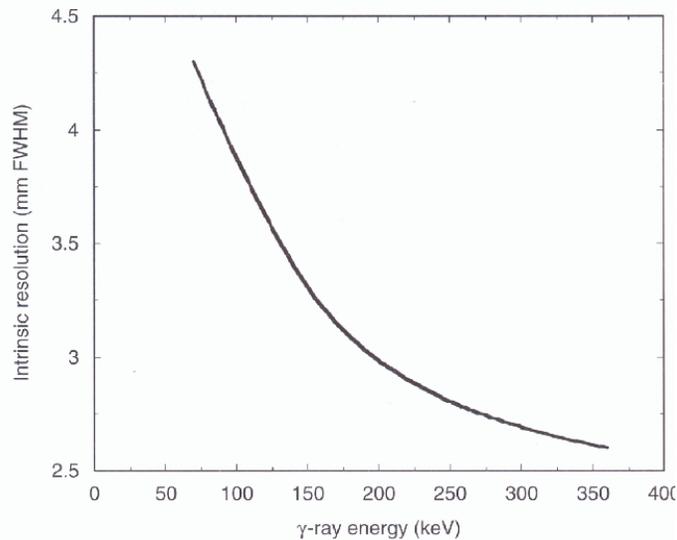


Figura 63. Resolución espacial intrínseca típica para una cámara Gamma en función de la energía del rayo γ , para un detector de NaI(Tl) de 6.3mm de espesor. fig 14.1 Cherry, p. 228.

Para el caso particular de sistemas de detección basados en elementos de detección discretos, como el caso de PET, las dimensiones de los detectores individuales determinan la resolución espacial intrínseca.

- Movimiento de paciente. La borrosidad en la imagen también está afectada por el movimiento del paciente durante la realización de la imagen. La figura 65 muestra imágenes obtenidas de un fantoma⁵² con y sin movimiento.

Los movimientos respiratorios y cardíaco pueden ser especialmente problemáticos debido al tiempo, relativamente largo, de adquisición.

- Efecto de pixelamiento. La mayoría de las técnicas actuales de *imaging* médico incorporan computadores para facilitar la gestión y procesamiento de datos, incluyendo varios métodos de corrección de imágenes. Los datos son adquiridos en una matriz discreta de localizaciones, o pixels, lo cual genera el efecto de *pixelamiento* en la imagen. Las dimensiones de los pixels discretos imponen un límite para la resolución espacial de la imagen. En general, es aconsejable contar con al menos 2 pixels por FWHM (*Full Width at Half Maximum*) para evitar o minimizar la creación del efecto de pixelamiento⁵³.

⁵⁰ Este efecto de *blurring* es, al menos, de las dimensiones del hueco de colimación.

⁵¹ cámara Gamma.

⁵² de cerebro

⁵³ y posible pérdida de detalle en la imagen.

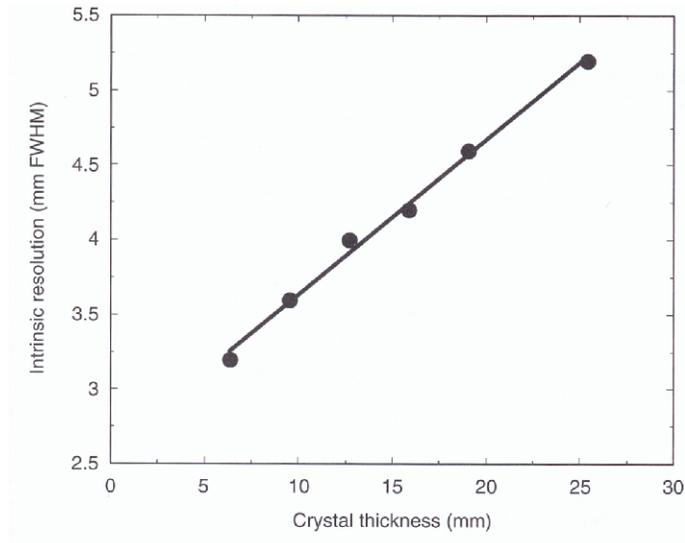


Figura 64. Resolución espacial intrínseca típica para una cámara Gamma a 140keV en función del espesor del cristal de NaI(Tl) del detector. fig 14.2 Cherry, p. 229

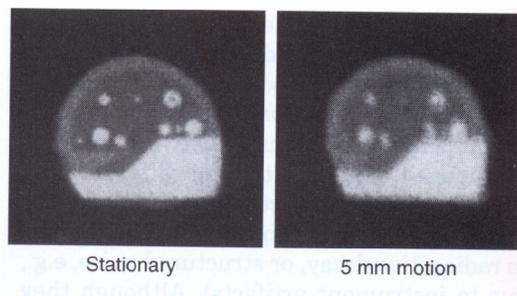


Figura 65. Imágenes de fantoma obtenidas con y sin movimiento. fig 15.1 Cherry, p. 254.

- Influencia del sistema de visualización o registro. La resolución espacial puede afectarse también por la manera en que se visualiza o registra la imagen por medio del sistema disponible. por ejemplo, la imagen visualizada podría verse borrosa debido al uso de un spot muy intenso. En general, films de un único tipo emulsión producen imágenes más puntiagudas que las obtenidas por medio films duales.

Métodos para evaluar la resolución espacial

Pueden emplearse métodos objetivos o subjetivos. Una evaluación subjetiva puede realizarse a través de inspección visual por parte de observador calificado. Sin embargo, debido a la naturaleza subjetiva del método, diferentes observadores podrían dar evaluaciones e interpretaciones diferentes sobre la calidad comparativa de imágenes.

Para chequeos cuantitativos de la resolución espacial pueden emplearse diferentes tipos de fantomas, como se muestra en la figura 66.

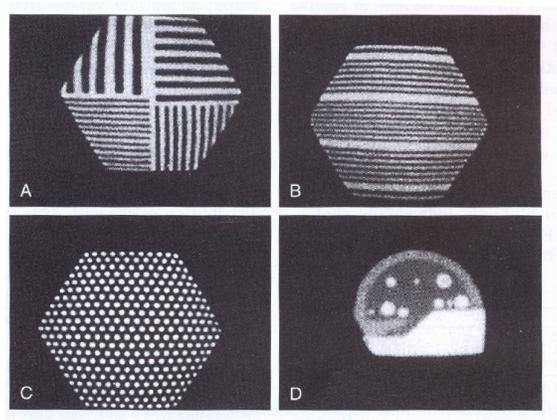


Figura 66. Fantomas para evaluar objetivamente la resolución espacial. fig 15.2 Cherry, p. 255.

Los fantomas de barras se construyen con tiras metálicas o de plomo incrustadas en un contenedor plástico. De este modo se configuran patrones geométricos que sirven para chequear la resolución espacial. Para evaluar la resolución con un sistema de colimación se coloca el fantoma directamente delante del detector con el sistema de colimación y se irradia con una fuente puntual colocada a varios metros de distancia. La resolución espacial se expresa en términos de la menor barra que puede verse en la imagen. Existe, por tanto un poco de subjetividad en esta evaluación.

Un método aún más apropiado para una evaluación cuantitativa está basado en la función de ensanchamiento de punto (PSF *Point-Spread Function*⁵⁴) o la función de ensanchamiento de línea (LSF *Line-Spread Function*). A continuación se muestran ejemplos típicos de LSF para SPECT (figura 67) y PET (figura 68).

En general, para un sistema con n factores o componentes que contribuyen, independientemente, al *blurring* de la imagen, cada uno afectando por medio del un $FWHM$ propio ya caracterizado, puede determinarse el $FWHM_{sis}$ global del sistema por medio de:

$$FWHM_{sis} \equiv \sqrt{\sum_{j=1}^n FWHM_j^2} \quad (323)$$

⁵⁴Definida como el perfil de intensidad a lo largo de la posición del hole de colimación.

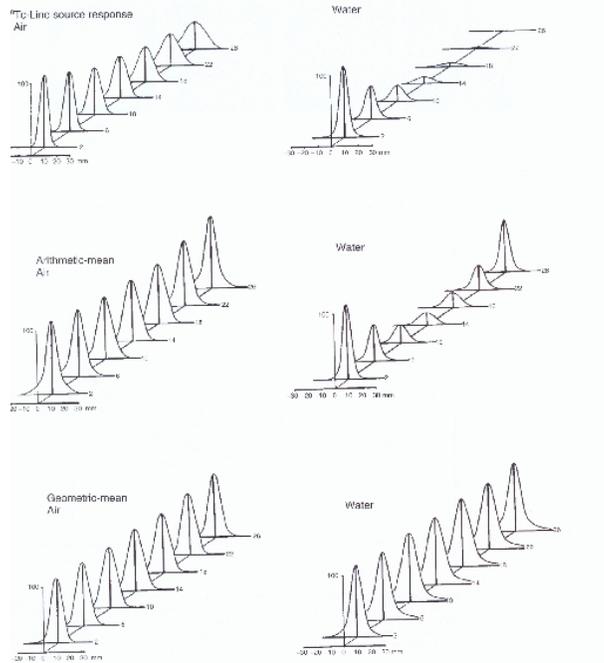


Figura 67. LSF en función de distancia en aire (izquierda) o en agua (derecha). fig 17.6 Cherry, p. 307.

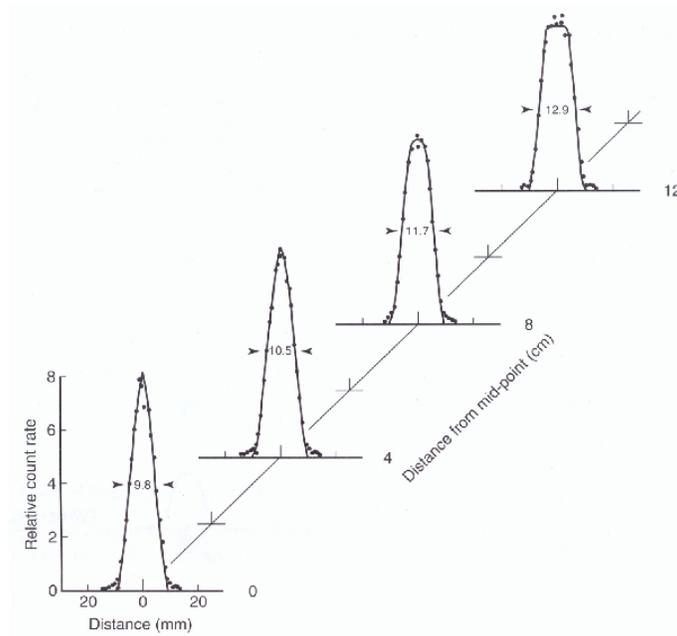


Figura 68. Mediciones de LSF en función de distancia para PET. fig 18.4 Cherry, p. 330.

También es de gran importancia determinar la función de transferencia de modulación (MTF *Modulation Transfer Function*), definida a partir de:

$$MTF(k/(2\pi)) = M_{out}(k/(2\pi))/M_{in}(k/(2\pi)) \quad (324)$$

donde M_{in} y M_{out} se evalúan en la frecuencia patrón (o de referencia) correspondiente al vector de onda $k/(2\pi)$ y están dados por:

$$M_{in} \equiv \frac{I_{max} - I_{min}}{I_{max} + I_{min}} \quad (325)$$

y

$$M_{out} \equiv \frac{O_{max} - O_{min}}{O_{max} + O_{min}} \quad (326)$$

de acuerdo con el gráfico de la figura 69.

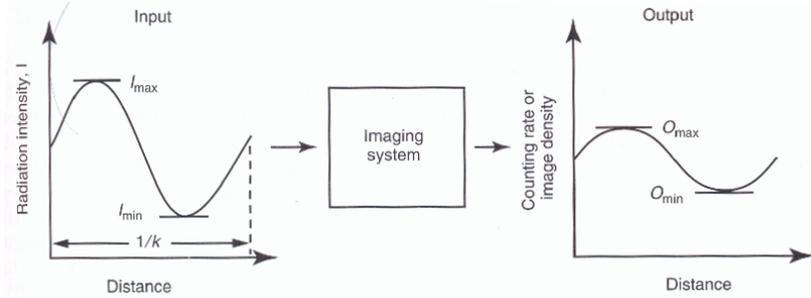


Figura 69. Principios básicos para determinar la MTF del instrumento de *imaging*. fig 15.5 Cherry, p. 257.

Un sistema de *imaging* con una MTF chata con valores cercanos a la unidad significa un sistema con alto grado de veracidad/fidelidad en la realización de imágenes, la figura 9.8 muestra curvas típicas de MTF para un sistema cámara Gamma con colimación.

A veces resulta posible obtener la MTF intrínseca $MTF_{int}(k/2\pi)$ del sistema de detección y otra para el sistema de colimación $MTF_{col}(k/2\pi)$, entonces la MTF del sistema $MTF_{sis}(k/2\pi)$ está dada por:

$$MTF_{sis}(k/2\pi) \equiv MTF_{int}(k/2\pi) \cdot MTF_{col}(k/2\pi) \quad (327)$$

Sobre el contraste y el ruido de una imagen

Por otro lado, el contraste en una imagen (C) hace referencia a diferencias en intensidad entre las diferentes partes de la imagen⁵⁵. En el caso particular de la medicina nuclear, el contraste en la imagen está afectado principalmente por las propiedades del radiofármaco. En general, se aconseja utilizar agentes con alta razón de concentración de absorción lesión-background.

En general, la definición de contraste es la razón entre el cambio en la señal de un objeto de interés R_l , como una lesión, relativo al nivel de señal en las zonas de entorno (R_0), *i.e.*:

$$C \equiv \frac{R_l - R_0}{R_0} \quad (328)$$

⁵⁵Para el caso de medicina nuclear significa diferentes niveles de fijación de material radioactivo por parte del paciente.

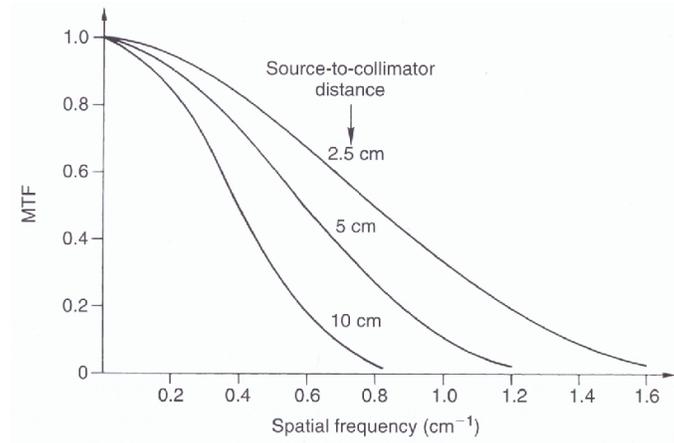


Figura 70. MTF para un colimador típico paralell-hole a diferentes distancias fuente-colimador. fig 15.6 Cherry, p. 258.

A veces, el contraste C se expresa porcentualmente. En el caso en que se tiene un fondo uniforme R_b superpuesto en la imagen, como esquematiza la figura 68, el contraste C'_l resulta:

$$C'_l = \frac{(R_l + R_b) - (R_0 + R_b)}{(R_0 + R_b)} = C_l \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{R_b}{R_0}\right)} \right] \quad (329)$$

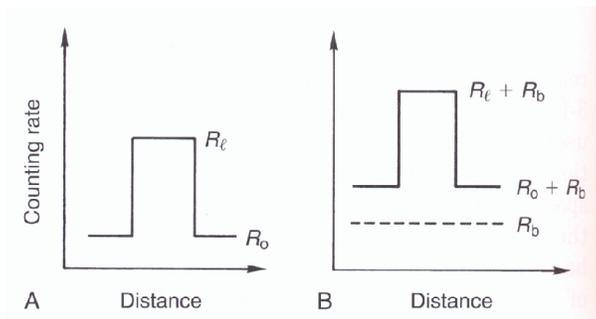


Figura 71. Efecto en el contraste de imagen debido a la adición de un background general. fig 15.8 Cherry, p. 260.

La pérdida de contraste puede resultar en una degradación de la visibilidad tanto de objetos de bajo contraste como detalles finos de la imagen. La figura 72.

Es posible aplicar técnicas computacionales para sustracción de fondo (*background subtraction*) o aumento de contraste (*contrast enhancement*), de manera de extraer la imagen con el contraste original, al menos en términos de los niveles relativos de las señales. entre el objeto de interés y las zonas del entorno. Sin embargo, en general estas técnicas también aumentan el ruido estadístico y el contraste de posibles artefactos debidos, por ejemplo a la no-uniformidad de detección. Entonces, el parámetro crítico para considerar la utilización de técnicas computacionales para aumentar el contraste es el efecto sobre el CNR (*Contrast to Noise Ratio*).

En este sentido, se introduce el concepto de ruido de la imagen. Existen diferentes tipos de ruidos: ruido aleatorio debido a la naturaleza estocástica del proceso de detección y ruido estructurado que

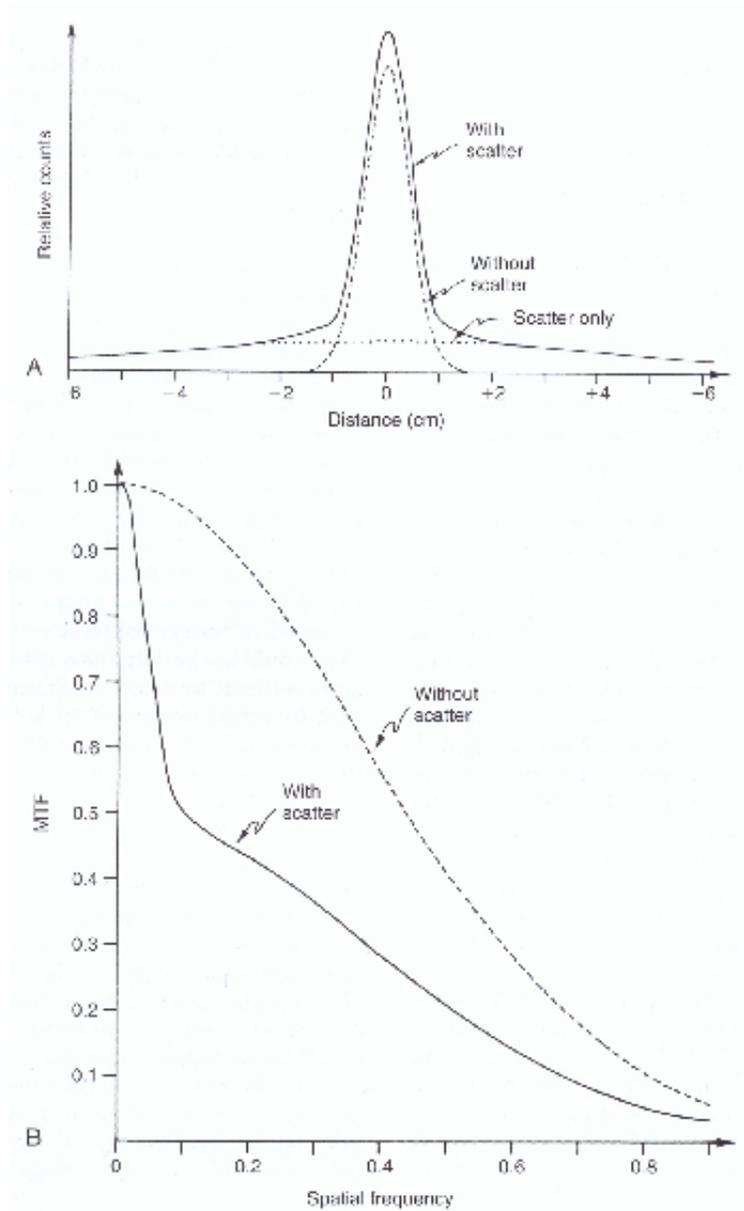


Figura 72. Efecto de la contribución de scattering en la formación de imágenes de diagnóstico. fig 15.10 Cherry, p. 262.

se refiere a ruido no aleatorio que afecta la tasa de conteo y se superpone e interfiere con la detección del objeto de interés. Este tipo de ruido puede deberse también a artefactos propios del sistema de *imaging*.

El ruido aleatorio, también conocido como ruido estadístico, afecta a toda la imagen. El parámetro crítico para la detectabilidad es el CNR del objeto en la imagen.

Suponiendo que se tiene una imagen 2D que contiene un objeto⁵⁶ de área A_l con contraste c_l sobre un background uniforme R_0 , el número de cuentas registradas en un área idéntica en zona de background es:

$$N_0 = R_0 \cdot A_l \cdot t = R_0 \cdot \frac{\pi}{4} d_l^2 \cdot t \quad (330)$$

donde d_l es el diámetro del objeto. La variación estadísticas de las cuentas en zonas de background es:

$$\sigma_{N_0} = \sqrt{N_0} = \sqrt{R_0 \cdot \frac{\pi d_l^2}{4} \cdot t} \quad (331)$$

y la correspondiente desviación estándar relativa es:

$$C_{ruido} \equiv \frac{\sigma_{N_0}}{N_0} = \frac{1}{\sqrt{R_0 \cdot \frac{\pi d_l^2}{4} \cdot t}} \quad (332)$$

y este factor se puede ser considerado como el ‘‘contraste de ruido’’ para un área circular de diámetro d_l en zonas de background.

Entonces, la razón objeto-contraste a ruido-contraste, CNR queda definido por:

$$CNR_l \equiv \frac{|C_l|}{C_{ruido}} \approx |C_l| \cdot d_l \cdot \sqrt{R_0 \cdot t} \quad (333)$$

donde se utilizó $\sqrt{\pi/4} \approx 1$ y se define usualmente la cantidad densidad de información (*Information Density*, ID) del background $ID_0 \equiv R_0 \cdot t$.

Para detectar un objeto, como una lesión, en una imagen, el observador debe estar en condiciones de distinguir entre el fondo del objeto y los patrones de contraste generados por ruido en zonas de background. Actualmente, existen grandes esfuerzos en investigación orientados a este punto. La conclusión es que, para que el objeto sea detectable, el CNR del objeto debe superar valores de 3 (o 5, según el criterio). Este factor se denomina criterio de Rose. El valor específico depende de cada caso, de acuerdo con las propiedades del objeto y del observador: forma, agudeza de los bordes, distancia de ‘‘visión’’, experiencia del observador, etc. Eligiendo un valor de 4, los requerimientos de detectabilidad, aplicados al caso anterior, son: $CNR_l \geq 4$, *i.e.*:

$$|C_l| \cdot d_l \cdot \sqrt{R_0 \cdot t} \geq 4 \quad (334)$$

la cual se aplica a situaciones relativamente idealizadas con objetos circulares y background aproximadamente uniforme.

⁵⁶En principio, que simula una lesión.

11.3.. Elementos para la evaluación de calidad de imágenes

Las medidas físicas de una imagen, discutidas en las secciones precedentes, resulta útiles para la comparación de diferentes sistemas de *imaging*, o imágenes obtenidas con el mismo sistema, con diferentes configuración de parámetros, en vista de establecer la calidad de las imágenes. Además, en ciertas ocasiones también resultan útiles para etimar el tamaño y contraste mínimo de objeto detectable.

Sin embargo, en muchos casos la detectabilidad se determina de manera más confiable (y precisa) por medio de evaluación directa, utilizando observadores. Esta modalidad se denomina “estudios de performance por parte de observadores”. Los observadores chequean tanto la capacidad del sistema para producir detectabilidad de objetos como la habilidad de observadores individuales para detectarlos. Los experimentos más comunes, típicos en medicina nuclear, son:

- C-D: Estudios de Contraste-Detalle.

Se utilizan imágenes de un fantoma especial que cuenta con un conjunto de objetos de diferentes tamaño y contraste. Típicamente se utilizan objetos gradualmente crecientes en tamaño a lo largo de un eje y crecientes en contraste a lo largo de otro eje, como se muestra en la figura 73.

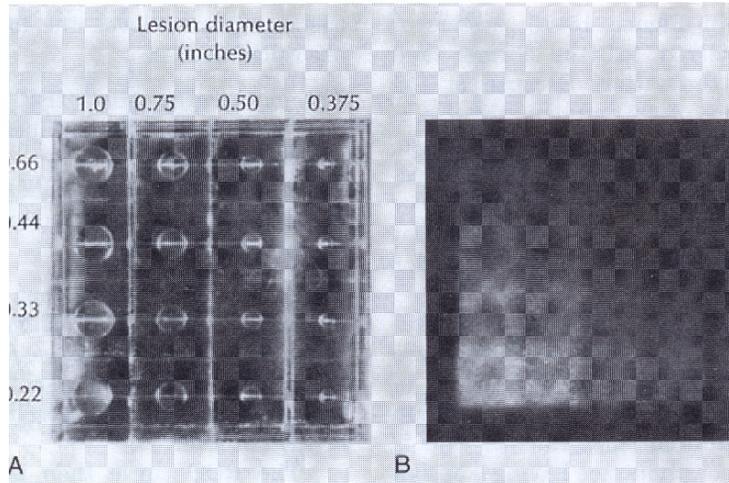


Figura 73. Fantoma Rollo para estudios C-D en medicina nuclear. fig 15.14 Cherry, p. 269.

Se obtienen las imágenes correspondientes a diferentes sistemas de *imaging* o al mismo, con diferentes configuraciones de parámetros, y las imágenes son evaluadas por un observador que no conocen el origen de las mismas el cual determina el menor diámetro de esfera que es visible a cada nivel de contraste. Los resultados típicos de este análisis se muestran en la figura 74.

- ROC: Estudios de Características de operabilidad de receptor (*Receiver Operating Characteristic*).

Algunos de los inconvenientes o deficiencias del método C-D pueden resolverse utilizando el método ROC. En este caso, se obtiene el conjunto de imágenes correspondiente (que pueden corresponder a fantasmas o incluso imágenes clínicas).

En la situación más simple, se consideran imágenes en las que haya o no un objeto (lesión); el primer grupo se denomina imágenes positivas y el segundo imágenes negativas. Éstas son dadas a un observador al cual se le pide indicar si el objeto está o no presente, y si está indicar donde. El grado de confianza se establece en una escala de 4:

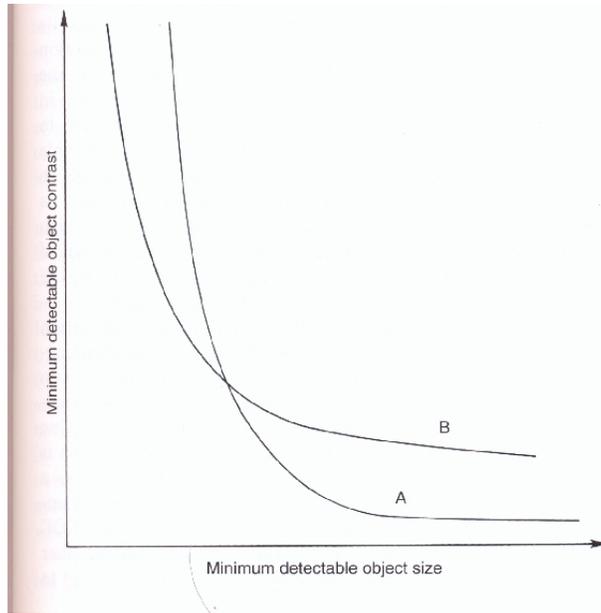


Figura 74. Resultados hipotéticos empleando fantoma Rollo para estudios C-D en medicina nuclear correspondiendo a 2 sistemas de *imaging* A y B. fig 15.15 Cherry, p. 269.

- 1 = presente, definitivamente.
- 2 = probablemente presente.
- 3 = probablemente ausente.
- 4 = ausente, definitivamente.

La curva de ROC se obtiene graficando TPF vs. FPF, a medida que se pasa a grados mas relajados de confianza, como indica la figura 9.13.

Una medida cuantitativa de este método es el área A_z bajo la curva, que representa la precisión de la detección.

11.4.. Procesamiento digital de imágenes en medicina nuclear

Los sistemas modernos de *imaging* en medicina nuclear están provistos de programas sofisticados para visualiza, editar y procesar las imágenes que se adquieren. Se emplea una cantidad muy variada de tácinas de procesamiento digital de imágenes en el campo de la medicina nuclear, algunas son totalmente automáticas y otras interactivas (con interfaz al usuario).

11.4.1.. Visualización y selección de regiones de interés

Típicamente, para una imagen de proyección o un conjunto de imágenes tomográficas, la manera usual de visualización es por medio de visualizar la imagen o serie en pantalla. El display puede ser manipulado por el usuario para facilitar la interpretación, lo cual incluye cambios en la escala lineal de intensidades (tonos de gris) o escala de colores, pasando a escalas no lineales, por ejemplo logarítmicas.

También se aplican técnicas para limitar el rango de valores de pixels, que se denomina *windowing*, y se obtienen resultados como se muestra en la figura 76.

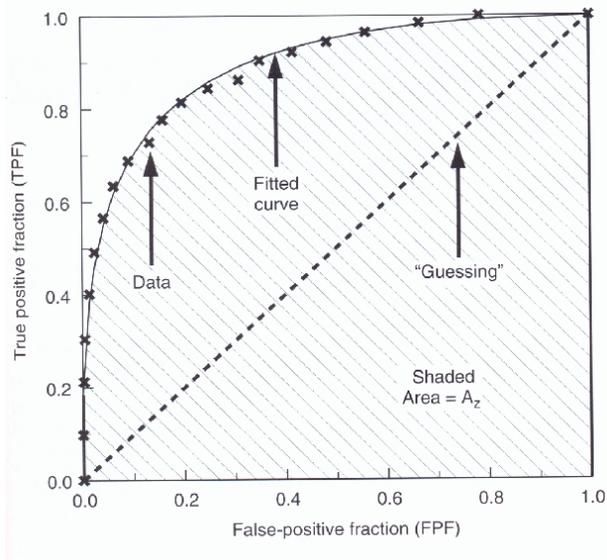


Figura 75. Resultados típicos del método ROC. fig 15.16 Cherry, p. 271.

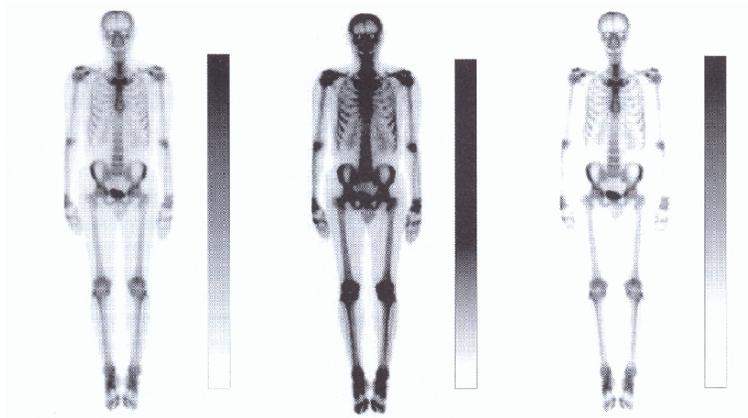


Figura 76. Efectos de cambiar la distribución de escala de grises: original (izquierda), distribución uniforme (centro) y compresión de escala en valores bajos (derecha), lo cual suprime tejidos blandos. fig 19.4 Cherry, p. 368.

Las regiones de interés ROI (*Region of Interest*) se utilizan para focalizar la atención, y eventualmente extraer datos, de una parte de la imagen. El tamaño, forma y posición de la ROI se determina, típicamente, con un cursor sobre la imagen de interés. Sobre esa zona, pueden obtenerse cantidades estadísticas, como valor medio y desviación standard de los pixels, número de pixels en la ROI, etc.

11.4.2.. Suavizado de imágenes

Los métodos de procesamiento digital de imágenes son, en sí, un área de gran desarrollo. En esta sección se introducen algunos conceptos básicos sobre las metodologías mayormente empleadas para procesar digitalmente imágenes médicas.

La mayoría de los equipos de diagnóstico médico modernos cuentan con algoritmos de suavizado. El efecto de este procedimiento, se manifiesta en la figura 77.



Figura 77. Efectos del suavizado: filtro gaussiano con ancho de 4mm (centro) y 8mm (derecha) aplicados a la imagen original (izquierda). fig 19.10 Cherry, p. 373.

En esencia, los procesos de filtrado son técnicas que promedian los valores locales de pixels para reducir la variación pixel a pixel. Los algoritmos de suavizado pueden implementar filtros que otorgan diferente peso a los pixels en consideración para determinar el valor medio. Uno de éstos es el filtro gaussiano, aunque en general, los filtros de suavizado operan del siguiente modo:

Imágen suavizada = Imágen original *times* filtro de suavizado
donde *times* representa la operación de convolución.

Si bien estos filtros generan imágenes que en apariencia tienen menor ruido (mejora el SNR), también aumentan el *blurring* con la consecuente pérdida potencial de detalle.

11.4.3.. Detección de bordes y segmentación

La detección de bordes y la segmentación son dos procedimientos del procesamiento digital de imágenes que se utilizan muy frecuentemente para tratar imágenes médicas, típicamente trabajando sobre una ROI. Pueden emplearse para clasificar diferentes tipos de tejidos y para definir el cuerpo y órganos de paciente a través de contornos.

Obviamente, los algoritmos de detección de bordes muestran una mejor performance para hallar bordes claros que difusos, y uno de los métodos más comunes es el del Laplaciano 2D y 3D. Un mínimo local del Laplaciano representa una zona de una alta tasa de variabilidad entre pixels contiguos o cercanos, *i.e.* bordes generalmente, aunque no necesariamente.

Eliminando las variaciones pequeñas (imponiendo límites) en el valor del Laplaciano se puede producirse un efecto de disminución del ruido, como se indica en la figura 78.

Por su parte, la segmentación de imágenes se concentra en agrupar los pixels que tengan ciertas características comunes. En particular, se utilizan para discriminar tejidos, órganos, lesiones, zonas activas, etc. El método más simple de segmentación consiste en especificar un rango de valores para la intensidad de pixels, *i.e.*: $A < I(i, j) < B$. Debido al ruido en las imágenes, esta metodología elemental no resulta ser muy práctica y se recurre a métodos más elaborados. Los métodos de detección

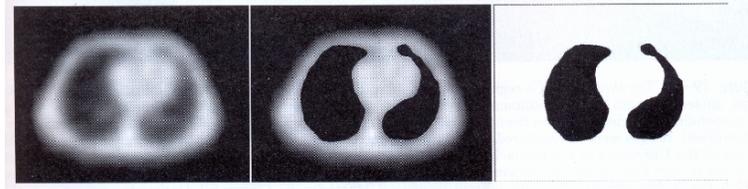


Figura 78. Serie de imágenes ilustrando la segmentación de pulmones: original (izquierda), filtrada (centro) y segmentada (derecha). fig 19.11 Cherry, p. 373.

de bordes también pueden usarse para la segmentación. Por ejemplo, usando detección de bordes se realiza el trazado de contornos y todo los pixels que están allí dentro se los considera que forman parte del objeto de interés.

11.4.4.. Reconstrucción tomográfica de imágenes médicas

Un problema básico en los procesos de *imaging* se debe a que se dispone de imágenes 2D (proyecciones) de objetos 3D. Una metodología para resolver esta situación, y obtener información 3D, es obtener imágenes (proyecciones) correspondientes a diferentes ángulos alrededor (por ejemplo, posterior, lateral, y oblicuo) del objeto de interés; y el observador visualizando estas imágenes debe abstraerse para interpretarlas.

Esta metodología es, obviamente, sólo parcialmente útil, ya que resulta complicado interpretar en casos donde hay varias estructuras las cuales pueden estar superpuestas.

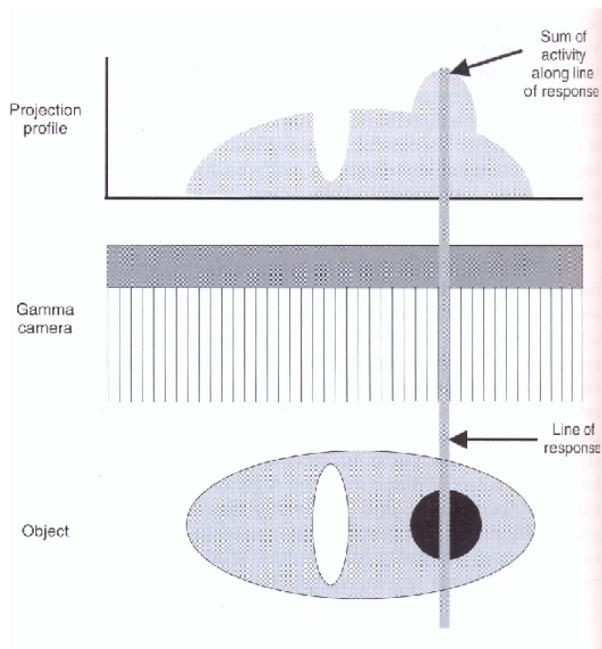


Figura 79. Esquema del corte de un sistema CT. fig 16.1 Cherry, p. 274.

Un método alternativo es el *imaging* tomográfico. Las imágenes tomográficas son representaciones 2D de estructuras que se encuentran en un corte del objeto. El método tomográfico, originalmente propuesta para técnicas de *imaging* estructural, y luego extendido a técnicas funcionales.

Las técnicas modernas de tomografía computada (CT), que incluyen PET, SPECT y CT clásico, cuentan con sistemas de detección rodeando al objeto, o bien girando entorno a éste, de modo que se consiguen varias vistas angulares (denominadas proyecciones) del mismo. Luego, algoritmos matemáticos reconstruyen imágenes de secciones (slices) seleccionadas a partir de la información de estas proyecciones. La reconstrucción a partir de múltiples proyecciones detectando emisión de radionúclidos se denomina ECT Emission Computed Tomography, mientras que la reconstrucción para el caso de una fuente externa de rayos X se denomina TCT Transmission Computed Tomography, normalmente denominada simplemente CT. Además, las técnicas CT producen imágenes en las que se mejora significativamente en CNR. La introducción de conceptos básicos y el análisis de las técnicas de CT se hará en base a la figura 9.17.

El sistema de colimación permite que solo un haz muy delgado, correspondiente a un corte (slice) llegue al detector. Este slice se encuentra directamente perpendicular al detector, como se indica en 79. Cada canal del colimador acepta un haz muy delgado (cilíndrico), definido por las características geométricas del setup. Este haz delgadito cilíndrico define la “línea de respuesta” del colimador de huecos. Si se ignoran los efectos de atenuación y dispersión, resulta que las cuentas medidas son proporcionales a la actividad del punto en cuestión. La cantidad medida en este caso (cuentas o contenido radioactivo) se denomina “integral de línea” de la línea de respuesta. Un conjunto completo de integrales de línea obtenidos a lo largo del detector se denomina “proyección” o perfil de proyección, como se muestra en 79.

Un esquema típico del proceso de adquisición tomográfica se muestra en 80.

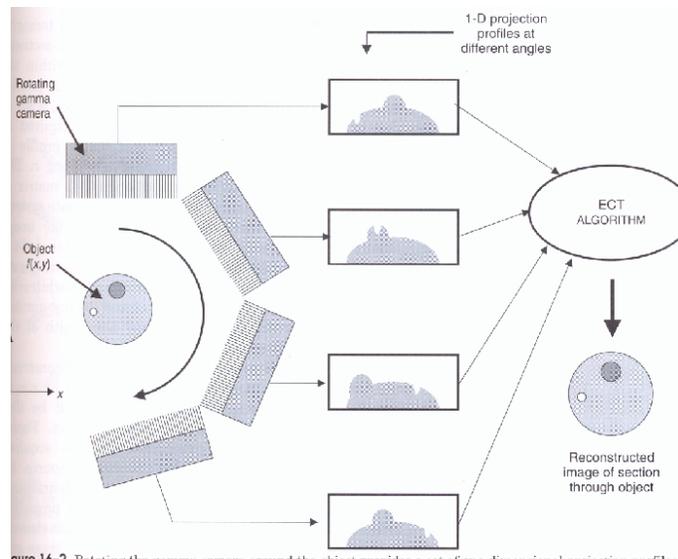


Figura 80. Esquema de adquisición tomográfico. fig 16.2 Cherry, p. 275.

Se asume que se tiene N proyecciones obtenidas a ángulos equiespaciados entre 0 y 180 grados. En condiciones ideales el perfil de proyección correspondiente a ángulos $180 + \phi$ sería el mismo que para ángulo ϕ , y por lo tanto obtener datos entre 180 y 360 sería redundante; sin embargo en situaciones prácticas se adquiere entre 0 y 360.

11.5.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo XI

11.5.1.. Básico sobre procesamiento de imágenes médicas

Ejercicio 11.1:

Ejercicio 11.2:

Ejercicio 11.3:

12.. Ecuación de transporte de Boltzmann en presencia de campos electromagnéticos externos

Se conoce que soluciones deterministas a la Ecuación Fundamental de Boltzmann del transporte de radiación, incluso en su versión lineal (LBTE), permite obtener estimaciones dosimétricas de relativa aceptable precisión. El Capítulo 12. se dedica a presentar los aspectos fundamentales relativos a la incorporación de la presencia de campos electromagnéticos en el modelo de transporte de radiación.

12.1.. Tratamiento a primer orden de la ecuación de transporte de Boltzmann con campos externos: LBTE

La técnica propuesta se basa en literatura existente, la que aprovecha algoritmos discretos ordinarios. Se incorpora un término específico para el campo magnético, el que se describirá en detalle en el contexto de la LBTE, en su versión de estado estacionario, y tratamiento de primer orden, como indica la expresión 335:

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, E, \Omega) + \sigma \psi(\vec{r}, E, \Omega) = \mathbf{K}(\vec{r}, E, \Omega) + S(\vec{r}, E, \Omega)$$

$$\mathbf{K}(\vec{r}, E, \Omega) \equiv \int_{\Omega} d\Omega' \int_0^{\infty} dE' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \Omega \rightarrow \Omega') \psi(\vec{r}, E', \Omega') \quad (335)$$

donde: $\Omega \equiv \frac{\vec{v}}{v}$, \vec{v} es la velocidad, y frecuentemente Ω se expresa en sus componentes esféricas: $\Omega = (\sin(\theta) \cos(\phi), \sin(\theta) \sin(\phi), \cos(\theta))$.

Además, Σ es la sección eficaz macroscópica, de absorción y de *scattering*, *i.e.* sección eficaz total, S es el término fuente (*source*). La expresión 335 se aplica a la fluencia angular ψ .

12.1.1.. Desacoplamiento de la LBTE con campos externos

En el caso particular de teleterapia como la radioterapia con haces de fotones, el acoplamiento de partículas desempeña un papel en la distribución espacial de dosis, ya que los fotones son la principal fuente de electrones secundarios dispersos que depositan la dosis en el paciente. En el presente modelo se utilizan técnicas y aproximaciones comunes a otros algoritmos para simplificar el acoplamiento. Se presupone que los positrones generados no se aniquilan; por lo tanto, se trata efectivamente a los positrones como electrones. También se asume que los electrones no producen fotones de Bremsstrahlung, lo cual es una suposición válida en el rango de radioterapia de megavoltaje. Por lo tanto, la LBTE resultante, a primer orden acoplado, resulta:

$$\vec{\Omega} \nabla \psi_p(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_p(\vec{r}, E) \psi_p(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \mathbf{K}^{pp}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + S_p(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$$

$$\vec{\Omega} \nabla \psi_e(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_e(\vec{r}, E) \psi_e(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) +$$

$$\nabla_v \left[\vec{a} \left(\frac{\psi_e(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{v} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial E} \left(\beta_r(\vec{r}, E) \psi_e(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \right) =$$

$$\mathbf{K}^{ee}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \mathbf{K}^{pe}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + S_e(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (336)$$

donde los índices p y e refieren a *fotones* y *electrones/positrones*, respectivamente. Y, aplican las condiciones de contorno:

$$\psi_x(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = 0, \quad \forall \vec{\Omega} \cdot \hat{n} < 0 \quad (337)$$

junto a los *Kernels*:

$$\mathbf{K}^{xy} \equiv \int_{\Omega} d\Omega \int_0^{\infty} dE' \Sigma_s^{xy}(\vec{r}, E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega) \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (338)$$

La ecuación 337 representa la aproximación tradicional para calcular el transporte de radiación de partículas cargadas, en el formato de la aproximación de Fokker-Planck. Para los cálculos dosimétricos de haces de fotones externos, puede ignorarse el término del momentum en la aproximación de Fokker-Planck, así como los términos de energía de segundo orden.

Por lo tanto, sólo el término de aproximación de desaceleración continua (CSDA) que usa el stopping power más restrictivo restringido β_r , como muestra la expresión 337. El término de la fuerza externa que resulta en una aceleración \vec{a} también se ha incluido en la expresión 337, donde ∇_v representa el gradiente de la velocidad.

Entonces, el término de fuerza externa resulta:

$$\nabla_v \left[\vec{v} \left(\frac{\Psi}{v} \right) \right] = \vec{a} \cdot \nabla_v \left(\frac{\Psi}{v} \right) + \left(\frac{\Psi}{v} \right) \nabla_v \cdot \vec{a} \quad (339)$$

12.2.. Tratamiento de la LBTE sólo con campo magnético

Aplicando la analogía con la relación relativista entre fuerza y aceleración ($\vec{a} = \frac{1}{\gamma m_0} [\vec{F} - \beta^2 (\vec{F} \cdot \vec{\Omega}) \vec{\Omega}]$), para γ el factor relativista, $\beta \equiv \frac{v}{c}$, e introduciendo la fuerza de Lorentz $\vec{F} = q (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$ se obtiene:

$$\vec{a} = \frac{q}{\gamma m_0} [\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} - \beta^2 (\vec{E} \cdot \vec{\Omega}) \vec{\Omega}] \quad (340)$$

Para los casos en que se tiene sólo campo magnético, *i.e.* $\vec{E} = 0$, la expresión 340 se reduce a la siguiente (341):

$$\vec{a} = \frac{q}{\gamma m_0} [\vec{v} \times \vec{B}] \quad (341)$$

Y, a partir de las aproximaciones consideradas, junto a requerimientos de auto-consistencia para los campos, es posible desacoplar la expresión 342 como sigue (342):

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \nabla \psi_p(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_p(\vec{r}, E) \psi_p(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \mathbf{K}^{pp}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + S_p(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \\ &\quad \text{y,} \\ \vec{\Omega} \nabla \psi_e(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_e(\vec{r}, E) \psi_e(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) & \\ - \frac{\partial}{\partial E} (\beta_r(\vec{r}, E) \psi_e(\vec{r}, E, \vec{\Omega})) & \\ - \frac{q_e}{|\vec{p}|} (\vec{\Omega} \times \vec{B})_z - \frac{\partial}{\partial \mu} \bar{\psi}_e(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - \frac{q_e}{|\vec{p}| (1 - \mu^2)} (\vec{\Omega} \times (\vec{\Omega} \times \vec{B}))_z & \frac{\partial}{\partial \phi} \bar{\psi}_e(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \\ \mathbf{K}^{ee}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + S_e(\vec{r}, E, \Omega) & \end{aligned} \quad (342)$$

Y, la dosis correspondiente, D puede estimarse por medio de la expresión 343:

$$D = \int dE \int d\vec{\Omega} \frac{\Sigma_{En.Dep.}(\vec{r}, E)}{\rho(\vec{r})} \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (343)$$

donde $\Sigma_{En.Dep.}$ es la sección eficaz de deposición de energía y ρ la densidad másica.

12.3.. Discretización de la LBTE a primer orden con campo magnético

Para incorporar el campo magnético en la aproximación de la sección 12.1. es comun utilizar desarrollar/implementar programas para resolver numéricamente las ecuaciones diferenciales por medio de técnicas de ordenadas discretas (véase, por ejemplo [23]), y se desarrollan las componentes angulares en términos de los armónicos esféricos $Y_{l,m}(\vec{\Omega})$, obteniendo:

$$\mathbf{K}^{xy}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l \sum_{l'=0}^L \sum_{m'=-l'}^{l'} \int d\vec{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_{s,l}^{xy}(\vec{r}, E' \rightarrow E) f_{l,m}(\vec{r}, E') Y_{l',m'}(\vec{\Omega}) Y_{l',m'}^*(\vec{\Omega}') Y_{l,m}(\vec{\Omega}') \quad (344)$$

donde: $f_{l,m}(\vec{r}, E) \equiv \int d\vec{\Omega} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) Y_{l,m}^*(\vec{\Omega})$, y el subíndice s en Σ indica las componente de *scattering*.

Utilizando las ortonormalidad de los $Y_{l,m}$, la expresión 344 se reduce a la 345:

$$\mathbf{K}^{xy}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l \int_0^\infty dE' \Sigma_{s,l}^{xy}(\vec{r}, E' \rightarrow E) f_{l,m}(\vec{r}, E') Y_{l,m}(\vec{\Omega}) \quad (345)$$

En aplicaciones prácticas, la expresión 345 puede resolverse para $L = 5$, por ejemplo.

Ejemplos de soluciones numéricas bajo el formalismo presentado pueden encontrarse en [24].

12.4.. Modelo de Bielajew-Bouchard para incorporar la fuerza de Lorentz en transporte Monte Carlo

Las premisas de la propuesta metodológica de Bielajew-Bouchard se basa en establecer un marco teórico para generalizar los algoritmos de transporte de Monte Carlo incorporando campos electromagnéticos externos a la ecuación de transporte de radiación de Boltzmann de manera rigurosa y consistente. Para ello, se utilizan principios fundamentales, *i.e.* la ecuación principal de transporte de radiación de Boltzmann, y se la modifica para incorporar un término para describir la variación de la distribución de partículas debido a la fuerza de Lorentz.

Para cada tipo de partícula, puede escribirse una ecuación de transporte en general, como se describe a continuación: Partiendo de la ecuación de continuidad y agregando los términos de fuente y de colisión:

$$\frac{dn}{dt} = \rho(S + I) \quad (346)$$

donde $n(\vec{r}, \vec{p}, t)$ es la distribución espacial de partículas en el tiempo t con momento \vec{p} por unidad de volumen dV , unidad de momento dp y por unidad de ángulo sólido de dirección central dada por $\sin(\theta) d\theta d\phi$, $S = S(\vec{r}, \vec{p}, t)$ es el término fuente, $\rho = \rho(\vec{r})$ es la distribución espacial de densidad de masa e $I = (\psi, \vec{r})$ representa la función con la información de las propiedades del medio.

12.4.1.. Decomposición en dependencia de múltiples variables

Para el estado caracterizado por el momentum \vec{p} , se tiene⁵⁷:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial n}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial n}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial n}{\partial p_x} \frac{\partial p_x}{\partial t} + \frac{\partial n}{\partial p_y} \frac{\partial p_y}{\partial t} + \frac{\partial n}{\partial p_z} \frac{\partial p_z}{\partial t} = \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{d\vec{r}}{dt} \cdot \vec{\nabla}_r n + \frac{d\vec{p}}{dt} \cdot \vec{\nabla}_p n \quad (347)$$

⁵⁷Para el caso de coordenadas Cartesianas.

Y, considerando que el flujo de partículas ψ debe satisfacer las condiciones de la expresión 348:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{\beta c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \hat{p} \cdot \vec{\nabla}_r \psi + \frac{d\vec{p}}{dt} \left[\frac{1}{\beta c} \vec{\nabla}_p \psi + \frac{1}{c} \psi \vec{\nabla}_p \frac{1}{\beta} \right] \quad \psi = n\beta c \quad (348)$$

junto a la relación $ds = \beta c dt$ para la distancia de path recorrida, y $p = \gamma\beta m_0 c$.

Se tiene, entonces:

$$\beta = \sqrt{\frac{\left(\frac{p}{m_0 c}\right)^2}{1 + \left(\frac{p}{m_0 c}\right)^2}} \quad (349)$$

La expresión 349 junto a las componentes en coordenadas esféricas de $\vec{\nabla}_p(\frac{1}{\beta})$ perm,iten obtener la expresión 350 para el transporte:

$$\frac{1}{\beta c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \hat{p} \cdot \vec{\nabla}_r \psi + \frac{d\vec{p}}{dt} \cdot \left(\frac{1}{\beta c} \vec{\nabla}_p \psi - \frac{1}{\gamma^3 \beta^2 m_0 c} \psi \hat{p} \right) \quad (350)$$

Y, la fuerza de Lorentz \vec{F}_L genera una componente de momentum dada por:

$$\vec{F}_L = \left[\frac{d\vec{p}}{dt} \right]_L = q_e \left[\vec{E} + \beta c \hat{p} \times \vec{B} \right] \quad (351)$$

12.4.2.. Formulación del modelo Bielajew-Bouchard independiente del tiempo

Puede definirse la fuerza de Lorentz en términos de los operadores de posición y tiempo, como muestra la expresión 352:

$$F_L(\vec{E}(\vec{r}), \vec{B}(\vec{r}), \psi) = -q_e \left[\vec{E} + \beta c \hat{p} \times \vec{B} \right] \cdot \left[\frac{1}{\beta c} \vec{\nabla}_p \psi - \frac{1}{\gamma^3 \beta^2 m_0 c} \psi \hat{p} \right] = -q_e \left[\frac{\vec{E}}{\beta c} + \hat{p} \times \vec{B} \right] \cdot \vec{\nabla}_p \psi + \frac{q_e}{\gamma^3 \beta^2 m_0 c} \left[\vec{E} \cdot \hat{p} \right] \quad (352)$$

Entonces, en presencia de los campos E-M externos, la expresión 353 representa la ecuación de transporte dependiente del tiempo:

$$\frac{\partial}{\partial s} \psi + \hat{p} \cdot \vec{\nabla}_r \psi = \rho [S(\vec{r}, \vec{p}, t) + I(\psi, \vec{r})] + F_L(\vec{E}, \vec{B}, \psi) \quad (353)$$

con $ds = \beta c dt$.

Considerando casos en los que los campos E-M externos \vec{E} y \vec{B} sean estacionarios, y que la fuente sea también constante en el tiempo (estado de equilibrio); o bien cuando el flujo se integra en el tiempo (fluencia), pueden introducirse algunas simplificaciones obteniendo así la *ecuación de transporte en presencia de campos E-M externos independiente del tiempo*, como indica la exapresión 354:

$$\hat{p} \cdot \vec{\nabla}_r \psi = \rho [S(\vec{r}, \vec{p}) + I(\psi, \vec{r})] + F_L(\vec{E}, \vec{B}, \psi) \quad (354)$$

12.5.. Implicancias en la teoría de scattering múltiple

Las teorías de dispersión múltiple son parte central de los algoritmos de condensación de historias (véase, por ejemplo, [25]). La condensación es un procedimiento útil, y necesario, para simular el transporte, principalmente de partículas cargadas, en la materia.

Las teorías de *scattering múltiple* permiten combinar/agrupar eventos de dispersión elástica; reemplazándolos por un único *evento efectivo equivalente* (virtual/ficticio), entre el proyectil y los centros dispersores lo largo de la trayectoria del proyectil, con el fin de ahorrar un tiempo de cómputo.

Si bien existen muchos modelos teóricos de *scattering múltiple*, la teoría de Moliere para dispersiones de bajo ángulo, y la correspondiente implementación de Lewis en algoritmos de transporte es la herramienta típicamente más conveniente para, entre otros, los modelos de tipo Monte Carlo.

A fin de incorporar y validar el acoplamiento de campos E-M externos en algoritmos de *scattering múltiple*, el modelo de Moliere-Lewis puede adaptarse para incorporar, de manera determinista, la fuerza de Lorentz en la ecuación de transporte, bajo los siguientes supuestos:

- los casos en ausencia de campo eléctrico $\vec{E} = 0$ pueden abordarse por medio de pérdidas continuas de energía de acuerdo al modelo de *continuous slowing down approximation (CSDA)*, y entonces \vec{p} puede determinarse por medio de s ya que el campo magnético \vec{B} no afecta la energía de la partícula. La ecuación de transporte correspondiente se muestra en 355:

$$\frac{\partial}{\partial s} \Psi(\vec{r}, \hat{p}, s) + \hat{p} \cdot \vec{\nabla}_r \Psi(\vec{r}, \hat{p}, s) = N \int_{4\pi} [\Psi(\vec{r}, \hat{p}', s) - \Psi(\vec{r}, \hat{p}, s)] \Sigma(p(s), \hat{p} \cdot \hat{p}') d\vec{u}' - q_e \hat{p} \times \vec{B} \cdot \vec{\nabla}_p \Psi(\vec{r}, \hat{p}, s) \quad (355)$$

donde N representa la densidad volumétrica de centros dispersores, *i.e.* $\Sigma = N\sigma$. En la expresión 355 y anteriores, \hat{p} representa la dirección de movimiento, representada por $\hat{\Omega}$ en expresiones previas, como 345.

- los casos con presencia de campo eléctrico $\vec{E} \neq 0$ se procede determinando las pérdidas de energía según el CSDA como se muestra en 356:

$$\left[\frac{d\vec{p}}{dt} \right]_{CSDA} = \left[\frac{dp}{dt} \right]_{CSDA} \hat{p} = \left[\frac{d(\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4})}{cdt} \right]_{CSDA} \hat{p} = \left[\frac{dE}{\beta c dt} \right]_{CSDA} \hat{p} = -S_{\Delta}(T) \hat{p} \quad (356)$$

donde $S_{\Delta}(T)$ es el *stopping power restringido* y T la energía cinética, y puede definirse la *fuerza del CSDA* F_{CSDA} como se expresa en 357:

$$F_{CSDA}(\vec{r}, \Psi) = \frac{S_{\Delta}(T)}{\beta c} \frac{\partial}{\partial p} \Psi - \frac{S_{\Delta}(T)}{\gamma^3 \beta^2 m_0 c} \Psi \quad (357)$$

Finalmente, sumando las fuerzas, se obtiene la ecuación de transporte en presencia de campo eléctrico 358:

$$\frac{\partial}{\partial s} \Psi(\vec{r}, \hat{p}, s) + \hat{p} \cdot \vec{\nabla}_r \Psi(\vec{r}, \hat{p}, s) = N \int_{4\pi} [\Psi(\vec{r}, \hat{p}', s) - \Psi(\vec{r}, \hat{p}, s)] \sigma(p(s), \hat{p} \cdot \hat{p}') d\vec{u}' - q_e \left[\frac{\vec{E}}{\beta c} + \hat{p} \times \vec{B} \right] \cdot \vec{\nabla}_p \Psi(\vec{r}, \hat{p}, s) + \frac{q_e}{\gamma^3 \beta^2 m_0 c} [\vec{E} \cdot \hat{p}] + \frac{S_{\Delta}(T)}{\beta c} \frac{\partial \Psi(\vec{r}, \vec{p}, s)}{\partial p} - \frac{S_{\Delta}(T)}{\gamma^3 \beta^2 m_0 c} \Psi(\vec{r}, \vec{p}, s) \quad (358)$$

En términos prácticos, la metodología consiste en desarrollar ψ en armónicos esféricos, $Y_{l,m}$, y resolver la expresión 355 o 358 (según sea $\vec{E} = 0$ o bien $E \neq 0$), los momentos $\langle x \rangle$ y $\langle x \cos(\theta) \rangle$, y similares.

12.6.. Teorema de Fano en presencia de campos electromagnéticos externos

Uno de los principales resultados e implicancias de la incorporación de campos E-M externos es la consistencia en relación a la teoría de cavidades.

Puede verificarse, por ejemplo, que falla el *teorema de Fano* en presencia de campos electromagnéticos externos, inclusive si son estáticos y uniformes, dando cuenta de la falencia inherente de la teoría de la cavidad de Fano. Detalles técnicos respecto a las consecuencias sobre la teoría de la cavidad debido a la presencia de campos E-M externos puede verse, por ejemplo, en [26].

MÓDULO DE APLICACIÓN I

Elementos de cálculo dosimétrico para Hadronterapia y Campos Mixtos

13.. Trabajo de aplicación: Elementos de tracking y simulación de haces de neutrones

El movimiento de neutrones en un medio material es una sucesión de recorridos (rectos) interrumpidos por eventos de interacción con el material.

Como resultado del evento de interacción o colisión puede ocurrir un cambio en el estado de fase (variables cuánticas) del neutrón. En particular, puede ocurrir un cambio en la dirección de movimiento y/o la energía de la partícula transportada. Para el caso de neutrones, pueden ocurrir además muchos otros procesos, como absorción y/o producción de partículas secundarias.

Como se definió en capítulos anteriores, la sección eficaz macroscópica Σ se refiere a la probabilidad de interacción de neutrones con los núcleos del medio material por unidad de camino recorrido (*path*). La unidad de Σ es inversa de distancia. La sección eficaz microscópica σ se relaciona con Σ por medio de $\Sigma = \sigma N$, donde N es la densidad de centros dispersores (núcleos) por unidad de volumen. La unidad de N es inversa de volumen.

La sección eficaz de neutrones en medios materiales depende de la energía del neutrón, la cantidad de protones y neutrones en los núcleos del medio material; y por supuesto, del tipo de interacción que se considere.

La sección eficaz total para neutrones en un dado material es la suma de las secciones eficaces de cada uno de los tipos de interacción posibles considerados. Por tanto, si sólo se consideran eventos de interacción de *scattering* y absorción, se tiene:

$$\Sigma_T = \Sigma_s + \Sigma_a \quad (359)$$

Neutrones viajando a través de un medio material caracterizado por la sección eficaz macroscópica total Σ_T , realizan trayectos rectos entre sitios consecutivos donde se producen colisiones.

Si se considera un medio material homogéneo, isotrópico, la probabilidad de colisión es constante a lo largo de la trayectoria del neutrón, independientemente de la dirección de movimiento. Por lo tanto, la distribución de colisiones a lo largo del *path* está dada por:

$$\frac{dn}{dx} = -\Sigma_T n \quad (360)$$

donde n indica el número de neutrones que recorren una distancia x antes de tener la primer colisión.

Entonces:

$$n(x) = n(0) e^{-\Sigma_T x} \quad (361)$$

Demostrando que la cantidad de neutrones que viajan una distancia x antes de colisionar decrece exponencialmente con la distancia x .

En particular, puede calcularse la distancia media (λ), definida como el momento de primer orden, que se recorre antes de colisionar:

$$\lambda \equiv \frac{\int_0^{\infty} x e^{-\Sigma_T x} dx}{\int_0^{\infty} e^{-\Sigma_T x} dx} = \Sigma_T^{-1} \quad (362)$$

La distancia media entre colisiones λ se denomina camino libre medio (*mean free path*, mfp).

13.1.. Tracking y transporte de neutrones

Para los propósitos de simulación de transporte, el neutrón puede ser tratado como una partícula puntual con longitud de onda cuántica reducida dada por:

$$\lambda_{red} = \frac{\hbar}{p} \quad (363)$$

donde p es el momentum.

Y se trabaja en la aproximación en que λ_{red} se mantenga menor a las dimensiones macroscópicas del problema, como espesor del material.

En términos de estado cuántico, el neutrón queda completamente determinado por el vector posición \vec{r} , la dirección de movimiento $\vec{\Omega}$, la energía E y el tiempo t .

Dejando de lado el tiempo, el estado de la partícula queda determinado por 6 variables de estado que generan un espacio de fase 6D, 3 parámetros para el vector posición, 2 para la dirección de movimiento y 1 para la energía. Alternativamente, puede combinarse las 2 variables de dirección de movimiento con la energía en un vector 3D del momentum.

En la aproximación en que puede despreciarse la interacción entre las partículas del haz incidente, de manera que no se consideran las interacciones neutrón-neutrón, y por tanto la ecuación de transporte se reduce a la versión estadística y de carácter lineal en su condición de ecuación diferencial.

Por tanto, tratándose de un modelado estadístico, el formalismo matemático resuelto con simulación Monte Carlo prevé información del comportamiento promedio de las poblaciones de neutrones. Entonces, en casos en que la densidad de neutrones libres en un medio material sea muy baja, perturbaciones estadísticas locales pueden ocasionar diferencias muy apreciables en la distribución de estados.

La cantidad física utilizada para describir la población de neutrones es la densidad angular de neutrones $N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$ que define la densidad de neutrones en el volumen $d\vec{r}$ (d^3r) entorno a \vec{r} viajando en direcciones $d\vec{\Omega}$ entorno a la dirección $\vec{\Omega}$ con energía dE entorno a E en un tiempo dt entorno a t .

El vector de flujo angular de neutrones está dado por $\vec{v}N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$, mientras que el flujo angular Ψ está dado por:

$$\Psi \equiv Nv \quad (364)$$

donde v es la rapidez dada por:

$$\vec{v} = v\vec{\Omega} \quad (365)$$

El flujo angular de neutrones se mide típicamente en unidades de $cm^{-2} s^{-1} steradian^{-1}$.

El flujo escalar, o simplemente el *flujo total* ϕ está dado por:

$$\phi \equiv \int_{4\pi} \Psi d\vec{\Omega} \quad (366)$$

La constante de proporcionalidad que relaciona el flujo escalar ϕ con la tasa de reacción R para el tipo de interacción de interés está dado por:

$$R_j \equiv \Sigma_j \phi \quad (367)$$

donde j indica el tipo de interacción considera. La fluencia angular se calcula integrando respecto del tiempo el flujo escalar, y puede calcularse la corriente de neutrones \vec{J} como sigue:

$$\vec{J}(\vec{r}, E, t) \equiv \int_{4\pi} \vec{v}N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) d\vec{\Omega} \quad (368)$$

13.2.. Modelado Monte Carlo de transporte de neutrones

El proceso de simulación consiste de realizar una serie consecutiva de pasos que intentan emular el movimiento del problema físico en cuestión.

Una vez definido el problema, se realiza la secuencia de caminatas aleatorias (*random walks*) en la geometría de interés. A partir de aquí se ejecutan los pasos descritos en la sección 5.2.3..

13.3.. Fuente puntual monoenergética de neutrones con scattering isotrópico

Considerando una fuente puntual que emite neutrones de energía E_0 dentro de un medio homogéneo e isotrópico para el *scattering* de extensión infinita.

Se plantea determinar el flujo escalar en función de la distancia al origen, colocando el origen en la posición de la fuente puntual emisora.

En relación con situaciones reales, el *scattering* isotrópico puede considerarse una buena aproximación en casos en que se considere neutrones de baja energía dispersando con núcleos pesados. Por lo tanto, esta situación puede no ser representativa de muchos casos típicos de interés en física aplicada a medicina.

En el caso de *scattering* isotrópico, las direcciones inicial y final de la partícula en la colisión no están correlacionadas en el referencial de laboratorio. Por tanto, la dirección de movimiento "post-colisión" debe transformarse desde las coordenadas locales de colisión a coordenadas de laboratorio. Para simplificar, y como tratamiento preliminar, se considerará casos sin absorción y se utilizará un volumen grande pero finito.

Por lo tanto, en el equilibrio, la solución para estado estacionario, el flujo de partículas en el medio se corresponde con la tasa de emisión de la fuente. Puede determinarse la cantidad de colisiones en función de la distancia, y por tanto empleando 367 puede estimarse el flujo promedio en cada región de la muestra.

13.4.. Elementos básicos de programación y ejercitación de Aplicación I

13.4.1.. Transporte de neutrones en medio material

Ejercicio Aplicación I.1: Estudiar la emisión de neutrones monoenergéticos por parte de una fuente puntual, en un medio homogéneo, isotrópico y transportándose en un medio de extensión infinita. Utilizando parámetros físicos necesarios en escalas arbitrarias.

- Considerando sólo scattering elástico, determinar la distribución de distancia total recorrida al cabo de 100 interacciones. Realizar un histograma.
- Determinar la cantidad de colisiones en cascarones esféricos concéntricos centrados en el origen de espesor conveniente.

Ejercicio Aplicación I.2: Estudiar la transmisión de neutrones monoenergéticos que inciden formando un haz perfectamente colimado sobre un medio material acuoso de composición hidrogenada. Trabajando en la aproximación en que sólo se consideran las interacciones entre los neutrones incidentes y los núcleos de H, asignando a la absorción una probabilidad P_{Abs} , estimar el coeficiente de transmisión para un medio material de propiedades acuosas de 10 cm de espesor para un haz incidente de neutrones monoenergético. Elegir cualquier situación de interés y utilizar datos de distribución angular de secciones eficaces disponibles en secciones precedentes. Estudiar el resultado obtenido según el parámetro P_{Abs} .

14.. Trabajo de aplicación: Radioprotección

La Aplicación 2 trata sobre la radioprotección, privilegiando un enfoque sobre aspectos relativos a técnicas convencionales como teleterapia y radiodiagnóstico.

14.1.. Radioprotección: Introducción

La radioprotección se ocupa de diferentes aspectos orientados a determinar los procedimientos y criterios necesarios para permitir el desarrollo de las actividades de irradiación garantizando la seguridad y protección radiológica recomendadas en Protocolos internacionales, a fin de salvaguardar la integridad de los pacientes tratados, el personal que brinda el tratamiento, las personas que ocasionalmente puedan estar expuestas a ciertos riesgos en relación a la radiación utilizada, y la población en su conjunto.

La radioprotección utiliza diferentes conocimientos para establecer los criterios correspondientes a brindar seguridad radiológica, entre ellos están:

- Radiobiología.
- Mecanismos de interacción y efectos biológicos consecuencia de la exposición a la radiación.
- Métodos para establecer niveles de riesgo en base a la información y características de cada situación.
- Clasificación de los diferentes efectos de la radiación sobre sistemas biológicos.
- Respuesta del cuerpo entero y síndromes agudos de la radiación.
- Epidemiología.
- Curvas características de dosis-efectos.
- Efectos tardíos de la exposición a la radiación.

Los efectos de la radiación en la salud, de acuerdo a la Figura a continuación, pueden ser de características determinísticas (como lesiones dérmicas, opacidad de córneas, esterilidad permanente, etc.) o estocásticas (como inducción de cáncer o efectos genéticos). En general, para los efectos determinísticos - que ocurren sobre una cantidad grande de células- existen umbrales de dosis bien definidos, mientras que los efectos estocásticos -que ocurren sobre una o pocas células- no presentan tal umbral; sino que la probabilidad aumenta con el nivel de dosis.

En el caso particular del efecto de la radiación sobre el ADN, la clasificación se muestra esquemáticamente en la siguiente Figura 82:

Existen mecanismos de especial interés, como supresiones y traslocaciones cromosómicas, como muestran las figuras a continuación 83.

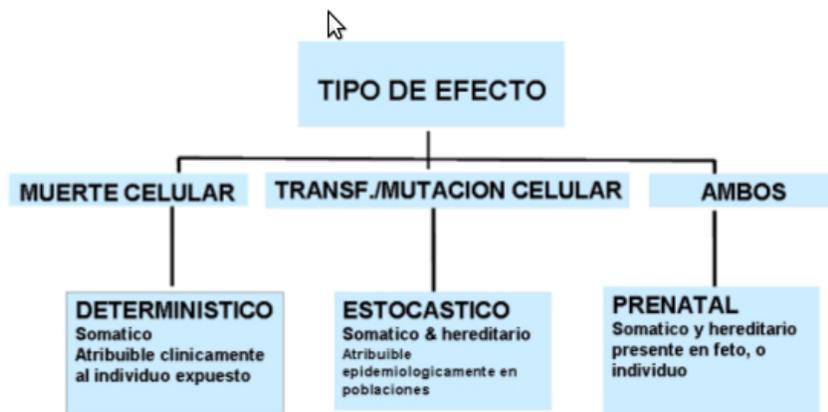


Figura 81. Cuadro esquemático sobre los efectos de la radiación en la salud.

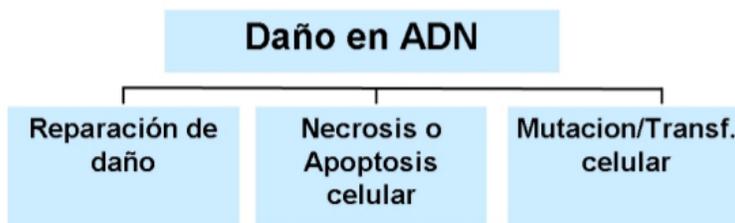


Figura 82. Cuadro esquemático sobre los efectos de la radiación sobre ADN.

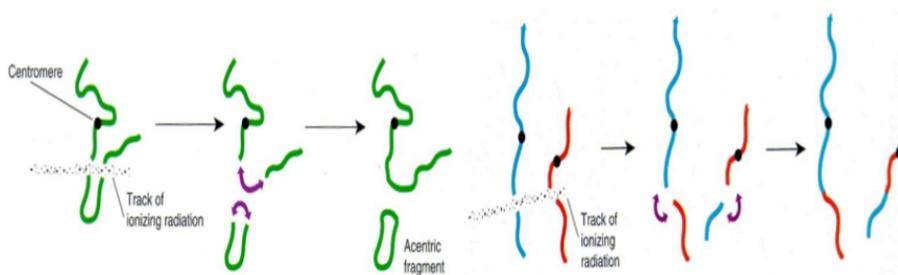


Figura 83. Esquema de interacciones produciendo supresiones *-deletions-* (izquierda) y traslocaciones (derecha) cromosómicas.

14.2.. Modelo para blindajes para aparatos de RX en radiodiagnóstico

En esta sección se brinda un ejemplo sobre cómo calcular blindajes de radioprotección para una facilidad de rayos X para radiodiagnóstico. Los requerimientos específicos, para cada tipo de instalación y facilidad pueden encontrarse en las recomendaciones de diversos organismos internacionales, como el Reporte 49 del *National Council on Radiation Protection and Measurements* (referenciado generalmente como NCRP49).

Los modelos de cálculo para este caso, utilizan en general el modelo básico de *Simpkin* para los blindajes, y posteriores modificaciones de *Petrantonaki*. En este sentido, el blindaje requerido se determina por medio de la siguiente ecuación:

$$D_P B_P + D_S B_S + D_F B_F = P \quad (369)$$

donde $B_P(x)$, $B_S(x)$ y $B_F(x)$ son las transmisiones relativas para la radiación primaria (P), de scattering (S) y de fuga (F) evaluadas para el espesor de blindaje x requerido para reducir la exposición total al nivel P , que representa el nivel semanal límite de tolerancia. D_P , D_S y D_F representan las correspondientes dosis en el punto de interés en ausencia de blindajes.

Los valores D_j con $j = P, S, F$ pueden estimarse, para el caso de facilidades de rayos X de radiodiagnóstico por medio de las siguientes relaciones:

$$D_P = \frac{K_0 W U_P T}{d_{pri}^2} \quad (370)$$

$$D_S = \frac{\alpha_S K_0 W U_S T}{d_{sca}^2 d_{sec}^2} \frac{f}{400} \quad (371)$$

$$D_F = \frac{L W U_F T}{60 I d_F^2} \quad (372)$$

$$(373)$$

donde K_0 es el rendimiento (*output*) relativo de la máquina de radiación en unidades de $\frac{mSv}{(mA \cdot min)}$ a 1m del foco, W es la carga de trabajo en la operación de la máquina en unidades de $mA \cdot min$, U_P es el factor de uso para la componente primaria, T es el factor de ocupación de la máquina; d_{pri} , d_{sca} y d_{sec} son las distancias (en metros) desde el punto focal del tubo de rayos X a: punto de interés para radiación primaria y de fuga y foco a scatterer y scatterer a punto de interés, mientras f establece las dimensiones del campo (en cm^2) en la superficie de entrada del scatterer, α_S representa la fracción de scattering, L es la dosis por fuga en unidades de $\frac{mSv}{h}$ e I es la máxima intensidad de corriente de fluoroscopia, U_S y U_F representan los factores de componentes de scattering y fuga⁵⁸.

Un aspecto fundamental en este tipo de modelos es la conversión entre los límites recomendados, usualmente expresados en dosis equivalente y la exposición correspondiente; expresado típicamente en $[R]$. Por tano, la relación entre Kerma y exposición debe establecerse unívocamente. A tal fin, puede utilizarse la relación $1R = 8,73mGy$. En la aproximación de haces de fotones de radiodiagnóstico, ortovoltaje y megavoltaje; puede utilizarse un factor *RBE* próximo a 1, y por tanto Sv y Gy resultan intercambiables.

Archer et al. propusieron una estimación semi-empírica para la transmisión de rayos X:

$$B_x = \left[\left(1 + \frac{\beta}{\alpha} \right) e^{\alpha \gamma x} - \frac{\beta}{\alpha} \right]^{-\frac{1}{\gamma}} \quad (374)$$

donde α , β y γ dependen fuertemente del potencial acelerador y del material de blindaje (véase la referencia).

⁵⁸a veces desestimados.

14.3.. Cálculo blindajes para aparatos de RX en radiodiagnóstico

Trabajos de *Dixon et al.* muestran relaciones empíricas muy útiles para radioprotección en radiodiagnóstico. La atenuación de la componente primaria, en función del potencial acelerador kV puede estimarse como sigue:

$$B_p(kV) \approx 9,36 \cdot 10^{-13} (kV)^{4,92} \quad (375)$$

y el espesor x requerido para el blindaje se obtiene de:

$$x = \frac{1}{\alpha\gamma} \ln \left[\frac{\frac{B-\gamma+\beta}{\alpha}}{\left(1 + \frac{\beta}{\alpha}\right)} \right] \quad (376)$$

Y estimaciones similares a 375 y 376 se aplican para las componentes de *scattering* y de fuga.

14.4.. Trabajo de aplicación: Elementos de Radiodiagnóstico

Ejercicio Aplicación II: Proponer un esquema para seguridad radiológica⁵⁹ para una facilidad de radiodiagnóstico en base a la figura a continuación 84.

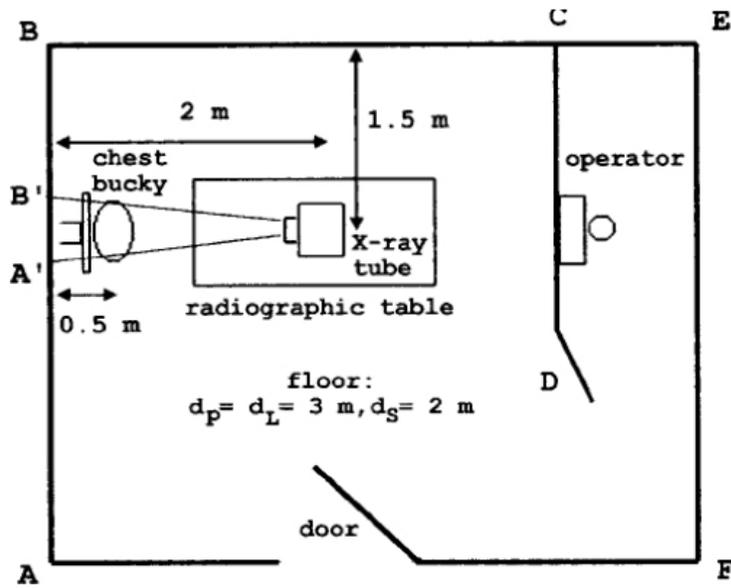


Figura 84. Esquema para una instalación de radiodiagnóstico.

⁵⁹ Investigar en literatura para obtener valores de tolerancia recomendados y demás información necesaria.

15.. Transporte y depósito de energía para haces de protones

La Aplicación 3 se concentra en los aspectos experimentales y de cálculo numérico para estimar cantidades dosimétricas en irradiaciones con técnicas de protonterapia.

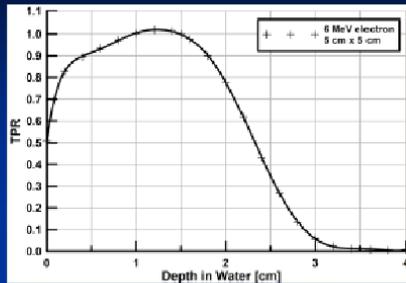
15.1.. Introducción

Consideraciones para la Terapia con protones

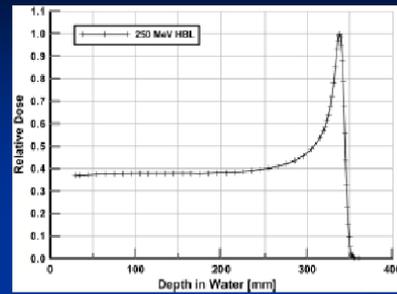
- Repaso de procesos físicos que modelan (determinan) la distribución de dosis.
- Descripción de parámetros asociados al rango de las partículas.
- Estudiar las fuentes de incertezas para aplicaciones terapéuticas.
- Práctico para alumnos: Modelar el depósito de energía en fantoma (agua y hueso) por parte de un haz de protones.

Curso Posgrado FaMAF, Prof. M.
Valente

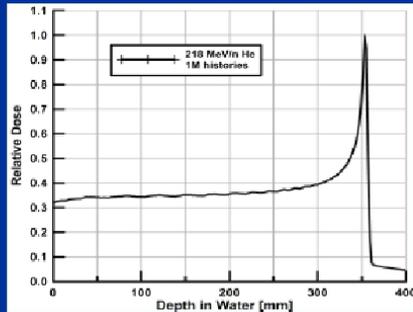
Depósito de dosis en profundidad



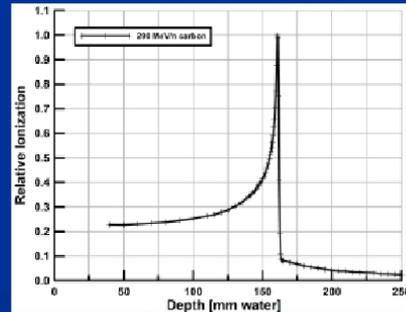
Electrones



Protones 250MeV/u



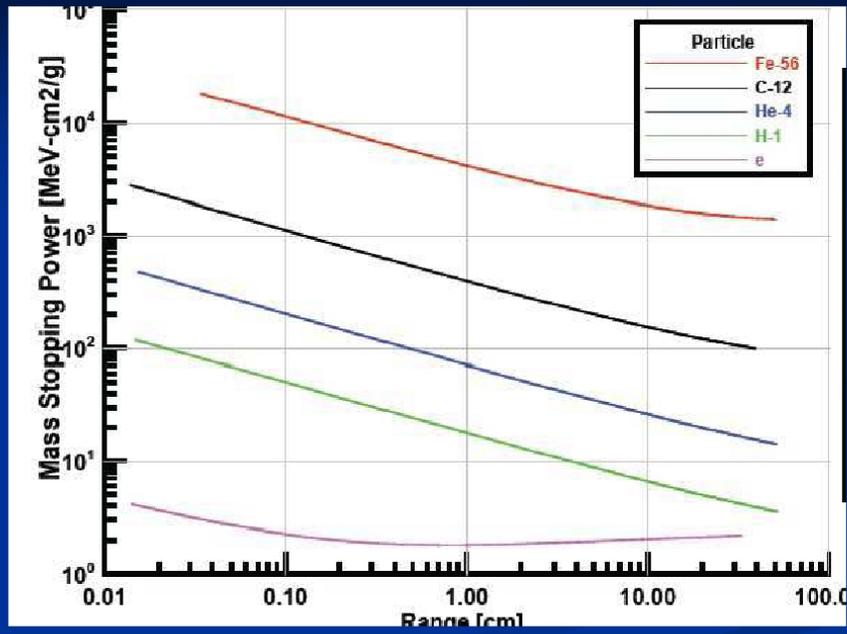
${}^4\text{He}$ 218MeV/u



${}^{12}\text{C}$ 290MeV/u

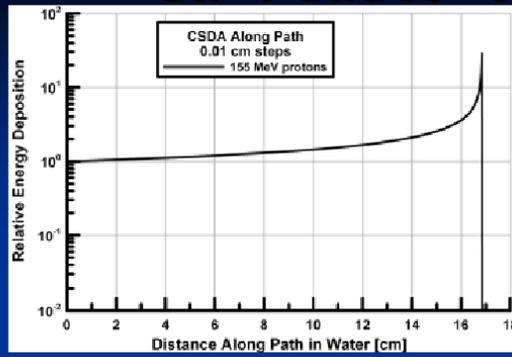
Curso Posgrado FaMAF, Prof. M. Valente

Stopping Power



Curso Posgrado FaMAF, Prof. M. Valente

Cantidades relevantes

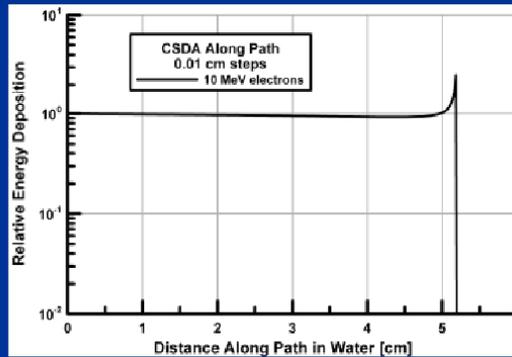


${}^1\text{H } 155\text{MeV/u}$

$$S_{\text{max}}/S_{\text{ent}} \approx 185:1$$

$$R_{\text{CSDA}}(\text{pico})/R_{\text{CSDA}}(\text{ent}) \approx 29:1$$

$$R_{\text{exp}}(\text{pico})/R_{\text{exp}}(\text{ent}) \approx 4:1$$



$e^- 10\text{MeV}$

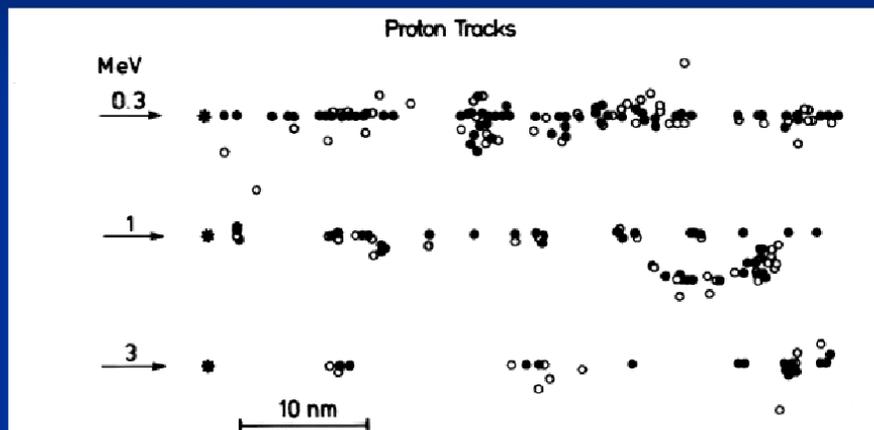
$$S_{\text{max}}/S_{\text{ent}} \approx 27:1$$

$$R_{\text{CSDA}}(\text{pico})/R_{\text{CSDA}}(\text{ent}) \approx 2.5:1$$

$$R_{\text{exp}}(\text{pico})/R_{\text{exp}}(\text{ent}) \approx 1.1:1$$

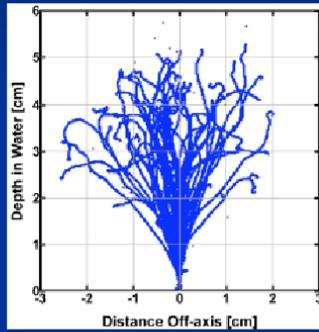
Curso Posgrado FaMAF, Prof. M. Valente

Pérdida Energía de protones en Agua

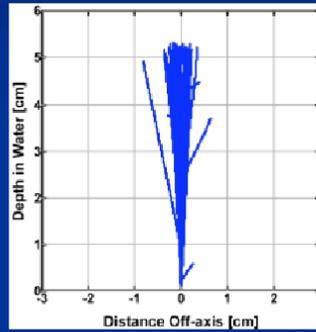


Curso Posgrado FaMAF, Prof. M.
Valente

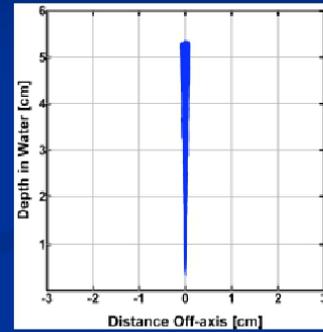
Straggling: haces part. cargadas



10 MeV e^-



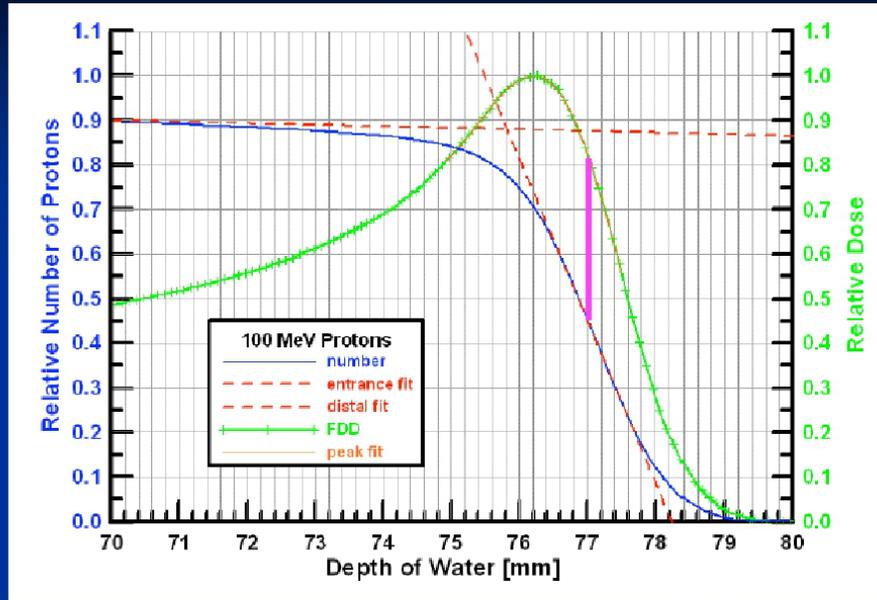
80 MeV/u ^1H



150 MeV/u ^{12}C

Curso Posgrado FaMAF, Prof. M. Valente

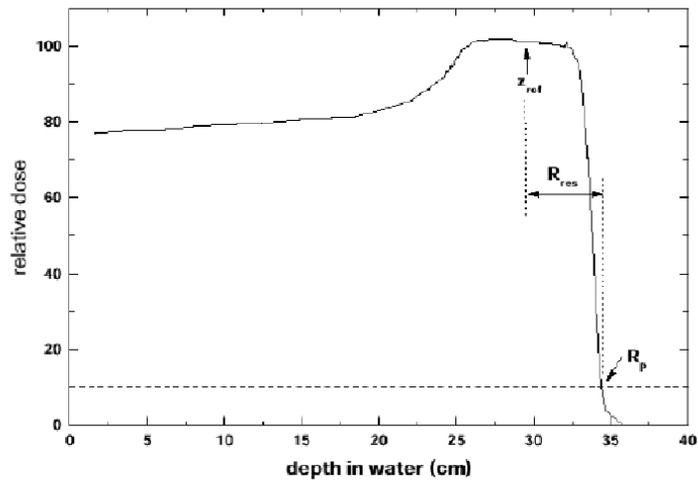
Análisis de curva en profundidad: Parámetros útiles



100 MeV/u ^1H en agua

Curso Posgrado FaMAF, Prof. M.
Valente

Rango Práctico y Rango Residual



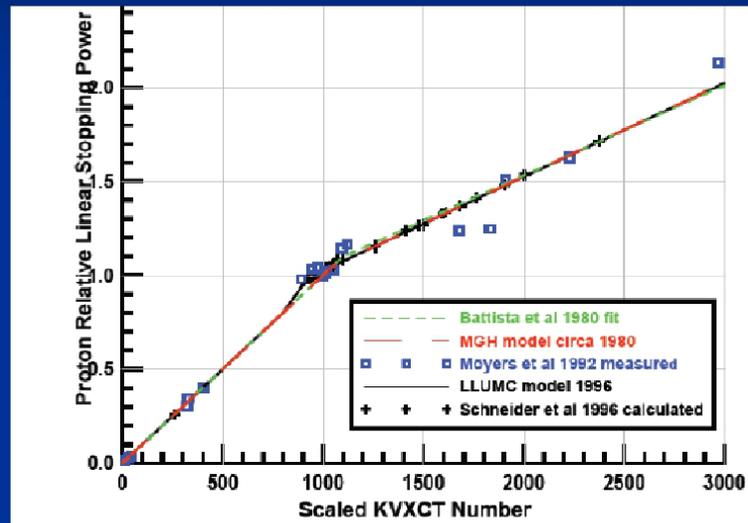
Curso Posgrado FaMAF, Prof. M.
Valente

Incetezas en medición de *standard Range* en agua (caso típico)

- Pared fantoma (agua-equivalente): ± 0.008 mm
- Detector (parallel plate chamber): ± 0.036 mm & ± 0.044 mm
- Seteo de profundidad de ref. ± 0.3 mm
- Calibración sistema scanning: ± 0.23 mm & ± 0.3 mm
- Posic. cam. Ion. Sistema scanning: ± 0.3 mm
- **Inceteza total para rango: ± 0.571 mm**

Curso Posgrado FaMAF, Prof. M.
Valente

Aplicación terapéutica: Incertezas conversión índices CT a Stop. Power relativo



Curso Posgrado FaMAF, Prof. M. Valente

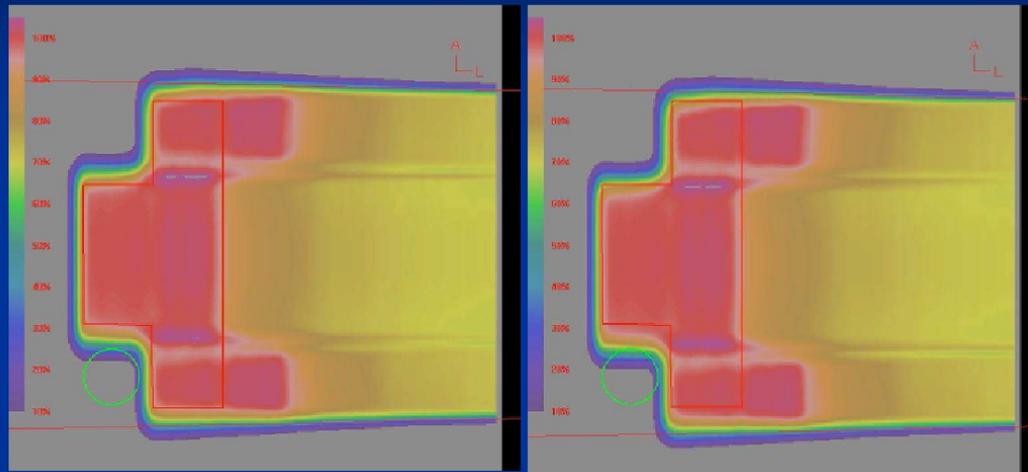
Aplicación terapéutica: Incertezas en bolus agua-equivalente



- Material del bolus (densidad $\pm 0.5\%$): ± 0.4 mm
- Construcción bolus: ± 0.3 mm
- Contaminaciones bolus (inhomog. CT sampling) ± 0.5 mm
- **Total incerteza bolus: $((0.4 + 0.3)^2 + 0.5^2)^{0.5} : \pm 0.9$ mm**

Curso Posgrado FaMAF, Prof. M.
Valente

Aplicación terapéutica: Incertezas posicionamiento bolus

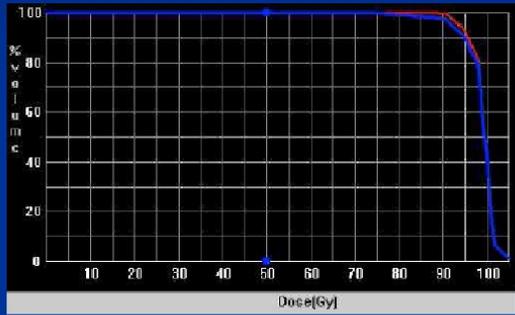


Posición Nominal

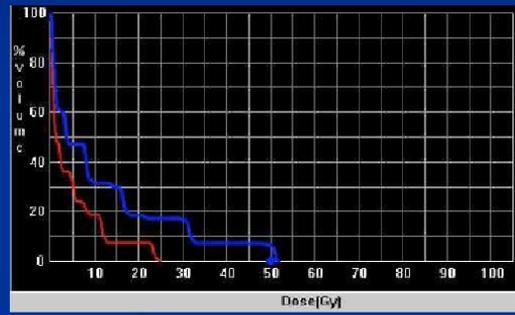
Desalineación de 3mm

Curso Posgrado FaMAF, Prof. M.
Valente

Efecto del *setup* bolus en Aplicación terapéutica



DVH target



DVH tejido sano

Curso Posgrado FaMAF, Prof. M. Valente

Resumen incertezas típicas

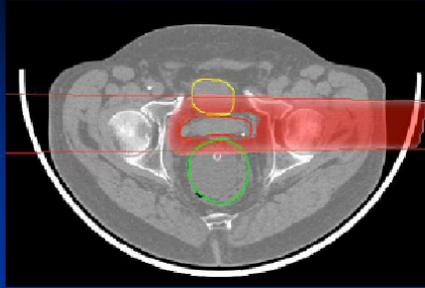
Energía (o rango) medio: ± 0.6 mm
Reproducibilidad energía (o rango): ± 1.0 mm
Bolus: 0.9 mm
Dispositivos Alineamiento: ± 1.0 mm
Total rango: 2mm

Presición #CT: $\pm 2.5\%$
RLSP de tejidos y accesorios: $\pm 1.6\%$
Dependencia energética de RLSP: $\pm 1.0\%$
Conversión #CT a RLSP (tejidos blandos): $\pm 1.5\%$
Total datos paciente (material): 3.5%

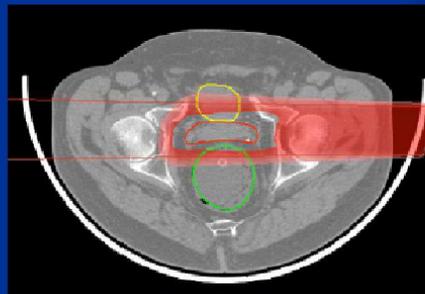
Posición relativa bolus en paciente: variable
Straggling por heterogeneidad: variable
Movimiento paciente: variable

Curso Posgrado FaMAF, Prof. M.
Valente

Distribución deseada



Distribución planificada

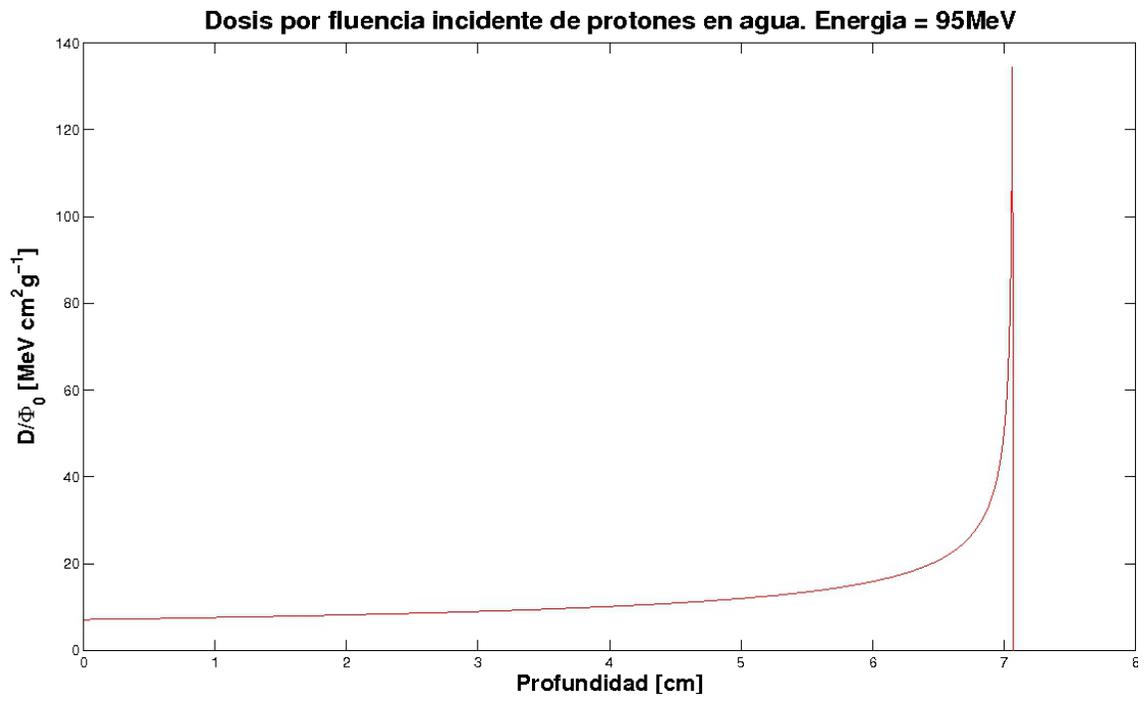


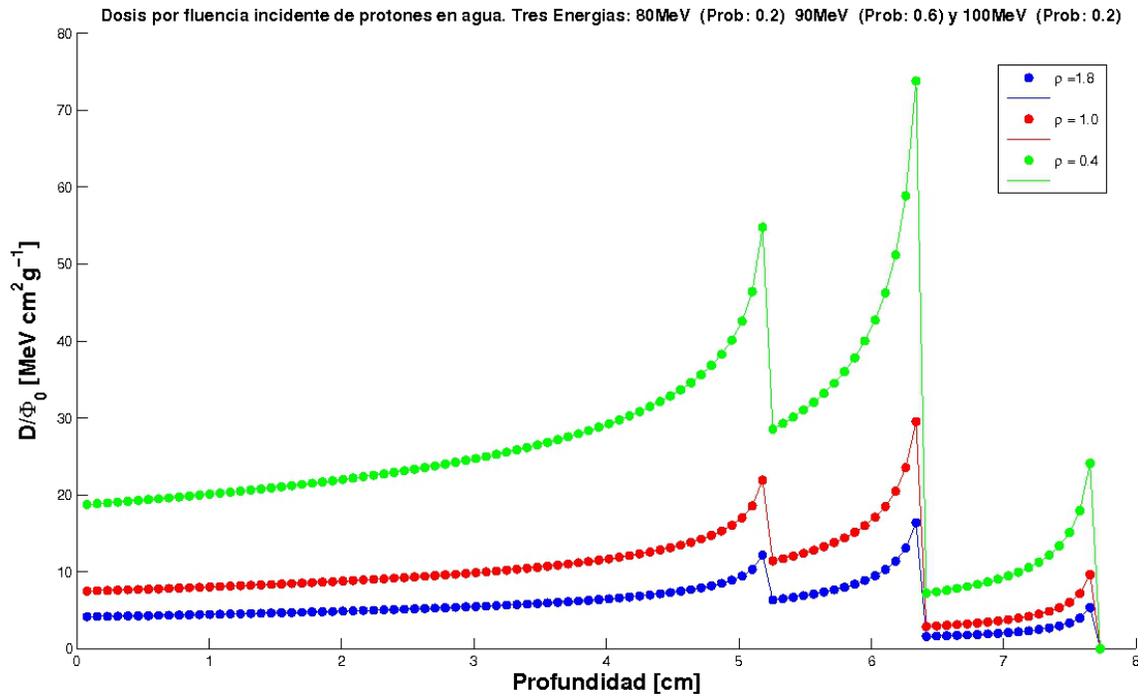
Curso Posgrado FaMAF, Prof. M.
Valente

Resumen

- La forma de la curva de distribución de dosis en profundidad para iones livianos depende de varios procesos.
- El término “rango” puede tener diferentes significados.
- La determinación de la profundidad de penetración de un haz de iones livianos en paciente contiene incertezas: deben realizarse consideraciones específicas!

Curso Posgrado FaMAF, Prof. M.
Valente





```
Editor - C:\Documents and Settings\Admin\Mis documentos\MAURO\2010\ODLLENJIA&ALUMNOS\CursoPG_ElemDosim\APLICACIONES\Aplic2_DosimProtones\MC_Lm*
File Edit Text Go Call Tools Debug Desktop Window Help
- 1.0 + + 1.1 x
Stack: Base f%
1 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
2 %
3 %                               MC1
4 %
5 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
6 clear all;
7 % Parametros iniciales
8
9 EO = 2; % [MeV]
10 XO = 0; % [cm]
11
12 % Modelo de scattering
13 %S = 1/E;
14 %DX = exp(-E);
15
16 % Tracking
17
18 X = XO;
19 E = EO;
20 n = 0; % contador prof
21 DX = 0.001;
22 while E>0;
23
24     %DX = exp(-E); % Modelo
25     %DX = 0.001;
26     n = n + 1;
27     X = X + DX;
28     S = 1/(E); % Modelo
29     E = E - DX*S;
30     D(n) = DX*S;
31 end
32 %
33 plot(D)
34
35
Dosis_Prof_3.m x Dosis_Prof.m x MC_Lm* x
script Ln 34 Col 1 OVR
Inicio C:\Docume... C:\Docume... Te\inc\Gen... C:\Docume... EDHCHM01... Aplic2_Ter... Dosimetria... MATLAB 7... Editor - C... 12:09 a.m.
```

Figura 85. Ejemplo básico-rudimentario, a modo ilustrativo (podría contener inconsistencias) describiendo opciones para implementar un cálculo de deposición energética sobresimplificado.

15.2.. Trabajo de aplicación: Terapia con protones

Ejercicio Aplicación III.1: Determinar la distribución de dosis resultante de utilizar 4 campos paralelos y opuestos (técnica *box*) con tamaño de campo de $10\text{cm} \times 10\text{cm}$ irradiando isocéntricamente un fantoma cúbico de 30cm de lado con un haz de protones de 350MeV .

1. Realizar el ejercicio para un fantoma homogéneo de agua y otro homogéneo de hueso compacto⁶⁰. Analizar y discutir los resultados.
2. Repetir el cálculo del ejercicio anterior corrigiendo por la presencia de 1 metro de aire en el entorno del fantoma de agua.
3. Evaluar, para un haz filiforme de protones de energía E_0 irradiando un fantoma agua-equivalente, el efecto de la energía media de ionización $\langle I \rangle$, para variaciones del 10% entorno a 75 eV .

Ejercicio Aplicación III.2: Reproducir los resultados de densidad de ionización reportados en una de las figuras precedentes, para la pérdida de energía por parte de los protones (*proton track*) para un haz de protones de 100 , 10 y 1 MeV/n .

Ejercicio Aplicación III.3: Reproducir los resultados de las curvas en profundidad, análogo a lo reportado para 100 MeV/n en agua, pero para un haz de 200 MeV/n en agua.

Ejercicio Aplicación III.4: Construir un SOBP para irradiar un PTV (*target*) ubicado en el centro de un fantoma cúbico agua-equivalente, considerando al fantoma de 20 cm de lado, al PTV esférico agua-equivalente de 2 cm de diámetro.

1. Obtener el DVH en el PTV y en el fantoma completo irradiando con un único SOBP (sin rotar ni combinar) de protones.
2. Comparar el DVH obtenido con el correspondiente a un haz de fotones de ^{60}Co

⁶⁰Recavar información necesaria en bases de datos de acceso libre.

16.. BNCT: dosimetría de campo mixto

La Aplicación 4 trata sobre una situación de particular interés en lo que refiere a la dosimetría de campo mixto. La técnica conocida como *Boron Neutron Capture Therapy (BNCT)* consiste del uso de columnas neutrónicas para aplicaciones terapéuticas.

Debido a la naturaleza de la columna neutrónica producida en reactores especialmente adaptados, resulta que el haz terapéutico está compuesto por varias componentes, entre ellas, neutrones veloces, neutrones térmicos, neutrones epitérmicos, rayos gamma y fondo Cerenkov.

16.1.. Introducción

La exposición se basa en el trabajo **DOSE DISTRIBUTIONS IN PHANTOMS IRRADIATED IN THERMAL COLUMNS OF TWO DIFFERENT NUCLEAR REACTORS** de G. Gambarini et al. disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/~valente/Documents/DidacticsMaterial/gambarini2007.pdf>

16.2.. Uso de técnica de cálculo Monte Carlo para BNCT

Puede calcularse el transporte de neutrones y las demás componentes de la columna neutrónica utilizando códigos de simulación Monte Carlo, como FLUKA, GEANT, MCNP y otros.

La geometría del problema, incluyendo el núcleo (*core*) del reactor, los moderadores de la columna térmica y el fantoma conteniendo los dosímetros FriXy se muestra en la figuras a continuación.

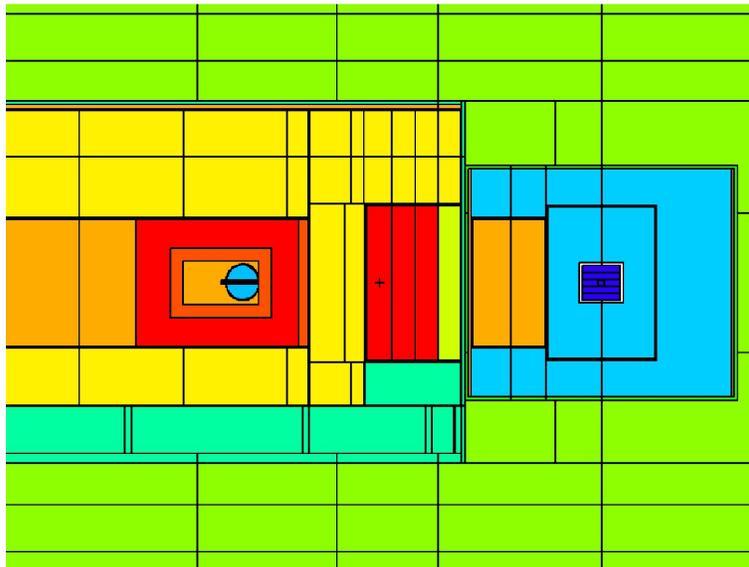


Figura 86. Geometría de irradiación (vista $y=0$)

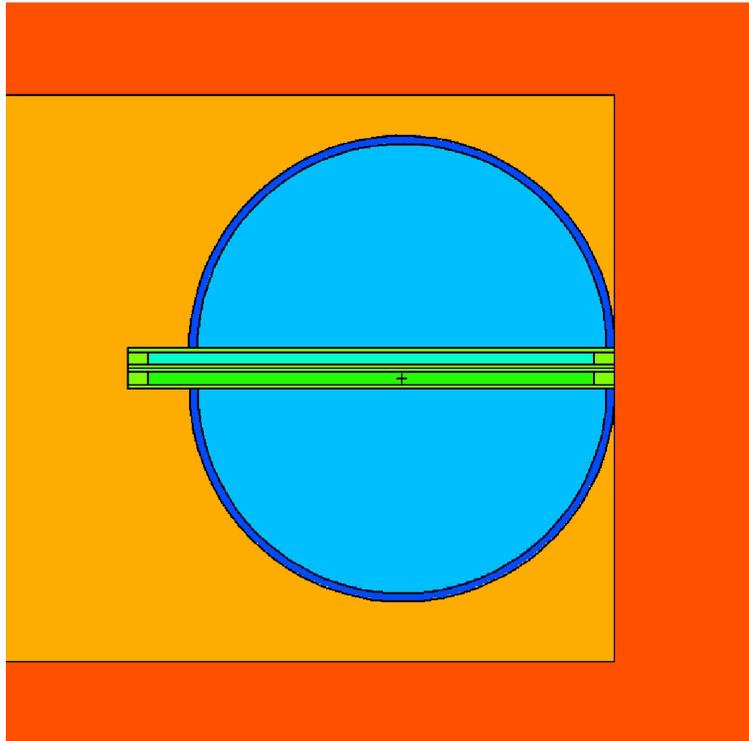


Figura 87. Geometría de fantoma conteniendo dosímetros FriXy (vista $y=0$)

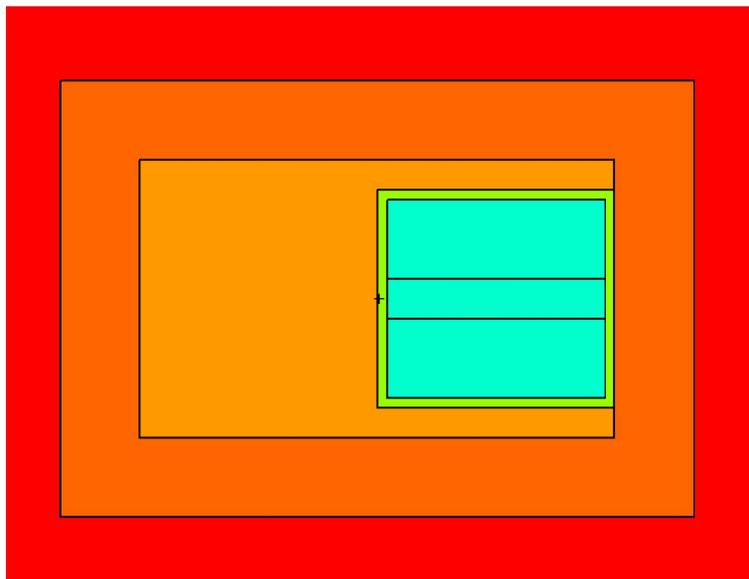


Figura 88. Sector de boca de columna térmica y fantoma con dosímetros FriXy (vista $z=5\text{mm}$)

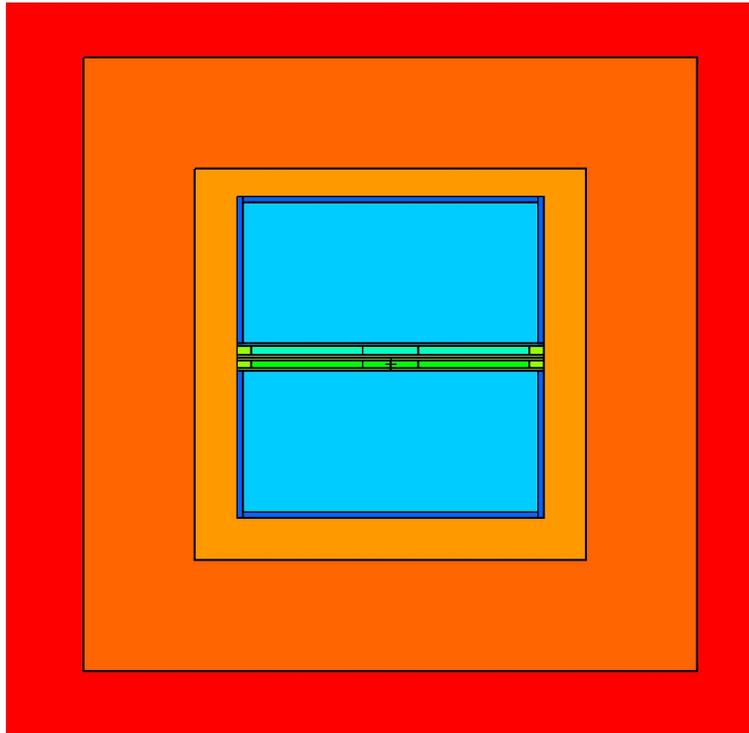


Figura 89. Sector de boca de columna térmica y fantoma con dosímetros FriXy (vista $x=0$)

16.3.. Información teórica y experimental

Los resultados obtenidos por medio del método Monte Carlo proporcionan estimaciones para el flujo neutrónico total medio y error en función de la profundidad dentro de dosímetro standard y borado. Se observa también que la parte del flujo con energía menor a $0,4eV$ corresponde al 96% - 99% del flujo total.

De manera análoga, se obtiene la dosis debida a la contribución gamma, y puede verse que realizando un cálculo para la dosis gamma contabilizando o no el transporte de electrones se obtienen diferencias entre +1% y -9% (errores relativos intrínsecos del cálculo MC de 3% a 5%) entonces, se considera que no hay diferencias significativas entre considerar o no el transporte de electrones.

En el dosímetro borado la dosis debida a reacciones $^{10}B(n, \alpha)$ corresponde (en promedio) al 99,4% del total de todas las reacciones.

La dosis debida a neutrones con energía menores a $0,4eV$ corresponde (en promedio) al 99,5% de la dosis neutrónica total.

La dosis media en el dosímetro standard es $4,6 \cdot 10^5$ Gy/s. Por lo tanto, es el 0,7% del total de dosis en el caso del dosímetro borado (la media es $6,8 \cdot 10^3$ Gy/s).

Considerando el transporte de electrones, las diferencias varía entre +4% al -11%. (errores relativos intrínsecos del cálculo MC de 3% a 5%) entonces, se considera que no hay diferencias significativas entre considerar o no el transporte de electrones.

16.3.1.. La técnica dosimétrica FriXy

La diferencia de densidad óptica (ΔOD), en el pixel (m,n) , que resulta ser proporcional a la dosis absorbida, se calcula como sigue:

$$\Delta OD(m,n) = \log_{10} \left[\frac{GL_{NI}(m,n)}{GL_I(m,n)} \right] \quad (377)$$

donde $GL_{NI}(m,n)$ y $GL_I(m,n)$ indican los niveles de gris para el pixel (m,n) en el caso no irradiado e irradiado, respectivamente.

Entonces, la dosis (D) se calcula con un procedimiento de calibración, obteniéndose:

$$D(m,n) = C_k \cdot \Delta OD(m,n) \quad (378)$$

El coeficiente de calibración C_k debe obtenerse en cada caso según la sensibilidad del detector a cada tipo de radiación incidente (k), es decir para cada componente dosimétrica involucrada.

16.4.. Trabajo de aplicación: BNCT y dosimetría de campo mixto

Ejercicio Aplicación IV.1:

En una situación experimental, los resultados experimentales muestran que calibrando dosímetros FriXy, se obtuvieron coeficientes de calibración:

Dosímetro standard (sin ^{10}B) irradiado con fotones: $C_1^{-1} = 0,0071 \pm 0,0005$

Dosímetro borado (36ppm ^{10}B) irradiado con fotones: $C_2^{-1} = 0,0061 \pm 0,0004$

Se hipotiza que la componente disimétrica debida a neutrones térmicos y epitérmicos ($D_{nth\&epith}$) puede obtenerse de la sustracción de la componente gamma al dosímetro borado, y contabilizando la sensibilidad (A) correspondiente para el tipo de radiación (neutrones de baja energías, es decir:

$$D_{nth\&epith}(m,n) = A \cdot [D_{dosim^{10}B}(m,n) - D_{dosimstan.}(m,n)] \quad (379)$$

En base a lo expuesto, los datos experimentales que serán provistos y la bibliografía del curso:

1. Utilizar la información disponible (suponiendo que las correcciones por tensión y reproducibilidad fueron ya aplicadas) para obtener una estimación del coeficiente de sensibilidad neutrónica para los dosímetros FriXy, considerando los datos siguientes: Se irradia durante 40 minutos un fantoma T-E conteniendo (como muestran las figuras del método MC un par de dosímetros FriXy, uno standard y uno borado). Se provee de imágenes y perfiles correspondientes.
2. Una vez determinado el coeficiente de sensibilidad del detector para neutrones térmicos y epitérmicos (A), estimar la dosis biológica equivalente en tejido si se considera un coeficiente de efectividad radiobiológica RBE medio de 10.
3. En base a la información disponible, esbozar un gráfico 2D del depósito de dosis debido a la componente neutrónica térmica y epitérmica en profundidad y comparar (cualitativamente) con los resultados MC.
4. Utilizando una técnica alternativa (hojuelas de activación neutrónica), se obtuvieron los siguientes resultados (errores estimados no superiores al 12% en cada caso):
 $\dot{D}(Prof = 11mm) = 0,0098Gy/s$ con un flujo de $3,1400 \cdot 10^9 cm^{-2}s^{-1}$
 $\dot{D}(Prof = 45mm) = 0,0055Gy/s$ con un flujo de $1,7650 \cdot 10^9 cm^{-2}s^{-1}$
 $\dot{D}(Prof = 90mm) = 0,0041Gy/s$ con un flujo de $1,3200 \cdot 10^9 cm^{-2}s^{-1}$.
Comparar los valores de tasa de dosis obtenidos con MC, método FriXy y hojuelas de activación neutrónica. (implementar criterios propios, cuando sea necesario; justificarlos!)⁶¹.
5. Analizar y discutir todos los resultados obtenidos.
6. Evaluar cuantitativa y críticamente la potencialidad y limitaciones del método propuesto.

⁶¹Nótese que las eventuales variaciones en potencia del reactor pueden ser tenidas en cuenta a través de la información provista!

Ejercicio Aplicación IV.2:

Estimar la transmisión de una columna de neutrones incidiendo sobre una muestra homogénea de espesor ζ formada de una mezcla ideal de agua y boro. Considerar 3 concentraciones relativas (en masa) de boro natural: 0, 1 y 10%, despreciando alteraciones en la densidad másica.

1. Aplicarlo al caso de energía inicial rápida de 10 keV, para 3 valores de ζ .
2. Aplicarlo al caso de energía inicial epitérmica de 1 eV, para 3 valores de ζ .
3. Aplicarlo al caso de energía inicial térmica, para 3 valores de ζ .

Ejercicio Aplicación IV.3:

Realizar una configuración similar a las figuras 86 a 89 para obtener mapas de dosis $D(n, m)$ en pares/culpas de dosímetros de estratos de la técnica FriXy, y aplicar la metodología para estimar la componente terapéutica de un campo mixto idealizado/sobresimplificado.

17.. Detectores de radiación estudiados con técnicas Monte Carlo: Medicina nuclear

La presente Aplicación se concentra en estudiar y caracterizar detectores de radiación por medio de técnicas de simulación Monte Carlo. En particular, se utilizará el modelado del transporte de fotones y electrones, empleando el código fuente PENELOPE, para estudiar la sensibilidad y eficiencia de detectores de estado sólido típicamente empleados en medicina nuclear o aplicaciones clínicas.

17.1.. Introducción

Estudiar las generalidades del código PENELOPE para realizar este práctico de Aplicación.

En particular, léase el manual para el usuario y realícense los ejercicios de tutorial, para aprender a generar ejecutables a partir de adaptaciones propias y ejemplos que prové PENELOPE. También será necesario comprender los mecanismos para definir geometría propias en la simulación.

17.2.. Ejercicio: Estudio y caracterización de un detector tipo pozo

Véase el detector de pozo estudiado durante el curso y presentado esquemáticamente en la siguiente figura 90:

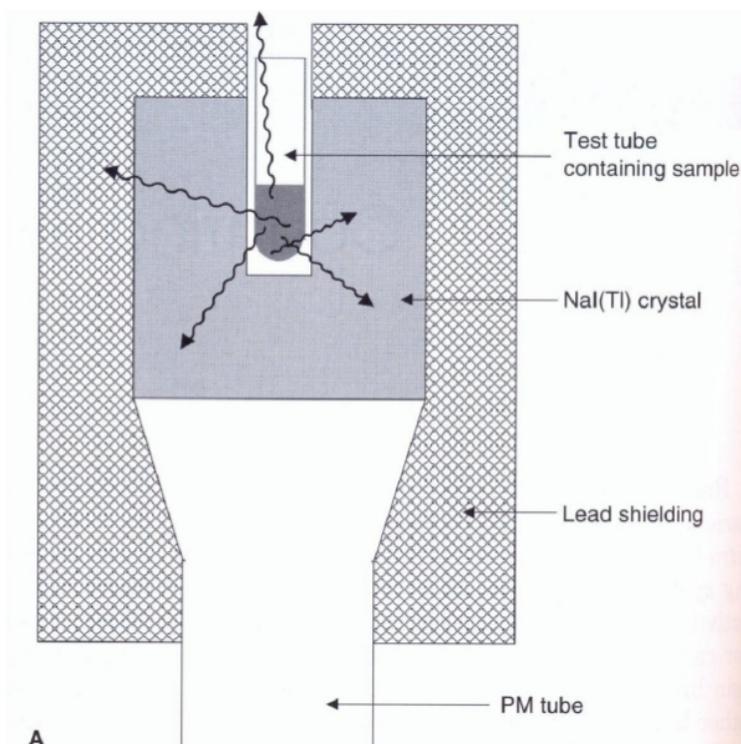


Figura 90. Esquema de detector de pozo.

17.2.1.. Realizar los siguientes pasos del ejercicio:

1. Definir la geometría aproximada del detector en un código MC.

2. Utilizando ^{99}Tc , cuyas propiedades de emisión se detallan en la tabla a continuación, como muestra en el portamuestras, determinar la eficiencia de detección para cada canal energético.
3. Utilizando ^{99}Tc , cuyas propiedades de emisión se detallan en la tabla a continuación, como muestra en el portamuestras, determinar la eficiencia de detección (implementando las aproximaciones necesarias, bajo criterios propios explícitamente justificados) para, al menos, 3 diferentes volúmenes de muestra.
4. Analizar y discutir los resultados obtenidos en los ítems anteriores.
5. Discutir críticamente cuáles son las potencialidades y limitaciones del método empleado para caracterizar el detector de pozo.

Energía [MeV]	Prob. u.a.
$1.749 \cdot 10^{-3}$	$9.14 \cdot 10^{-1}$
$2.174 \cdot 10^{-3}$	$7.57 \cdot 10^{-2}$
$1.405 \cdot 10^{-1}$	$8.89 \cdot 10^{-1}$
$1.194 \cdot 10^{-1}$	$8.79 \cdot 10^{-2}$
$1.374 \cdot 10^{-1}$	$9.67 \cdot 10^{-3}$
$1.377 \cdot 10^{-1}$	$6.10 \cdot 10^{-4}$
$1.378 \cdot 10^{-1}$	$3.01 \cdot 10^{-4}$
$1.400 \cdot 10^{-1}$	$1.92 \cdot 10^{-3}$
$1.405 \cdot 10^{-1}$	$3.71 \cdot 10^{-4}$
$1.216 \cdot 10^{-1}$	$6.91 \cdot 10^{-3}$
$1.396 \cdot 10^{-1}$	$1.17 \cdot 10^{-3}$
$1.399 \cdot 10^{-1}$	$2.43 \cdot 10^{-4}$
$1.837 \cdot 10^{-2}$	$4.03 \cdot 10^{-2}$
$1.825 \cdot 10^{-1}$	$2.12 \cdot 10^{-2}$
$2.062 \cdot 10^{-1}$	$6.88 \cdot 10^{-3}$

Figura 91. Principales líneas de emisión gamma del ^{99}Tc .

18.. Detectores de radiación estudiados con técnicas Monte Carlo: Dosimetría de radiaciones

La presente Aplicación se concentra en estudiar y caracterizar detectores de radiación por medio de técnicas de simulación Monte Carlo. En particular, se utilizará el modelado del transporte de fotones y electrones, empleando el código fuente PENELOPE, para estudiar la sensibilidad y eficiencia de detectores de estado sólido típicamente empleados en medicina nuclear o aplicaciones clínicas.

18.1.. Ejercicio: Estudio y caracterización de una cámara de ionización

En base a las especificaciones técnicas de la cámara de ionización *water-proof* PTW 30013, estudiar la respuesta de la misma a radiación ionizante.⁶².

18.1.1.. Realizar los siguientes pasos del ejercicio:

1. Definir la geometría y propiedades físicas de la cámara de ionización en un código MC, siguiendo las especificaciones del fabricante.
2. Definir una fuente de radiación de megavoltaje ($E=1.25$ MeV, equivalente a ^{60}Co), colocar la cámara de ionización dentro de un fantoma agua equivalente colocado en el isocentro de la configuración de irradiación.
3. Estudiar qué cantidad debe contabilizarse como respuesta del detector para fines dosimétricos.
4. Irradiar el fantoma conteniendo la cámara de ionización con haz de ^{60}Co .
5. Realizar una validación del método propuesto por medio de dosimetría de kilovoltaje: Diseñar un experimento para dosimetría en haz de rayos X de kilovoltaje midiendo dosis en profundidad y, midiendo las características espectrales de la fuente, realizar la simulación correspondiente.
6. Analizar y discutir todos los resultados obtenidos en los ítems anteriores.
7. Discutir críticamente cuáles son las potencialidades y limitaciones del método empleado para caracterizar el detector de pozo.

⁶²Toda la información requerida y los elementos están disponibles en el laboratorio LIIFAMIR^X

19.. Efecto de campos electromagnéticos en el transporte de radiación ionizante para aplicaciones en física médica

La presente Aplicación se concentra en evidenciar los efectos derivados de la presencia de campo eléctrico o magnético externo aplicado sobre el sistema de estudio.

En base a los modelos incluidos en los códigos PENELOPE Y FLUKA para el tratamiento de campos EM, se proponen los siguientes estudios.

19.1.. Efecto del campo eléctrico en la generación de pares iónicos en dosímetro gaseoso

Definir una configuración geométrica apropiada para un dosímetro gaseoso en los códigos PENELOPE y FLUKA. A partir de ello, realizar los siguientes pasos:

1. Definir un haz de fotones de kilovoltaje incidente monoenergético con un área transversal que incluya todo el volumen del dosímetro gaseoso al irradiarlo.
2. Obtener la cantidad de carga (pares iónicos, ionizaciones) que se genera en el volumen sensible por unidad de fotón incidente, con una incerteza inferior al 3%.
3. Incorporar la presencia de un campo eléctrico (uniforme), lo más representativo posible de los dispositivos reales, y obtener cantidad de carga (pares iónicos, ionizaciones) que se genera en el volumen sensible por unidad de fotón incidente para 3 diferentes intensidades de campo eléctrico entorno al valor de referencia del dispositivo.
4. Repetir los pasos anteriores con ambos códigos MC y evaluar comparativamente los resultados.

Analizar y discutir los resultados obtenidos.

19.2.. Efecto del campo magnético en la respuesta de cámaras de ionización

Definir una configuración geométrica apropiada para una cámara de ionización tipo Farmer y una de tipo plano-paralela en los códigos PENELOPE y FLUKA. A partir de ello, realizar los siguientes pasos:

1. Definir un haz de fotones representativo de un acelerador VARIAN operando a 6 MV para un campo de $3 \times 3 \text{ cm}^2$ y $\text{SSD} = 100 \text{ cm}$.
2. Posicionar las cámaras en condiciones dosimétricas de referencia en un fantoma agua-equivalente y obtener estimaciones de la dosis absorbida en los correspondientes volúmenes sensibles, con una incerteza inferior al 10%.
3. Incorporar la presencia de un campo magnético uniforme de intensidad $|\vec{B}|$, alineado con el eje óptico del haz incidente, para campos de 0.1, 1 y 10 T, y obtener estimaciones de la dosis absorbida en los correspondientes volúmenes sensibles, con una incerteza inferior al 10%.
4. Alinear el campo magnético perpendicular al eje óptico del haz incidente y reiterar el paso anterior.
5. Repetir los pasos anteriores con ambos códigos MC y evaluar comparativamente los resultados.

Analizar y discutir los resultados obtenidos.

Referencias

- [1] S. Wong. *Introductory Nuclear Physics* Wiley, 2nd Ed., 2004.
- [2] B. R. Martin. *Nuclear and particle physics* Wiley Sons., 2006.
- [3] I. Bankman. *Handbook of medical image processing and analysis*. ElSevier Academic Press, California, 2009.
- [4] Seibert A. Leidholt E. Boone J. Bushberg, J. *The essential physics of medical imaging*. Lippincot Williams and Wilkins, 2001.
- [5] T. Buzug. *Computed Tomography*. Springer-Verlag, 2008.
- [6] P. Suetens. *Fundamentals of Medical Imaging*. Cambridge University Press, 2nd ED, 2009.
- [7] P. Duvauchelle, N. Freud, V. Kaftandjian, and D. Babot. A computer code to simulate x-ray imaging techniques. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, (170):245–258, 2000.
- [8] S. España, J. L. Herraiz, E. Vicente, J. J. Vaquero, M. Desco, and J. M. Udias. Penelopet, a monte carlo pet simulation tool based on penelope: features and validation. *Phys. Med. Biol.*, (54):1723–1742, 2009.
- [9] G. Tirao, C. Quintana, and M. Valente. Mammography image quality optimisation: a monte carlo study. *Int. J. Low Radiation*, 7(4):276–297, 2010.
- [10] C. Epstein. *Introduction to the mathematics of medical imaging*. Siam, Philadelphia, 2003.
- [11] G. Saha. *Physics and radiobiology of nuclear medicine*. Springer-Verlag, 2006.
- [12] J.M. Fernández-Varea, J. empau and F. Salvat, S.; Fernández-Varea. *PENELOPE-2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*. Nuclear Energy Agency, Barcelona, Spain, 2009.
- [13] F.H. Attix. *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*. Wiley-VCH, 1987.
- [14] S Dupree and S. Fraley. *A Monte Carlo premier*. Kluwer-Plenum, New York., 2002.
- [15] P. Bevington and D. Keith Robinson. *Data reduction and error analysis*. McGraw Hill, 2003.
- [16] H. Tijms. *Understanding Probability: Chance Rules in Everyday Life*. Cambridge University Press, 2004.
- [17] M. Ljungberg, S. Strand, and M. King, editors. *Monte Carlo calculations in nuclear medicine: Applications in diagnostic imaging*. Institute of Physics Publishing, 1998.
- [18] J. Ducote and S. Molloi. Scatter correction in digital mammography based on image deconvolution. *Physics in Medicine and Biology*, Vol. 55(No. 5):1295–1309, March 2010.
- [19] C. Arvanitis and R. Speller. Quantitative contrast-enhanced mammography for contrast medium kinetics studies. *Physics in Medicine and Biology*, Vol. 54(No. 5):6041–6064, September 2009.
- [20] A. Kak and M. Slaney. *Principles of Computerized Tomographic Imaging*. IEEE Press, New York, 2001.
- [21] S. Bushong. *Computed Tomography*. Mcgraw-Hill, 2000.
- [22] M. Stabin. *Fundamentals of nuclear medicine dosimetry*. Springer Science+Business Media, Spring Street, New York, NY 10013, USA, 2008.

- [23] Gifford, K., Horton, J., Wareing, T., Failla, G., Mourtada, F. Comparison of a finite-element multigroup discrete-ordinates code with Monte Carlo for radiotherapy calculations. *Phys. Med. Biol.*, 51:2253–2265, 2006.
- [24] Aubin, J., Keyvanloo, A., Vassiliev, O., Fallone, B. A deterministic solution of the first order linear Boltzmann transport equation in the presence of external magnetic fields. *Med. Phys.*, 42:780–793, 2015.
- [25] Berger, M. J. Monte Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles. *Methods Comput. Phys.*, 1: 135–215, 1963.
- [26] Bouchard, H., Bielajew, A. Lorentz force correction to the Boltzmann radiation transport equation and its implications for Monte Carlo algorithms. *Phys. Med. Biol.*, 60: 4963–4971, 2015.