# ELEMENTOS DE CÁLCULO DOSIMÉTRICO PARA HADRONTERAPIA Y CAMPOS MIXTOS

Mauro Valente<sup>1,2\*</sup>

<sup>1</sup> CONICET, Av. Rivadavia 1917, Buenos Aires; Argentina
 <sup>2</sup> Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria; Argentina

Primer Semestre de 2025



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

<sup>\*</sup>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, 2022 y la presente versión 2025, 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  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ .
- 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.
- 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 <sup>14</sup>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.
- 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 electromagéticos 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 elemenos 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 exámen

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 exámen final formal individual e integrador de los contenidos del curso, en modalidad escrita.

# Índice

1	Prop	iedades generales del núcleo atómico	6				
	1.1	Evolución del modelo nuclear	6				
	1.2	Evidencia experimental en el desarrollo histórico de la física nuclear	7				
		1.2.1 Separación electromagnética de iones	7				
		1.2.2 Abundancia natural de isótopos	7				
		Separación de isótopos	8				
		Estabilidad nuclear	8				
		Características de las fuerzas nucleares	9				
	1.6	Compendio de propiedades nucleares	10				
	1.7	Masa y energía de ligadura nuclear	11				
	1.8	Barrera de potencial nuclear	12				
	1.9	Modelo nuclear de Von Weizsäcker	13				
	1.10	Spin y momentos nucleares	14				
	1.11	Ejercitación del Capítulo I	17				
		1.11.1 Conceptos básicos de programación	17				
		1.11.2 Haz de partículas cargadas en campo magnético	17				
		1.11.3 Estabilidad y propiedades del núcleo	18				
_			• •				
2		lema de dos cuerpos a baja energía para nucleones	20				
	2.1	Deuterón en potencial central	20				
	2.2	Scattering $p^0 - p^+$	22				
	2.3	Scattering $p^+ - p^+$	23				
		Comparación del modelo con datos experimentales	25				
		Apéndice: Revisión de potenciales cuánticos	26				
	2.6	Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo 2	29				
		2.6.1 Análisis de elementos de estadística y conceptos básicos de modelos nucleares	29				
3	Prob	lema de dos cuerpos a energías intermedias	31				
		Scattering $n^0 - p^+$ para energías entre 10 y 30 MeV	31				
	3.2	Scattering $n^0 - p^+$ para energías superiores a 30 MeV	33				
	3.3	Scattering $p^+ - p^+$ para altas energías	33				
	3.4	Modelo de Yukawa de intercambio de piones	35				
		Cálculo de Secciones Eficaces de interacción $n^0 - p^+$ a energías intermedias	36				
		Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo 3	39				
		3.6.1 Scattering de nucleones	39				
4		Corrimiento de fase como evidencia de scattering $n^0 - p^+$					
		Ecuación integral del Scattering	41				
		Ondas parciales en potencial $V(r)$ y corrimiento de fase	42				
	4.3	Cálculo de la sección eficaz	43				
		Estado fundamental del deuterio ${}^3S_1$	44				
		Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo IV	45				
		4.5.1 Corrimiento de fase y sección eficaz	45				

# 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 ≤ 10<sup>-13</sup> 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 ∈ N.
- El núcleo atómico es extremadamente masivo comparado con los 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 más próximo que satisface esta relación se lo conoce como número másico A.

La primera, y más sencilla, suposición consistió en proponer la hipótise de 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  $A \ge 2Z$ . 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 sintezarlos.

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:

$$Bqv = \frac{mv^2}{R} \tag{1}$$

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, fue 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)

$$B = \pm \frac{\sqrt{E_k^2 + 2mc^2 E_k}}{qcR} \tag{2}$$

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 las 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 "dobletes" 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 caraterística general que elementos de número atómico impar el hecho de presentar 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 fue 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:

- Nucleidos de número atómico par y cantidad par de neutrones son los más abundantes en la neturaleza.
   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:  ${}_{1}H^{2}$ ,  ${}_{3}Li^{6}$ ,  ${}_{5}B^{10}$ ,  ${}_{7}N^{14}$  y  ${}_{23}V^{50}$ .

#### 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 sólo 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:

$$n \propto \frac{1}{\sqrt{M}}$$
 (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

Básicamente, 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:

$$Z(A) = \frac{A}{2 + 0.0146A^{\frac{2}{3}}} \tag{4}$$

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.

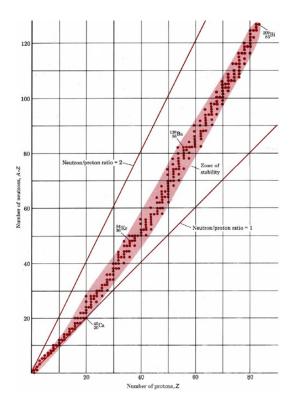


Figura 1. Gráfico neutrón-protón de nucleídos estables.

#### 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 (decayendo extremadamente más rápido que el inverso del cuadrado).
- A distancias del órden 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 <sub>2</sub>He<sup>5</sup> 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 óden 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 escencialmente 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  $\pi$  "piones" ( $m_\pi \approx 300 m_e$ ) 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 volúmen 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:

$$r = r_0 A^{\frac{1}{3}} \tag{5}$$

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 (p) universal, aproximadamente constante, dada por:

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

Sin embargo, debido a la altísima densidad de nucleones por unidad de volúmen  $(10^{38}nucleones/cm^3)$ , 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 constituídos por protones y electrones, asumpción 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 espectro de rotación de moléculas de  $\binom{14}{N}_2$  resulta de manera indiscutible que el valor de spin nuclear de  $\binom{14}{N}$  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  $\binom{14}{N}$  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 una esfera de diámetro  $\approx 10^{-12} cm$ , la incerteza del momentum resultaría:

$$\Delta p \Delta x \approx \hbar \approx 10^{-27} erg \, s \tag{7}$$

Valor que permitiría calcular la energía relativista del electrón confinado:

$$\Delta E = c\Delta p = \frac{c\hbar}{\Delta x} \approx 20 \,\text{MeV} \tag{8}$$

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 fuerzas nucleares exytremadamente instensas, 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 norelativistas.

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 de<sup>1</sup>:

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

donde  $M_p$  y  $M_n$  son las masas del protón y neutrón, respectivamente, y  $\Delta$  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:

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

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

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

$$U = c^2 M_{muc} \tag{11}$$

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 por<sup>2</sup>:

$$B = ZM_{n}c^{2} + (A - Z)M_{n}c^{2} - U = c^{2}\Delta$$
(12)

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>La 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

 $<sup>^{2}</sup>U$  y B se refieren al estado fundamental del núcleo

y queda determinada por medio de mediciones de  $\Delta$ .

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

$$f \equiv \frac{B}{A} \tag{13}$$

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

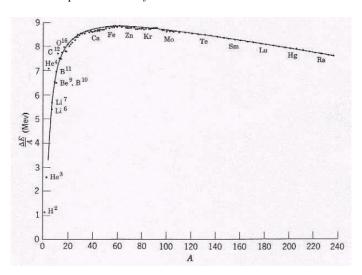


Figura 2. Fracción de energía de ligadura para núcleos estables en función de A.

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  $(\approx 8 \, MeV)$ , 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:

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

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

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

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

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

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

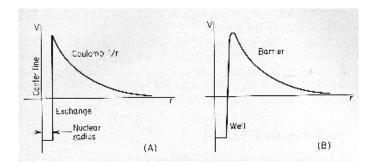


Figura 3. Potencial nuclear ideal (A) y mas probable (B).

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:

$$V_{max} \approx \frac{Zze^2}{\varepsilon r_0 A^{\frac{1}{3}}} \tag{17}$$

donde ze es la carga de la partícula que se aproxima al núcleo (proyectil) de carga Ze, y  $\varepsilon$  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 fue posteriormente modificado, incorporando nuevas concepciones cuánticas. Sin embargo, su versión original, puede describirse como sigue:

La masa de un átomo  $({}^AM_Z)$  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:

$$M_1 = -a_1 A \tag{18}$$

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:

$$M_2 = a_2 A^{\frac{2}{3}} \tag{19}$$

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:

$$E_c = \frac{3}{5} \frac{Z^2 e^2}{r} \tag{20}$$

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:

$$M_3 = a_3 \frac{Z^2}{A^{\frac{1}{3}}} \tag{21}$$

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 fue originalmente argumentado en función de "efectos de simetría", estableciendo un término correctivo:

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

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

$$M_{5} = a_{5}A^{-\frac{3}{4}}(impar - impar)$$

$$M_{5} = 0(impar - par)$$

$$M_{5} = -a_{5}A^{-\frac{3}{4}}(par - par)$$
(23)

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

$${}^{A}M_{Z} = ZM_{H} + (A - Z)M_{n} - a_{1}A + a_{2}A^{\frac{2}{3}} + a_{3}Z^{2}A^{-\frac{1}{3}} + a_{4}\frac{(A/2 - Z)^{2}}{A} + M_{5}$$
(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 más estable corresponde al mínimo de la expresión anterior, *i.e.*:

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

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

#### 1.10.. Spin y momentos nucleares

La existencia de un momento angular intrínseco (spin) nuclear fue 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:

$$\vec{\mu} = g_n \mu_n \vec{I} \tag{26}$$

donde  $g_n$  es el factor nuclear g (razón giromagnética) y  $\mu_n$  es el mgnetón nuclear dado por:  $\mu_n = \frac{e\hbar}{2M_pc}$ . La máxima componente observable de  $\mu_n$  se denota  $\mu$  y se conoce como "momento magnético del núcleo", definido por:

$$\mu = g_n \mu_n I \tag{27}$$

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:

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

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

$$\vec{L}_{at} = \vec{I} + \vec{J} \tag{29}$$

Entonces, la energía potencial de interacción resulta:

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

donde f(L) = L(L+1), ..., 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 ( $\Delta$ ) entre sub-estados consecutivos dado por:

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

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

Entonces, la 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:

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

y en términos de la función de onda, resulta:

$$D_{el}^{z} = e \sum_{i=1}^{Z} \int z_{i} |\Psi(r_{1}, ..., r_{A})|^{2} d^{3}r$$
(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.

$$\nabla \bullet \vec{E} = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0 \tag{34}$$

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

La energía potencial electrostática (W) resulta:

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

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

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

- 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<sup>6</sup> veces y realizar un histograma con los resultados obtenidos.
- Lanzar dos dados 10<sup>6</sup> veces, calcular la suma de valores obtenida y realizar un histograma con los resultados obtenidos.
- Lanzar tres dados 10<sup>6</sup> 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 stuaciones:

- 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<sup>4</sup> 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 stuaciones:

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

Ejercicio 1.5: Utilizando difusión gaseosa, estimar la proporción de isótopodos que se encontrarán en un recinto, luego de difundir desde una muestra inicial constituída por 3 tipos de iótopos, que varían en una y en dos unidades en la cantidad deneutrones, respectivamente, suponiendo:

- 1. El isótopo de referencia es de masa *A*=10, y ha transcurrido 1hora 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 parámetro 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 item anterior.

Ejercicio 1.9: Estimar la energía de separación de un neutrón del <sup>7</sup>Li para pasar a <sup>6</sup>Li.

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

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

El capítulo 2. presenta una descripción sobre la interacción entre nucleanos a baja energía, teniendo en cvuenta 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  $(n^0 \text{ y } p^+)$  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.

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

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

donde  $\mu$  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:  $2,226 \pm 0,003 MeV$ .

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:

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

con condiciones de contorno dadas por la expresión 39:

$$u(r) = 0; r \to \infty$$
 (39)

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

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

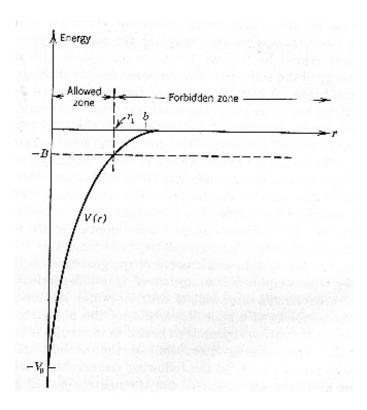


Figura 4. Potencial V(r) correspondiente a fuerzas nucleares atractivas. La zona permitida (E-V(r)>0) es la denominada "allowed zone", mientras la prohibida (E-V(r)<0) es denominada "forbidden zone".

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

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

Existe una distancia  $(r_1, talque : r_1 \approx b)$  para la cual el potencial V(r) coincide con la energía total E. Resulta pues, que  $\kappa$  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 leV. 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:

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

$$k = \sqrt{\frac{ME}{\hbar^2}} \tag{43}$$

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  $\theta$  puede calcularse como 44:

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega \tag{44}$$

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:

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

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

donde  $\delta$  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  $n^0 - p^+$ :

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

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"  $(\sigma_t)$  y "sección eficaz de scattering del singlete"  $(\sigma_s)$ , 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 Coulmbianas, sino que pudo constatarse 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:

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

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  $\approx 0.4 MeV$ .

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).

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 *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).

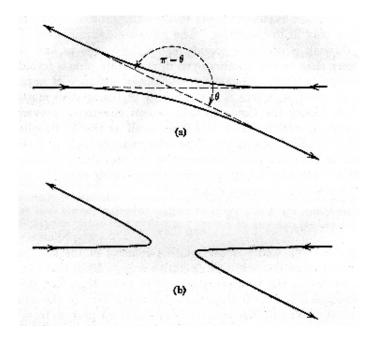


Figura 5. Interacciones entre partículas idénticas que resultan experimentalmente indistinguibles.

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

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

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:

$$u_C(r) \approx \sin\left[kr - \eta \ln(2kr) + \delta_0\right]; \ r \to \infty$$
 (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  $\delta_n$ , denominada "diferencia de fase nuclear". Entonces:

$$u(r) \approx \sin[kr - \eta \ln(2kr) + \delta_0 + \delta_n]; r \to \infty$$
 (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  $\delta_n$ , resulta que la sección eficaz de *scattering* observada a energía E puede parametrizarse en términos de la fase  $\delta_n$ . El acuerdo encontrado con los resultados experimentales es sorprendente y confirma la validez del modelo (figura 6).

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 las 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

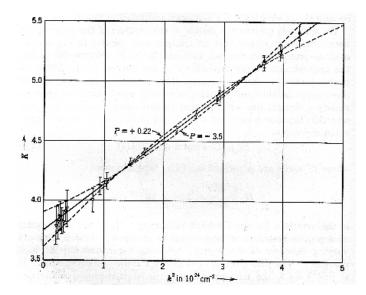


Figura 6. Valores experimentales  $(K \equiv \left(\frac{\hbar^2}{Me^2}\right) \left[\frac{-1}{a} + \frac{1}{2}r_0^2k^2 - Pr_0^3k^4 + ...\right])$  en función de la energía (a es la "distancia de scattering  $p^+ - p^+$ ",  $r_0$  es el "rango efectivo de interacción  $p^+ - p^+$ " y P es un parámetro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

diferencial de scattering  $p^+ - p^+$  correspondiente a la componente S del haz incidente, fue 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):

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

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  $\sigma(k \to 0)$  en laecuación 47. Resulta, entonces:

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

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

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:  $2,33b \le \sigma(k \to 0) \le 4 \cdot 2,33b = 9,32b$ . El valor experimental, confirmado por varios autores es  $\sigma(k \to 0) = (20,4 \pm 0,1)b$ .

Si bien el presente modelo simplista predice el órden 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 pequenõs 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:

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

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:  $|φ⟩ = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}$  (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:  $|\phi\rangle = Be^{\rho x} + B'e^{-\rho x}$  (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.

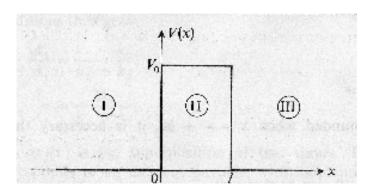


Figura 7. Barrera de potencial unidimensional.

#### ■ **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  $A_{III}$  y  $A'_{II}$  (y consecuentemente en términos de  $A_{III}$ ). Se obtiene, en particular:

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

$$A'_{I} = i \frac{k_{II}^{2} - k_{I}^{2}}{2k_{I}k_{II}} sin(k_{II}l) e^{ik_{I}l} A_{III}$$
(56)

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

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

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

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

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

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

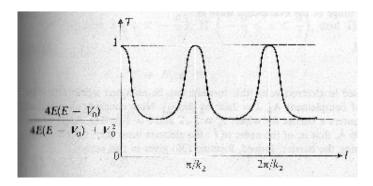


Figura 8. Coeficiente de Transmisión en función del parámetro l.

#### • CASO II: $E < V_0$ (quantum tunneling)

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

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

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

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

Y, aplicando las condiciones de continuidad se obtiene 60:

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

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

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

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  $(M\approx 4\times 1840m_e)$ .

<b>^</b> (	T31 4 1		• /	• •, •,	110 410
2.6	Hiementas	haciene de	programación v	elercitación	del Canifillo 7
<b>4.</b> V	Licincii	nasicus ut	DIVELAMACIÚM V	CICI CILACIOII	uci Cabituio 2.

#### 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

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.

efectivo  $r_0$ , despreciando efectos por spin.

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 8 para el Coeficiente de Transmisión según el ancho de la barrera de potencial.

# 3.. Problema de dos cuerpos a energías intermedias

El capítulo 3. presenta una descripción sobre la interacción entre dos nucleones a "energías intermedias" considerando que, 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.

Resultó particularmente 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 incomptibles 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:

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

donde:

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

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

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 atas (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:

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

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

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

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

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

A pesar de que esta aproximación es cuantitativamente insuficiente para decribir 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  $kr \le 1$  (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:

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

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

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

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

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

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 clacular  $\int_0^\infty W(r) r^4 dr$  (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.

 $<sup>^3</sup>$ Nótese 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).

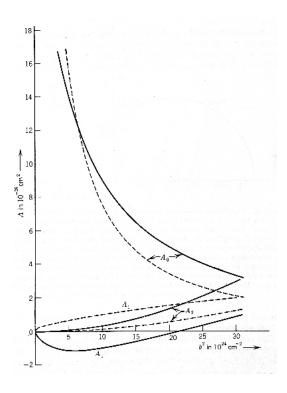


Figura 9. Sección eficaz de scattering  $n^0 - p^+$  en términos de los parámetros  $A_0, A_1$  y  $A_2$ .

# 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:

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

que para  $\delta_1$  y  $\delta_2$  suficientemente pequeños comparados con  $\delta_0$ , se reduce a:

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

Si se consideran modelos de fuerzas internucleares sin intrecambio, todas las diferencias de fases  $\delta_0$ ,  $\delta_1$  y  $\delta_2$  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  $\delta_1$  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  $\theta$ , el otro protón sufre una deflección en  $\pi - \theta$ . Por lo tanto, la sección eficaz diferencial de scattering  $p^+ - p^+$  debe ser simétrica respecto de  $\theta = 90$ .

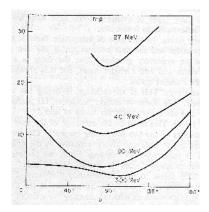


Figura 10. Sección eficaz diferencial de scattering  $n^0 - p^+$  (en *milibar/steradian*).

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

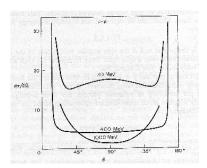


Figura 11. Sección eficaz diferencial de scattering  $p^+ - p^+$ .

Este resultado experimental respecto de la casi independencia de la sección eficaz de scattering  $p^+ - p^+$  fue 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:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (3.4 \pm 0.4)mb/str \tag{74}$$

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  $\pi$ ). 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.

#### 3.4.. Modelo de Yukawa de intercambio de piones

A lo largo de los años, muchos intentos por conseguir modelos "realistas" fueron propuestos y desarrollados. En este sentido, el modelo de Yukawa, cobró particular interés. Este modelo, basado en teorías de intercambio de *quantos* (piones, mesones  $\pi$ ), provee una expresión muy interesante para el potencial nuclear (figura 12), dada por:

$$V(r) = -g^2 \frac{e^{-r/\lambda_{\pi}}}{r} \tag{75}$$

donde g es una constante característica del potencial de cada núcleo y  $\lambda_{\pi}$  se relaciona con el rango de la interacción de intercambio de piones entre los nucleones ("pion-exchange force range"), que puede calcularse por medio de la longitud de onda de Compton para los piones (cuya masa en reposo es 273 veces la masa del electrón).

$$\lambda_{\pi} = \frac{h}{273m_e c} \approx 1.4 fermi \tag{76}$$

Existen fundamentos y evidencias para sostener que la validez del potencial se ve limitada a separaciones inter-nucleares no mucho menores a  $\lambda_{\pi}$ .

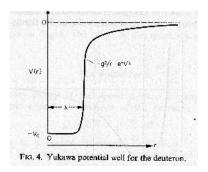


Figura 12. Potencial nuclear de Yukawa.

El modelo de Yukawa puede interpretarse considerando algunos aspectos básicos, como sigue: Las fuerzas nucleares son la consecuencia de la interacción entre propiedades básicas de los nucleones, su "carga" (g) y el "campo de piones" circundante. Este modelo es una analogía al caso electromagnético, con la salvedad que los quanta electromagnéticos (fotones) no tienen masa en reposo.

Para obtener la ecuación de onda piónica, es necesrio re-escribir la energía de los quanta relacionada al momento como sigue:

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4 (77)$$

Donde la energía E y la componente Cartesiana del momento  $(p_z)$  pueden asociarse con los operadores:

$$E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad p_z \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \tag{78}$$

De este modo, se introduce la función de onda (escalar) φ de la teoría de Klein-Gordon, dada por:

$$\nabla^2 \varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \varphi = 0 \tag{79}$$

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.*:

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

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

$$\nabla^2 \mathbf{p} = 4\pi q_e \mathbf{p} \tag{81}$$

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

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

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 suguientes pasos básicos:

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

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

donde i=s es para singlete, mientras que i=t para triplete, a es la constante de la función de onda  $|\phi\rangle=C(r-a)$  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:

$$a_s = 23.7 f$$
,  $r_{0.s} = 3 f$ ;  $a_t = 5.37 f$ ,  $r_{0.s} = 1.7 f$ .

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:

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

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

Recurriendo a métodos de integración por partes, resulta:

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

Repitiendo este procedimiento, se llega a:

$$\Xi = 3\beta^{3} \left[ \frac{-\beta}{2} r e^{-2r/\beta} \right]_{0}^{\infty} + \frac{\beta}{2} \int_{0}^{\infty} e^{-2r/\beta} dr = \frac{3}{4} \beta^{5}$$
 (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:

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

que resulta (asumiendo los valores empíricos<sup>4</sup>):

$$arccot(\delta_s) = \frac{1}{k} \left[ -\frac{1}{23.7f} + \frac{3f k^2}{2} \right]$$
 (88)

у

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

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

Entonces, se calcula numéricamente:

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

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

$$A_{1,s} = \frac{2}{3}k^2 \left[ \frac{\sin(\delta_s)\cos(\delta_s)}{k} \right] \left( \frac{V_0 M}{\hbar^2} \Xi \right)$$
 (92)

$$A_{1,t} = \frac{2}{3}k^2 \left[ \frac{\sin(\delta_t)\cos(\delta_t)}{k} \right] \left( \frac{V_0 M}{\hbar^2} \Xi \right)$$
 (93)

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

$$A_{2,t} = \frac{k^4}{9} \; \Xi_t \tag{95}$$

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

6. Análisis cualitativo y asintótico

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

$$\frac{1}{a_t} = \frac{r_{0,t}k^2}{2} \tag{96}$$

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Algunos autores indican que  $r_{0,s} = 0$ 

de donde:

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

Entonces:

$$E \approx \frac{\hbar^2}{M}k^2 = \frac{\left(6,5821191510^{-16}eVs\right)^2}{1840 \cdot 9,109382610^{-31}kg} 21,448410^{24}cm^{-2}$$
(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)  $\delta_s \le \frac{\pi}{2}$ , y consecuentemente  $A_{1,s} \ge 0 \ \forall k$ .

#### 3.6.. Elementos básicos de programación y ejercitación del Capítulo 3.

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 $n^0 - p^+$

El capítulo 4. repasa brevemente algunos aspectos experimentales y empíricos referidos a la detección de nucleones dispersados como información de referencia para la elaboración de modelos fenomebnológicos descriptivos del comportamiento del scattering entre nucleones, abordando desde el planteamiento básuico hasta la obtención de la sección eficaz bajo consideraciones aproximadas. Se finaliza aplicando a un caso de interés: el Estado Fundamental del Deuterio.

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

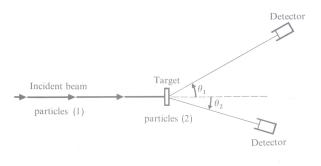


Figura 13. Diagrama de experimentos de colisión.

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

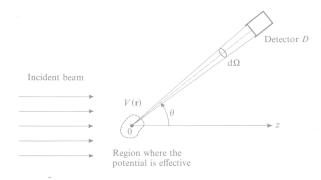


Figura 14. Esquema de interacción debido a un potencial.

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  $\theta$  y  $\phi$ ; se obtiene la probabilidad de detectar el haz dispersado dentro del ángulo sólido subtendido por el detector (véase figura 14) centrado en  $\theta$  y  $\phi$ . Es decir, se obtiene la *sección eficaz diferencial* ( $d\sigma$ ) a partir de:

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

donde dn es el conteo en la medición experimental  $(dn = dn(\theta, \phi))$  y  $\Phi_{in}$  es el flujo del haz incidente.

Por lo tanto, la sección eficaz total se obtiene de:

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

#### 4.1.. Ecuación integral del Scattering

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

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

donde:

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

Y puede re-escribirse como:

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

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:

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

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

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

será solución de la ecuación 104.

A partir de las propiedades de la función de Green,  $\left[\nabla^2 + k^2\right]G(\vec{r}) = \delta(\vec{r})$ , se tiene que  $\left[\nabla^2 + k^2\right]G(\vec{r})$  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:

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

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:

$$|\vec{r} - \vec{r'}| \approx r - \vec{u} \cdot \vec{r'} \tag{107}$$

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

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

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

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

que depende sólo del versor  $\hat{u}$  y de los ángulos polares  $\theta$  y  $\phi$ .

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

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

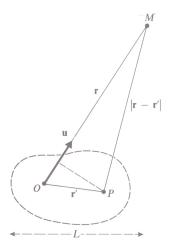


Figura 15. Esquema para aproximar  $|\vec{r} - \vec{r'}|$ .

# 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:

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

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

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

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

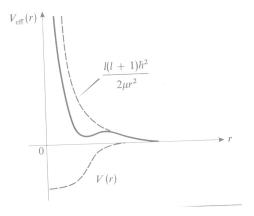


Figura 16. Potencial efectivo.

Entonces, se tiene:

$$\begin{split} V_{eff}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\,\hbar}{2\mu r^2} \; r > 0 \\ V_{eff}(r) \to \infty \; r < 0 \end{split}$$

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

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

que representa la superposición entre una onda incidente y una una reflejada. Sin embargo, debido a que  $V(r) \to \infty$  para  $r \to 0$  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:

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

que puede ser escrito como:

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

Y  $\beta_l$  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:

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

donde  $\delta_l$  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 espara depende de la energía (a través de k).

Utilizando el método de construcción de estados 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  $\delta_l$ :

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

$$\tag{117}$$

donde se asume simetría azimutal.

#### 4.3.. Cálculo de la sección eficaz

La sección eficaz diferencial está dada por:

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

De donde se obtiene:

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

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

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

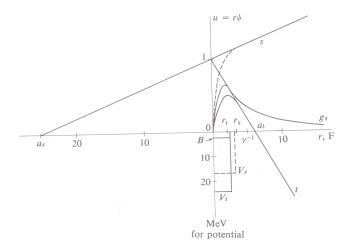


Figura 17. Potencial y autofunciones para estado s y t. Aquí: B = 2,226 MeV,  $r_t = 2,04 F$ ,  $r_s = 2,37 F$ ,  $V_t = -25,5 MeV$ ,  $V_s = -16,6 MeV$  y  $\gamma^{-1} = 4,32 F$ 

#### **4.4..** Estado fundamental del deuterio ${}^3S_1$

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

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

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:

$$u(r) = A\sin(k_t r) \ r \le r_0 \ k_t \equiv \frac{1}{\hbar} \left[ M(E - V_t) \right]$$

$$u(r) = B e^{-\gamma(r - r_0)} \ r \ge r_0 \ \gamma \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{M|E|}$$
(122)

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

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

Y también:

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

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

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

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

Y,  $\gamma^{-1}$  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  $\left[\nabla^2 + k^2\right] G(\vec{r}) = \delta(\vec{r})$ ; es solución de la ecuación  $\left[\nabla^2 + k^2\right] \phi(\vec{r}) = -U(\vec{r}) \phi(\vec{r})$ .

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  $\theta$  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  $(V_t)$  para el estado fundamental del deuterio.

#### 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. Kluver-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.