

FUNDAMENTOS DE FÍSICA MÉDICA

Mauro Valente^{†*}

[†] CONICET & Universidad Nacional de Córdoba; Argentina

Segundo semestre - año académico 2026



Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación (FAMAF)
Universidad Nacional de Córdoba

*Contacto e-mail: valente@famaf.unc.edu.ar

Prefacio

El presente trabajo *Notas de Fundamentos de Física Médica* es un compendio original de notas elaborado -y basado en el texto *Introducción a la Física Médica de 2009*- por parte de Mauro Valente con versión inicial en 2016, y re-editado en 2017, 2019, 2020, 2021, 2024 y 2025, para ser utilizado como material de estudio y referencia para el curso de especialización de grado, y de post-grado *Fundamentos de Física Médica* en el ámbito de física médica en la Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación (FAMAF) de la Universidad Nacional de Córdoba, Argentina.

El contenido del libro de notas está dedicado a formalismos y metodologías para el área específica de física médica orientado a exponer conceptos básicos sobre interacción de la radiación con la materia y de las diferentes áreas de la física médica. Se pretende lograr un primer acercamiento a las temáticas de las diferentes áreas de física médica.

Es un trabajo con exposición de fundamentos teóricos, prácticos y experimentales para aplicación destinados a ejercitar los contenidos formales en situaciones prácticas de interés para la física médica.

El contenido incluye breves repases sobre elementos básicos, 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, herramientas de cálculo y experiencias de laboratorio para abordar de modo completo 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. Así mismo, se incursiona en aspectos básicos de radiobiología y procesamiento de imágenes para lograr la descripción más acabada de los procesos y efectos de la radiación en material biológico.

Programa y contenido

MÓDULO I: Interacción de la radiación ionizante con medios materiales

1. Introducción a la estructura atómica y concepto de sección eficaz.
2. Interacción de fotones con la materia.
3. Radiación fluorescente: rayos X característicos y electrones Auger.
4. Interacción de las partículas cargadas con la materia.
5. Interacción de los neutrones con la materia.

MÓDULO II: Medida de la radiación

1. Magnitudes y unidades.
2. Definiciones básicas: Kerma, dosis absorbida, exposición.
3. Teoría de la Cavidad de Bragg-Gray.
4. Equilibrio electrónico.
5. Descripción física y precisión de los sistemas de medición y cálculo: derivación de incertezas.

MÓDULO III: Dosímetros

1. Cámaras de Ionización: Farmer y plano-paralela.
2. Detectores de estado sólido: termoluminiscentes, semiconductores y centelladores plásticos.
3. Films dosimétricos.
4. Dosímetros químicos: solución de Fricke y polímeros.

MÓDULO IV: Generadores de radiación

1. Equipos tradicionales: Kilovoltaje y Megavoltaje.
2. Terapia superficial y profunda.
3. Unidad de ^{60}Co .
4. Acelerador lineal convencional: fotones y electrones.
5. Aceleradores de partículas cargadas masivas: iones pesados y terapia con protones.
6. Hadroterapia.
7. Columnas térmicas y epitérmicas en reactores nucleares.
8. Terapia con neutrones: BNCT.

MÓDULO V: Dosimetría convencional y técnicas de irradiación

1. Determinaciones dosimétricas en fantoma.
2. Calidad de radiación y distribución de dosis.
3. Cálculo dosimétrico elemental: método *standard* en terapia externa tradicional.
4. Protocolos dosimétricos.
5. Técnicas de irradiación en terapia convencional: múltiples campos, terapia de arco, IMRT.
6. Braquiterapia.
7. Planificación de tratamientos y sistemas de planificación de uso clínico (TPS).
8. Introducción a algoritmos de *kernel convolution*.

MÓDULO VI: Dosimetría avanzada

1. Campos y Haces mixtos.
2. Descomposición dosimétrica y caracterización.
3. Componente terapéutica.
4. Método Mainz: dosimetría con TLD y máscaras de cadmio.
5. Método Milano: dosimetría con diferente composición isotópica del gel de Fricke.

MÓDULO VII: Nociones básicas en medicina nuclear y dosimetría interna

1. Radionucleidos: producción y caracterización.
2. Actividad.
3. Dosis equivalente, dosis efectiva, transferencia lineal de energía (LET).
4. Daño biológico.
5. Efectividad biológica relativa (RBE) y modelo MIRD.
6. Cálculo de factores S.
7. Radionucleidos para *Imaging* metabólico.

MÓDULO VIII: *Imaging* médico: nociones básicas

1. Necesidad de adquirir información del paciente.
2. Estructuras anatómicas y datos metabólicos.
3. Imágenes para radioterapia.
4. Radiografía convencional por contraste de absorción.
5. Tomografía computada: algoritmos de reconstrucción 3D.
6. Técnicas de *imaging* funcional.
7. Cámara *Gamma*.
8. *Single Photon Emission Computed Tomography* (SPECT).
9. *Positron Emission Tomography* (PET).

MÓDULO IX: Simulaciones Monte Carlo

1. Procesos estocásticos.
2. Variables aleatorias.
3. Principios de simulación Monte Carlo.
4. Códigos FLUKA y PENELOPE.

TRABAJOS PRÁCTICOS ESPECIALES Y ACTIVIDAD COMPLEMENTARIA

Práctico de Laboratorio I: Flujo, espectro y fluencia de radiación ionizante

1. Mediciones de caracterización de haz de rayos X.
2. Dependencia de la tensión y corriente en el tubo de rayos X.
3. Mediciones del efecto de accesorios: filtros, colimadores.
4. Complementación con simulaciones Monte Carlo.

Práctico de Laboratorio II: Distribución de dosis para campo conformado

1. Elaboración de dosímetro de gel.
2. Análisis óptico del detector.
3. Determinación de distribuciones de dosis en campo conformado.
4. Complementación con simulaciones Monte Carlo.

Práctico de Laboratorio III: Distribución 3D de dosis en medicina nuclear

1. Adaptación y aplicación de rutinas Monte Carlo.
2. Cálculo dosimétrico.
3. Comparación con datos experimentales.

Práctico de Laboratorio IV: Imágenes radiográficas y tomográficas

1. Adquisición y análisis.
2. Reconstrucción volumétrica.
3. Procesamiento de imágenes radiológicas.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA SUGERIDA

1. F. Kahn. *The physics of the radiation therapy* 3th ed, Lippincott Williams & Wil, 2003.
2. G. Knoll. *Radiation detection and measurements* 3rd ed, John Wiley & Sons, 1999.
3. S. Cherry et al. *Physics in nuclear medicine* 3th ed, Saunders, 2003
4. F. Salvat et al. *PENELOPE, an algorithm and computing code for Monte Carlo simulation of electron photon showers* Ed. NEA, 2003.
5. F. Attix. *Introduction to radiological physics and radiation dosimetry* Ed. John Wiley and Sons, 1986.
6. M. Valente *Física nuclear con aplicaciones* Notas del curso de especialidad en FaMAF 2008. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/valente>)
7. M. Valente *Elementos de cálculo dosimétrico para hadronterapia y campos mixtos* Notas del curso de posgrado en FaMAF 2010-2011-2012. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/valente>)
8. M. Valente y P. Perez. *Dosimetría y radiobiología* Notas para curso de grado, Universidad de Catamarca., 2011. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/valente>)
9. M. Valente. *Física de la Radioterapia* Notas para curso de posgrado universidad de la Frontera, Chile 2009-2010-2011-2012. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/valente>)

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. M. Mariani, E. Vanossi, G. Gambarini, M. Carrara, M. Valente. *Preliminary results from polymer gel dosimeter for absorbed dose imaging in radiotherapy* RADIATION PHYSICS AND CHEMISTRY Vol. 76 Issue: 8 Number: 9 Pages: from 1507 to 1510 Year: 2007.
2. G. Gambarini, D. Brusa, M. Carrara, G. Castellano, M. Mariani, S. Tomatis, M. Valente E. Vanossi. *Dose Imaging in radiotherapy photon fields with Fricke and Normoxic-polymer Gels*. JOURNAL OF PHYSICS: CONFERENCE SERIES Volume: 41 Issue: 1 Number: 1 Pages: from 466 to 474 Year: 2006.
3. G. Castellano D. Brusa, M. Carrara, G. Gambarini, M. Valente. *An optimized Monte Carlo (PENELOPE) code for the characterization of gel-layer detectors in radiotherapy* NUCLEAR INSTRUMENTS AND METHODS IN PHYSICS RESEARCH A - ACCELERATORS, SPECTROMETERS, DETECTORS AND ASSOCIATED EQUIPMENT Volume: 580 Pages: from 502 to 505 Year: 2007.
4. R. Bevilacqua, G. Giannini, F. Calligaris, D. Fonatanarosa, F. Longo, G. Scian, P. Torato, K. Vittor, E. Vallazza, M. Severgnini, R. Vidimari, G. Bartesaghi, V. Conti, V. Mascagna, C. Perboni, M. Prest, G. Gambarini, S. Gay, M. Valente, et. al. *PhoNesS: A novel approach to BNCT with conventional radiotherapy accelerators* NUCLEAR INSTRUMENTS AND METHODS IN PHYSICS RESEARCH A - ACCELERATORS, SPECTROMETERS, DETECTORS AND ASSOCIATED EQUIPMENT Volume: 572 Issue: 1 Number: 1 Pages: from 231 a 232 Year: 2007.
5. G. Gambarini, R. Moss, M. Mariani, M. Carrara, G. Daquino, V. Nievaart, M. Valente. *Gel dosimeters as useful dose and thermal-fluence detectors in boron neutron capture (BNCT)* JOURNAL OF RADIATION EFFECTS AND DEFECTS IN SOLIDS (ISSN 1042-0150 print/ISSN 1029-4953 on-line) Volume: 162 Number: 10-11 Year: 2007.
6. M. Valente, E. Aon, M. Brunetto, G. Castellano, F. Gallivanone, G. Gambarini. *Gel dosimetry measurements and Monte Carlo modeling for external radiotherapy photon beams. Comparison with a treatment planning system dose distribution* NUCLEAR INSTRUMENTS AND METHODS IN PHYSICS RESEARCH A - ACCELERATORS, SPECTROMETERS, DETECTORS AND ASSOCIATED EQUIPMENT Volume: 580 Pages: from 497 to 501 Year: 2007.
7. S. Tomatis, M. Carrara, G. Gambarini, R. Marchesini and M. Valente. *Gel-layer dosimetry for dose verification in intensity modulated radiation therapy* NUCLEAR INSTRUMENTS AND METHODS IN PHYSICS RESEARCH A - ACCELERATORS, SPECTROMETERS, DETECTORS AND ASSOCIATED EQUIPMENT Volume: 580 Pages: from 506 to 509 Year: 2007.
8. G. Gambarini, S. Agosteo, S. Altieri, S. Bortolussi, M. Carrara, S. Gay, C. Petrovich, G. Rosi, M. Valente. *Dose distributions in phantoms irradiated in thermal columns of different nuclear reactors* RADIATION PROTECTION DOSIMETRY Volume: 123 Number: 4 Year: 2007.
9. F. Botta, A. Mairani, G. Battistoni, M. Cremonesi, A. Di Dia, A. Fassó, A. Ferrari, G. Paganelli, G. Pedroli and M. Valente. *Calculation of electron and isotopes dose point kernels with FLUKA Monte Carlo code for dosimetry in nuclear medicine therapy* Medical Physics (ISSN: 0094-2405) Vol. 38 (7) pp. 3944-3954, 2011.

OBJETIVOS Y METODOLOGÍA DEL TRABAJO

OBJETIVOS

- Adquirir conocimientos teórico-prácticos en el área de física médica.
- Instruir al alumno en el uso de radiaciones para terapia.
- Instruir al alumno en el uso de radiaciones para diagnóstico por imágenes.
- Introducir al alumno al manejo de metodologías de dosimetría de radiaciones.
- Introducir al alumno al manejo de técnicas de cómputo de transporte de radiación.

METODOLOGÍA DEL TRABAJO

■ CLASES TEÓRICAS

Se realizarán clases teóricas en aula con una carga semanal de 4 (cuatro) horas. Se tomará asistencia durante las clases teóricas.

■ CLASES DE EJERCITACIÓN PRÁCTICA

Se realizarán prácticos de ejercicios en aula, en base al contenido de las clases teóricas, con una carga horaria de 2 (dos) horas semanales.

■ TRABAJOS PRÁCTICOS Y DE LABORATORIO

Se realizarán trabajos en laboratorio de experimentación directa, supervisada por el docente, con una carga horaria de 2 (dos) horas semanales. Los trabajos de laboratorio son obligatorios en momento y lugar que se determinen.

■ CLASES DE CONSULTA

El docente dispondrá de 2 (dos) horas semanales extra, en lugar y horario a convenir con los alumnos, para recibir consultas o profundizar temáticas de interés de los alumnos. El horario de consulta a disposición de los alumnos será sin obligación de asistencia.

Índice

1.. Módulo I: Interacción de la radiación ionizante con medios materiales	12
1.1.. Introducción a la estructura atómica	12
1.1.1.. Clasificación de las radiaciones ionizantes	12
1.1.2.. Estructura atómica	13
1.1.3.. Descripción de la interacción entre radiación incidente y un átomo en reposo	16
1.2.. Sección eficaz: Introducción	18
1.3.. Conceptos básicos sobre interacción de fotones con la materia	19
1.3.1.. Efecto Fotoeléctrico	19
1.3.2.. Scattering coherente o Rayleigh	21
1.3.3.. Scattering incoherente o Compton	25
1.3.4.. Producción de pares electrón-positrón	28
1.3.5.. Reacciones fotonucleares	29
1.4.. Coeficiente de atenuación: Introducción	29
1.5.. Coeficiente de atenuación másico para compuestos	31
1.6.. Introducción a la interacción de las partículas cargadas con la materia	31
1.6.1.. Scattering elástico de electrones y positrones	32
1.6.2.. Scattering inelástico de electrones y positrones	34
1.6.3.. Scattering inelástico de iones positivos “vestidos”	37
1.6.4.. Emisión de radiación de frenado o Bremsstrahlung	38
1.6.5.. Aniquilación e^+e^-	40
1.6.6.. Scattering elástico múltiple de electrones y positrones	40
1.6.7.. Scattering inelástico múltiple de electrones y positrones	42
1.7.. Radiación fluorescente: rayos X característicos y electrones Auger	56
1.8.. Interacción de los neutrones con la materia: Conceptos básicos	59

Tabla de Constantes físicas

Cantidad	Símbolo	Valor
Número de Avogadro	N_A	$6,0221415 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Velocidad luz en vacío	c	$2,99792458 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$
Masa del electrón	m_0, m_e	$9,1093826 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Carga del electrón	e, q_e	$1,602176634 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Constante de Planck reducida	$\hbar \equiv h/2\pi$	$1,0545718 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
Energía en reposo de electrón	$m_e c^2$	$510,998918 \text{ keV}$
Radio clásico del electrón	$r_e \equiv q_e^2 / (m_e c^2)$	$2,817940325 \cdot 10^{-15} \text{ m}$
Constante de estructura fina	$\alpha \equiv q_e^2 / (\hbar c)$	$1/137,03599911$
Radio de Bohr	$a_0 \equiv \hbar^2 / (m_e q_e^2)$	$0,5291772108 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

Tabla de Conversión de Unidades dosimétricas

Cantidad	Unidad SI	Unidad tradicional
Actividad	1 Becquerel (Bq)	$2,703 \cdot 10^{-11} \text{ Curie (Ci)}$
Energía	1 Joule (J)	$6,242 \cdot 10^{18} \text{ electronVolt (eV)}$
Dosis Absorbida	1 Gray (Gy)	100 rad
Exposición	$1 \text{ C/kg}_{\text{aire}}$	3876 Roentgen
Dosis Equivalente	1 Sievert (Sv)	100 rems

MÓDULO I

Interacción de la radiación ionizante con medios materiales

1.. Módulo I: Interacción de la radiación ionizante con medios materiales

El *Capítulo 1.* está destinado a presentar un breve resumen sobre las interacciones que las radiaciones ionizantes experimentan al atravesar medios materiales. Se repasa brevemente la estructura atómica y el concepto de sección eficaz. También se expone un tratamiento para la interacción de fotones, partículas cargadas y neutrones con la materia. En el caso de las partículas cargadas, se considera tanto una descripción microscópica de los procesos de colisión como otra basada en teorías de dispersión múltiple.

1.1.. Introducción a la estructura atómica

Se denominan radiaciones ionizantes aquellas que son capaces de liberar electrones ligados en orbitales atómicos o moleculares, para lo que se requieren energías superiores a unos 10 eV, aproximadamente. En el caso de electrones, positrones y fotones, se restringe el tratamiento a energías entre decenas de eV y centenares de MeV, mientras que para partículas cargadas pesadas se considera el rango energético específico entre decenas de keV/u y centenares de MeV/u. Estos intervalos cubren holgadamente las energías empleadas típicamente en física médica, tanto en diagnóstico como en terapia.

Se estudiará la propagación e interacción de radiación ionizante con medios materiales constituidos por un número de átomos o moléculas por unidad de volumen (N) igual a:

$$N = \frac{N_{Av}\rho}{A_w} \quad (1)$$

donde N_{Av} es el número de Avogadro, ρ la densidad másica y A_w se obtiene de la masa atómica o molar (A): $A_w = Am_u N_{Av}$, para m_u tal que: $m_u N_{Av} \equiv 1 \text{ g mol}^{-1}$. Así, las fórmulas quedan escritas en el sistema CGS, como es habitual en física atómica. Sin embargo, para realizar los cálculos es conveniente emplear el sistema de unidades atómicas¹,

1.1.1.. Clasificación de las radiaciones ionizantes

Las radiaciones ionizantes se clasifican atendiendo en primer lugar a la carga eléctrica de las partículas (neutras o cargadas). La segunda característica relevante es la masa de las mismas, de acuerdo con el siguiente cuadro:

A la radiación constituída por partículas cargadas se la califica como directamente ionizante, mientras que se denomina indirectamente ionizante a la radiación de partículas neutras. La motivación, como se verá, está relacionada con el hecho de que la carga eléctrica determina el modo en que la radiación interactúa con la materia.

¹Las unidades atómicas se definen tomando: $q_e = m_e = \hbar = 1$.

$$\begin{array}{l}
\text{partículas neutras} \left\{ \begin{array}{l} \text{fotones} \quad x, \gamma \\ \text{neutrones} \end{array} \right. \\
\\
\text{partículas cargadas} \left\{ \begin{array}{l} \text{ligeras } (M = m_e) \quad e^-, e^+ \\ \text{pesadas } (M \gg m_e) \left\{ \begin{array}{l} \text{iones ligeros} \quad \text{H}, \dots, \text{Ne} \\ \text{iones pesados} \quad \text{Na}, \dots, \text{fragmentos de fisión} \\ \text{"exóticas"} \quad \mu^\pm, \pi^\pm, \bar{p}, \dots \end{array} \right. \end{array} \right.
\end{array}$$

Figura 1. Cuadro de clasificación de radiaciones ionizantes.

1.1.2.. Estructura atómica

Los procesos a nivel atómico y subatómico se rigen por las leyes de la mecánica cuántica. Considérese una partícula no-relativista de masa M que se mueve en un potencial central $V(r)$. La ecuación de movimiento (Schrödinger) independiente del tiempo, para el valor de energía ϵ es:

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2M} + V(r) \right] \Psi(\vec{r}) = \epsilon \Psi(\vec{r}) \quad (2)$$

Por tanto, se ve que la función de onda de la partícula ($\Psi(\vec{r})$) factoriza como sigue:

$$\Psi_{\epsilon, \ell, m_\ell}(\vec{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_{\ell, m_\ell}(\vec{r}) \quad (3)$$

donde u son las funciones radiales y Y_{ℓ, m_ℓ} los armónicos esféricos.

Las funciones radiales u pueden determinarse analíticamente en el caso de potencial de Coulomb, pero en general se requiere resolver:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r) \right] u(r) = \epsilon u(r) \quad (4)$$

Si el potencial es atractivo, la ecuación 4 admite soluciones con autovalores $\epsilon_{n, \ell}$ negativos discretos (n es el número cuántico principal), que representan estados ligados. Las correspondientes funciones radiales reducidas $u_{n, \ell}(r)$ están normalizadas a la unidad:

$$\int_{\mathbb{R}^+} u_{n, \ell}^2(r) dr = 1 \quad (5)$$

Por otra parte, la ecuación de Schrödinger radial también posee soluciones con autovalores positivos, que describen partículas libres con energía cinética no-relativista $\epsilon = \frac{1}{2} M v^2$ (espectro continuo). La normalización de las funciones del continuo $u_{\epsilon, \ell}(r)$ es arbitraria. Además las $u_{\epsilon, \ell}(r)$ presentan un comportamiento asintótico del tipo:

$$u_{\epsilon, \ell} \sim \sin \left(kr - \ell \frac{\pi}{2} - \eta \ln(2kr) + \delta_\ell(k) \right) [r \rightarrow \infty] \quad (6)$$

donde $k \equiv \sqrt{\frac{2M\varepsilon}{\hbar}}$ es el número de onda y δ_ℓ el defasaje. $\eta \equiv \frac{Z_\infty q_e^2}{\hbar v}$ es el “parámetro de Sommerfeld” para Z_∞ tal que: $V(r) \rightarrow \frac{-Z_\infty q_e^2}{r}$. Para potenciales de corto alcance se toma $Z_\infty = 0$, mientras que $Z_\infty \neq 0$ para el caso de iones. En el caso particular $V(r) = 0$ se tiene $\eta = 0$ y $\delta_\ell = 0 \forall \ell$, por lo tanto se reduce al caso de ondas planas viajeras:

$$\psi(\vec{r}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (7)$$

En el tratamiento cuántico-relativista, la ecuación de Schrödinger debe sustituirse por la ecuación de Klein-Gordon si la partícula tiene spin 0 o la ecuación de Dirac si su spin es 1/2. La ecuación de Dirac independiente del tiempo es:

$$[c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + (\beta - 1)Mc^2 + V(r)] \psi(\vec{r}) = \varepsilon \psi(\vec{r}) \quad (8)$$

donde $\vec{\alpha}$ y β son las matrices de Dirac. Los autovalores y funciones de onda radiales reducidas se denominan según el número cuántico de momento angular relativista $\kappa \equiv (\ell - j)(2j + 1)$ para $j = \ell \pm \frac{1}{2}$. Las soluciones a esta ecuación pueden encontrarse en literatura especializada.²

Considérese un conjunto de N electrones (masa m_e , carga $-q_e$) de un átomo de número atómico Z . La función de onda atómica $\psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N)$, que refiere a las “variables de estado” de cada uno de los electrones constituyentes (ζ_j), satisface la ecuación de onda independiente del tiempo:

$$H_A(\zeta_1, \dots, \zeta_N) \psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) = E \psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) \quad (9)$$

donde H_A es el Hamiltoniano atómico y contiene, además de las energías cinéticas (no-relativistas) de los electrones constituyentes, las energías potenciales electrostáticas atractivas electrón-núcleo y repulsivas electrón-electrón:

$$H_A = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{-Zq_e^2}{r_i} \right) + \sum_{j < i} \frac{q_e^2}{r_{ji}} \quad (10)$$

Es conocido que la ecuación 9 con el Hamiltoniano definido según la expresión 10 no tiene solución exacta, y por tanto es necesario recurrir a aproximaciones para simplificarla. Por ejemplo, en el modelo de electrones independientes en un campo central se supone que todos los electrones se mueven en un potencial atómico promedio o efectivo $V_{ef}(r)$, elegido de modo que sea una buena aproximación a los potenciales electrostáticos de la ecuación 10. Luego:

$$\mathbf{H}_A = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} + V_{ef}(r_i) \right] \quad (11)$$

O, la formulación correspondiente en el límite relativista:

$$\mathbf{H}_A = \sum_{i=1}^N [c\vec{\alpha}_i \cdot \vec{p}_i + (\beta_i - 1)m_e c^2 + V(r_j)] \quad (12)$$

²No hace al contenido del presente curso.

En este escenario, los potenciales autoconsistentes de tipo Hartree-Fock-Slater o Dirac-Hartree-Fock-Slater constituyen un punto de partida útil para resolver el problema. Al haber reemplazado el Hamiltoniano original por otro aproximado pero separable, la función de onda atómica se escribirá como un determinante de Slater construido con N orbitales de spin monoparticulares ψ_j , $j = 1, \dots, N$.

$$\Psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) = \frac{1}{\sqrt{(N!)}} \begin{bmatrix} \psi_1(\zeta_1) & \cdots & \psi_1(\zeta_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\zeta_1) & \cdots & \psi_N(\zeta_N) \end{bmatrix} \quad (13)$$

Por lo tanto, se ve que Ψ es una función de onda antisimétrica, como corresponde a un sistema de fermiones.

El hecho de que las funciones de onda atómicas se expresen como determinantes de Slater simplifica en gran medida la evaluación (analítica o numérica) de elementos de matriz. La Figura 2 muestra la energía de ligadura experimental $U_{n\kappa}$ de las capas K , $L1 - L3$ y $M1 - M5$ de los átomos neutros. Una peculiaridad interesante de los potenciales autoconsistentes tipo Dirac-Hartree-Fock-Slater es que: $|\epsilon_{n,\kappa}| \approx U_{n,\kappa}$.

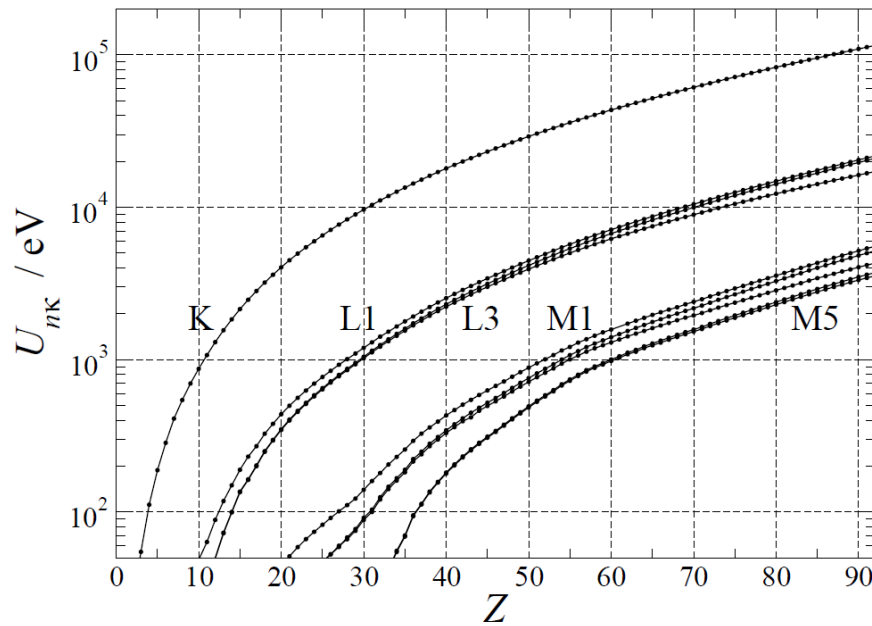


Figura 2. Energías de ionización experimentales de las capas K , $L1 - L3$ y $M1 - M5$ de los átomos neutros (J.M. Fernández-Varea). En líneas sólidas los resultados del modelo teórico descrito en la expresión 13, y los puntos corresponden a los resultados experimentales para $U_{n,\kappa}$.

1.1.3.. Descripción de la interacción entre radiación incidente y un átomo en reposo

Cuando un átomo se ve sometido a la influencia de la radiación incidente deben incluirse en el Hamiltoniano $\mathbf{H}$ términos adicionales con las energías de interacción entre el proyectil y los electrones atómicos. La ecuación de Schrödinger (o Dirac) en este caso es difícil o imposible de resolver exactamente, por lo que se recurre a métodos aproximados.

Implementando técnicas de teoría de perturbaciones, se descompone el Hamiltoniano en dos términos: $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}'$, siendo la ecuación de Schrödinger con $\mathbf{H}_0$ resoluble y $\mathbf{H}'$ es considerado como la “perturbación”.

$$\mathbf{H}_0 = \mathbf{H}_A + \mathbf{H}_F \quad (14)$$

donde el hamiltoniano del átomo ($\mathbf{H}_A$), está dado por las ecuaciones 11 (o 12) y:

$$\mathbf{H}_F \equiv \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} b_{\lambda}^{\dagger} b_{\lambda} \quad (15)$$

es el Hamiltoniano del campo de “fotones libres”. Cada modo λ corresponde a un vector de ondas $\vec{k}_{\lambda}$ y un vector (unitario) de polarización $\hat{\pi}_{\lambda}$. Los operadores $b_{\lambda}^{\dagger}$ y b_{λ} actúan sobre los estados $|\cdots, n_{\lambda}, \cdots\rangle$ que describen el campo electromagnético libre en la representación de números de ocupación (espacio de Fock); se denominan operadores de creación y aniquilación, respectivamente, debido a que:

$$b_{\lambda}^{\dagger} |\cdots, n_{\lambda}, \cdots\rangle = \sqrt{n_{\lambda} + 1} |\cdots, n_{\lambda} + 1, \cdots\rangle \quad (16)$$

$$b_{\lambda} |\cdots, n_{\lambda}, \cdots\rangle = \sqrt{n_{\lambda}} |\cdots, n_{\lambda} - 1, \cdots\rangle \quad (17)$$

El efecto de $\mathbf{H}'$ es inducir transiciones entre estados propios del Hamiltoniano $\mathbf{H}_0$. En el caso de fotones incidentes, el potencial vector asociado es:

$$\vec{A}(\vec{r}) \propto \sum_{\lambda} (\vec{A}_{\lambda} b_{\lambda} + \vec{A}_{\lambda}^* b_{\lambda}^{\dagger}) \quad \vec{A}_{\lambda} \sim \hat{\pi}_{\lambda} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (18)$$

Efectuando el acoplamiento mínimo en la ecuación 11, se obtiene:

$$\mathbf{H}'_{\text{fot}} = \sum_{j=1}^N \frac{q_e}{m_e c} \vec{A}(\vec{r}_j) \cdot \vec{p}_j + \sum_{j=1}^N \frac{q_e^2}{2m_e c^2} \vec{A}^2(\vec{r}_j) \equiv \mathbf{H}'_{\text{fot1}} + \mathbf{H}'_{\text{fot2}} \quad (19)$$

En el caso relativista, se utiliza el acoplamiento mínimo en la ecuación 12, resultando:

$$\mathbf{H}'_{\text{fot}} = \sum_{j=1}^N q_e \vec{\alpha}_j(\vec{r}) \cdot \vec{A}(\vec{r}_j) \quad (20)$$

Por otro lado, cuando la radiación incidente es una partícula cargada (carga $Z^* q_e$, masa M) se tiene que la perturbación es la interacción Coulombiana (instantánea):

$$\mathbf{H}'_{\text{cp}} = \frac{Z Z^* q_e^2}{r_0} + \sum_{j=1}^N \left(\frac{-Z^* q_e^2}{r_{0j}} \right) \equiv \mathbf{H}'_{\text{cp1}} + \mathbf{H}'_{\text{cp2}} \quad (21)$$

aquí se ha utilizado que $\vec{r}_0$ es la posición de la partícula cargada. En esta expresión se ha omitido la interacción transversal, un efecto relativista causado por el intercambio de fotones virtuales.

La probabilidad de transición por unidad de tiempo ($W_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle}$) de un estado inicial $|i\rangle$ a otro final $|f\rangle$ (ambos propios de $\mathbf{H}_0$) está dada por la *regla de oro de Fermi*:

$$W_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}|^2 \rho(E_{|f\rangle}) \quad (22)$$

donde $\rho(E_{|f\rangle})$ es la densidad de estados finales. Además, se tiene:

$$\mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle} = \langle f | \mathbf{H}' | i \rangle + \sum_n \frac{\langle f | \mathbf{H}' | n \rangle \langle n | \mathbf{H}' | i \rangle}{E_i - E_n} + \dots \equiv \mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}^{(1)} + \mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}^{(2)} + \dots \quad (23)$$

El primer término de la suma de $\mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}$ es el término de primer orden, la sumatoria sobre estados intermedios $|n\rangle$ son las contribuciones de segundo orden, etc.

En algunos casos se puede entender cualitativamente -e incluso cuantitativamente- ciertos procesos de interacción de la radiación con la materia por medio de una descripción clásica de los electrones atómicos. El método consiste en considerar que cada átomo (o molécula) neutro posee $N = Z_2$ electrones ligados armónicamente a una posición de equilibrio mediante fuerzas conservativas y lineales. Se trabaja en el contexto en que f_j de estos electrones tienen frecuencias angulares propias ω_j , verificándose que $\sum_j f_j = Z_2$. En el contexto de la mecánica cuántica esta relación se conoce como regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn, y los f_j se interpretan como intensidades de oscilador. La dinámica de los electrones con frecuencia angular ω_j está gobernada por la segunda ley de Newton:

$$m_e \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{r} + m_e \Gamma \frac{\partial}{\partial t} \vec{r} + m_e \omega_j^2 \vec{r} = -q_e \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (24)$$

donde Γ es un amortiguamiento fenomenológico y $\vec{E}(\vec{r}, t)$ es el campo eléctrico externo debido a la radiación incidente (fotón o partícula cargada). Si la amplitud de oscilación es lo bastante pequeña, de modo que $\vec{E}$ pueda ser evaluado en la posición de equilibrio del electrón, resulta:

$$\vec{r}(t) = -\frac{q_e}{m_e} \frac{\vec{E}(t)}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \quad (25)$$

En otras situaciones, como por ejemplo en el caso de metales, es útil describir los electrones más débilmente ligados (los de conducción) como si constituyeran un gas de electrones libres y emplear en los cálculos la correspondiente función dieléctrica (compleja):

$$\varepsilon(k, \omega) = \varepsilon_{\Re}(k, \omega) + i\varepsilon_{\Im}(k, \omega) \quad (26)$$

La función dieléctrica depende del vector de onda k y la frecuencia angular ω . La magnitud relevante en este tipo de formalismos es la *función de pérdida de energía*

$\Im(-1/\epsilon) = \frac{\epsilon_3}{\epsilon_3^2 + \epsilon_3^2}$. Finalmente, cuando la energía de la radiación incidente es muy alta, es posible despreciar las energías de ligadura y las distribuciones de velocidades de todos los electrones del blanco, y describirlos como si estuvieran libres y en reposo. Las ecuaciones de conservación de la energía y el momentum permiten estimar las energías y direcciones de salida más probables de las partículas luego de interactuar (modalidad colisión binaria).

1.2.. Sección eficaz: Introducción

Considérese un experimento de *scattering* (dispersión), en el que se hace incidir sobre un blanco una densidad de flujo (tasa de fluencia) de partículas $\dot{\Phi}$. Un detector analiza las $\dot{N}$ partículas que, por unidad de tiempo, han sido desviadas dentro del ángulo sólido $d\Omega$ del detector (determinado por los ángulos polar θ y acimutal ϕ) y llegan con energía entre E' y $E' + dE'$. La *sección eficaz diferencial* de este proceso de colisión ($\frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega}$) se define como sigue:

$$\frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \equiv \frac{1}{\dot{\Phi}} \frac{\dot{N}}{dE' d\Omega} \quad (27)$$

En la expresión anterior (27) el último factor está directamente relacionado con la probabilidad de transición por unidad de tiempo dada por la regla de oro de Fermi (22).

Integrando respecto del ángulo sólido y la energía se obtiene la *sección eficaz total* (σ):

$$\sigma = \int dE' \int d\Omega \frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \quad (28)$$

que tiene dimensiones de superficie. Es posible interpretar la sección eficaz diferencial como una densidad de probabilidad a partir de la relación:

$$p(E', \theta) = \frac{1}{\sigma} 2\pi \sin(\theta) \frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \quad (29)$$

Obsérvese que la sección eficaz diferencial depende del ángulo de dispersión polar θ pero no del ángulo de dispersión acimutal ϕ debido a la simetría cilíndrica del problema.

En un medio condensado (sólido o líquido) la probabilidad de interacción por unidad de longitud se define mediante:

$$\lambda^{-1} = \mathcal{N} \sigma \quad (30)$$

siendo λ el *camino libre medio* entre colisiones sucesivas. El producto $\mathcal{N} \sigma$ recibe a veces el nombre de *sección eficaz macroscópica* (Σ) o, en el caso de fotones, coeficiente de atenuación lineal (μ).

Las consideraciones anteriores son directamente generalizables si hay diversos mecanismos de interacción (cada uno de tipo i). Así, se tiene:

$$\sigma_{Total} = \sum_i \sigma_i \quad \wedge \quad \lambda_{Total}^{-1} = \sum_i \lambda_i^{-1} \quad (31)$$

1.3.. Conceptos básicos sobre interacción de fotones con la materia

Los fotones carecen de masa en reposo y carga eléctrica. Por lo tanto, su interacción con los medios materiales no es tan intensa como en el caso de partículas cargadas. Considérese la interacción de fotones no polarizados de energía E con átomos neutros cuyo número atómico es Z . En el intervalo de energías de interés para las aplicaciones del presente curso (aproximadamente entre 0.1 keV y 1 GeV) los procesos de colisión dominantes son el efecto fotoeléctrico, la dispersión Rayleigh, el efecto Compton y la creación de pares electrón-positrón. Otros modos de interacción, tales como las reacciones fotonucleares, ocurren con probabilidades mucho menores y -a primer orden- pueden ser despreciados en varias situaciones prácticas.

Sea ς la energía del fotón en unidades de $m_e c^2 \approx 511 \text{keV}$ (la energía en reposo del electrón):

$$\varsigma \equiv \frac{E}{m_e c^2} \quad (32)$$

1.3.1.. Efecto Fotoeléctrico

En el *efecto fotoeléctrico* el fotón es absorbido por el átomo blanco y un electrón de la capa atómica i -ésima es emitido dentro del ángulo sólido $d\Omega_e$, caracterizado por el ángulo polar θ_e , con energía cinética $\epsilon_e = E - U_i$, siendo U_i la energía de ionización de dicha capa. El proceso de fotoabsorción sólo es posible si $E > U_i$. En consecuencia, la sección eficaz de efecto fotoeléctrico presenta marcados bordes de absorción, pues cada vez que E supera una energía U_i se “abre” un nuevo canal de absorción.

Efecto Fotoeléctrico en la aproximación de Born

La aproximación de Born (no-relativista) considera la perturbación $\mathbf{H}'_{\text{fot1}}$ (21) a primer orden, con la simplificación adicional de reemplazar la función de onda del fotoelectrón por una onda plana. Esta aproximación implica secciones eficaces razonables sólo si $\epsilon_e \gg U_i$ de modo que se pueda despreciar la interacción Coulombiana del fotoelectrón con el ión residual.

La sección eficaz diferencial de efecto fotoeléctrico del átomo de hidrógeno (y de iones hidrogenoides) en la aproximación de Born puede ser evaluada analíticamente. En ausencia de polarización, la solución es:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_e} = 2^{\frac{3}{2}} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \varsigma^{-\frac{7}{2}} \frac{\sin^2(\theta_e)}{\left[1 - \frac{v_e}{c} \cos(\theta_2)\right]^4} \approx 2^{\frac{3}{2}} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \varsigma^{-\frac{7}{2}} \sin^2(\theta_e) \quad (33)$$

donde $\alpha \equiv \frac{q_e^2}{\hbar c} \approx 1/137$ es la constante de estructura fina de Sommerfeld. La proporcionalidad con $\sin^2(\theta_e)$ indica que el fotoelectrón tiende a emitirse perpendicularmente a la dirección del fotón incidente. La sección eficaz total se obtiene integrando la sección eficaz diferencial sobre todas las direcciones de emisión:

$$\sigma(E) = \int_{-1}^1 d2\pi \cos(\theta_e) \frac{d\sigma}{d\Omega_e} = \frac{2^{\frac{9}{2}}\pi}{3} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \zeta^{-\frac{7}{2}} \quad (34)$$

Esta fórmula (34) resulta ser aplicable no sólo para fotoionización de átomos hidrogenoides, sino que también describe de forma aproximada la ionización de la capa K de átomos o iones por rayos X y γ . Obsérvese que la sección eficaz es proporcional a Z^5 y a $E^{-\frac{7}{2}}$, creciendo rápidamente al aumentar el número atómico y disminuir la energía.

Para átomos multielectrónicos, es posible generalizar el tratamiento anterior sobre la base del modelo de electrones independientes en un campo central. Sin embargo los cálculos sólo pueden realizarse en forma numérica.

Efecto Fotoeléctrico en la aproximación dipolar eléctrica (no-relativista)

En la aproximación dipolar eléctrica no-relativista, el Hamiltoniano de la interacción entre el campo de radiación electromagnética y el átomo es $\mathbf{H}'_{\text{tot1}}$ (21), pero haciendo la exponencial igual a 1 en la expresión del potencial vector. Con estas simplificaciones, la relación de conmutación de Heisenberg (principio de incerteza) permite reemplazar los valores esperados de los operadores $\vec{p}_j$ por los $\vec{r}_j$. Aplicando teoría de perturbaciones a primer orden (sólo con el término $\mathbf{M}_{[f],i}^{(1)}$ en las expresiones 23), resulta que la sección eficaz del efecto fotoeléctrico se escribe como:

$$\sigma(E) = 4\pi\alpha E \left| \langle \Psi_f | \sum_{j=1}^N \vec{r}_j | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (35)$$

donde Ψ_i y Ψ_f son las funciones de onda atómicas inicial y final, respectivamente; las cuales pueden ser aproximadas mediante determinantes de Slater y el operador es "a un cuerpo", así que sólo estarán permitidas transiciones que involucren a un único electrón. El elemento de matriz se reduce entonces a $|\langle \varphi_f | \vec{r} | \varphi_i \rangle|$ siendo φ_i y φ_f los orbitales de spin monoparticulares inicial (ligado) y final (libre), respectivamente, del electrón activo (el que efectúa la transición). En principio, debería efectuarse un desarrollo en ondas parciales del orbital libre φ_f . Sin embargo el carácter vectorial del operador $\vec{r}$ impone la conocida regla de selección $\ell' = \ell \pm 1$ de manera que contribuyen a lo sumo dos ondas parciales.

Las funciones radiales reducidas inicial, $P_{n\ell}(r)$ y final $P_{\zeta_e\ell'}(r)$ del electrón activo se obtienen resolviendo numéricamente la ecuación de Schrödinger radial. La expresión final para la sección eficaz de efecto fotoeléctrico de la capa activa (cuyo número de electrones es $N_{n\ell}$) es:

$$\sigma(E) = \frac{4\pi^2\alpha}{3} N_{n\ell} (\zeta_e - \epsilon_{n\ell}) \left[\frac{\ell}{2\ell+1} R_{\ell-1}^2 + \frac{\ell+1}{2\ell+1} R_{\ell+1}^2 \right] \quad (36)$$

Con $E = \zeta_e - \epsilon_{n\ell}$ y con las integrales radiales dadas por:

$$R_{\ell\pm 1}(\zeta_e) \equiv \int_{\Re^+} P_{\zeta_e\ell\pm 1}(r) r P_{n\ell}(r) dr \quad (37)$$

Efecto Fotoeléctrico en la aproximación Scofield

Actualmente, los cálculos considerados más precisos son los realizados por Scofield, que incluyen todos los multipolos del campo de radiación así como efectos relativistas, lo cual es esencial para átomos pesados. Es decir, se trata H'_{fot} a primer orden sin introducir simplificaciones adicionales. Estos resultados han sido incorporados a la base de datos EPDL en 1997³ y en el programa XCOM. A modo de ejemplo, la figura 3 presenta las secciones eficaces de efecto fotoeléctrico para Al, Cu y Pb. La unidad, típicamente utilizada para secciones eficaces, b refiere a $1 \text{ barn} \equiv 10^{-24} \text{ cm}^2$.

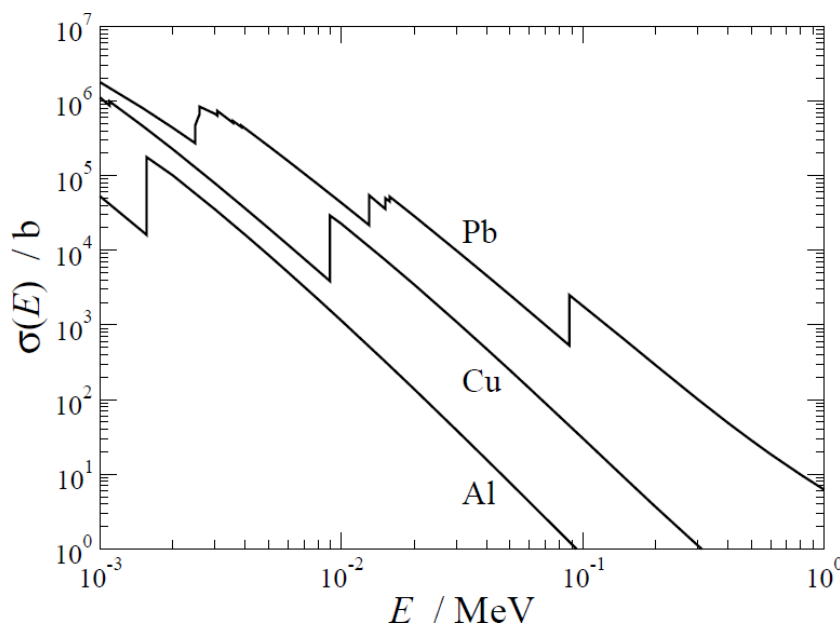


Figura 3. Secciones eficaces de efecto fotoeléctrico para Al, Cu y Pb.

1.3.2.. Scattering coherente o Rayleigh

El *scattering* coherente o Rayleigh es el proceso por el cual un fotón es dispersado elásticamente por los electrones atómicos ligados. Es decir, el átomo blanco no es excitado. En consecuencia $\Psi_f = \Psi_i$ y las energías de los fotones incidente y dispersado son iguales: $E' = E$. Este proceso se denomina coherente porque aparecen efectos de interferencia entre las ondas dispersadas por diferentes partes de la distribución de carga atómica.

Dispersión coherente en la aproximación del factor de forma

En este formalismo (básicamente no-relativista) se trata al Hamiltoniano $H'_{\text{fot}2}$ (expresión 20) asociado a la interacción entre la radiación electromagnética y el átomo como una

³Cullen, Hubbell & Kissel. EPDL97 The evaluated data library, '97 version, Report UCRL-50400 vol. 6, rev. 5 (Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, 1997).

perturbación a primer orden, mientras que desprecia la contribución de H'_{fot1} a segundo orden. Desarrollando los correspondientes elementos de matriz $\langle f | H'_{fot2} | i \rangle$ puede calcularse la sección eficaz diferencial (por átomo) para dispersión coherente:

$$\frac{d\sigma_{coh}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_T}{d\Omega} |F(q, Z)|^2 = r_e^2 \left(\frac{1 + \cos^2(\theta)}{2} \right) |F(q, Z)|^2 \quad (38)$$

donde es $\frac{d\sigma_T}{d\Omega}$ es la sección eficaz diferencial de Thomson para la dispersión por un electrón libre y en reposo, la cual se obtiene a partir de argumentos clásicos, θ se refiere al ángulo de dispersión polar, *i.e.* el ángulo entre las direcciones de propagación del fotón antes y después de la interacción; y $r_e \equiv \frac{q_e^2}{m_e c^2} \approx 2,818 \times 10^{-13} cm$ es denominado radio clásico del electrón.

El factor de forma atómico $F(q, Z)$ está definido por:

$$F(q, Z) = \langle \Psi_0 | \sum_{j=1}^N e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j / \hbar} | \Psi_0 \rangle \quad (39)$$

donde Ψ_0 denota la función de onda atómica del estado fundamental y la suma recorre los Z electrones atómicos; $\vec{q}$ es el vector transferencia de momento, cuyo módulo está dado por:

$$q = 2 \frac{E}{c} \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) \quad (40)$$

El factor de forma atómico puede ser expresado como la transformada de Fourier de la densidad electrónica $\rho(\vec{r})$ del átomo; la cual, en la aproximación de simetría esférica, se simplifica a:

$$F(q, Z) = \int_{\mathbb{R}^+} \rho(r) \frac{\sin \left(\frac{qr}{\hbar} \right)}{\frac{qr}{\hbar}} 4\pi r^2 dr \quad (41)$$

$F(q, Z)$ es una función monótonamente decreciente en q que varía desde $F(0, Z) = Z$ a $F(\infty, Z) = 0$. Por lo tanto, la presencia del término en $F(q, Z)^2$ en la expresión para la sección eficaz diferencial (38), favorece la dispersión coherente (Rayleigh) hacia ángulos pequeños.

En el caso del átomo de hidrógeno no-relativista el factor de forma atómico puede evaluarse analíticamente⁴:

$$F_H(q, Z=1) = \left[1 + \left(\frac{q a_0 \hbar}{2Z} \right) \right]^{-2} \quad (42)$$

⁴fórmula de Pirene.

Pero, los factores de forma atómicos para átomos multielectrónicos (con más de un electrón) requieren de ser calculados numéricamente. Por lo general, existen extensas tablas⁵, obtenidas a partir de densidades atómicas autoconsistentes para átomos con $Z = 2 - 100$. La Figura 4 muestra los factores de forma atómicos correspondientes a los átomos de C, Cu y Pb.

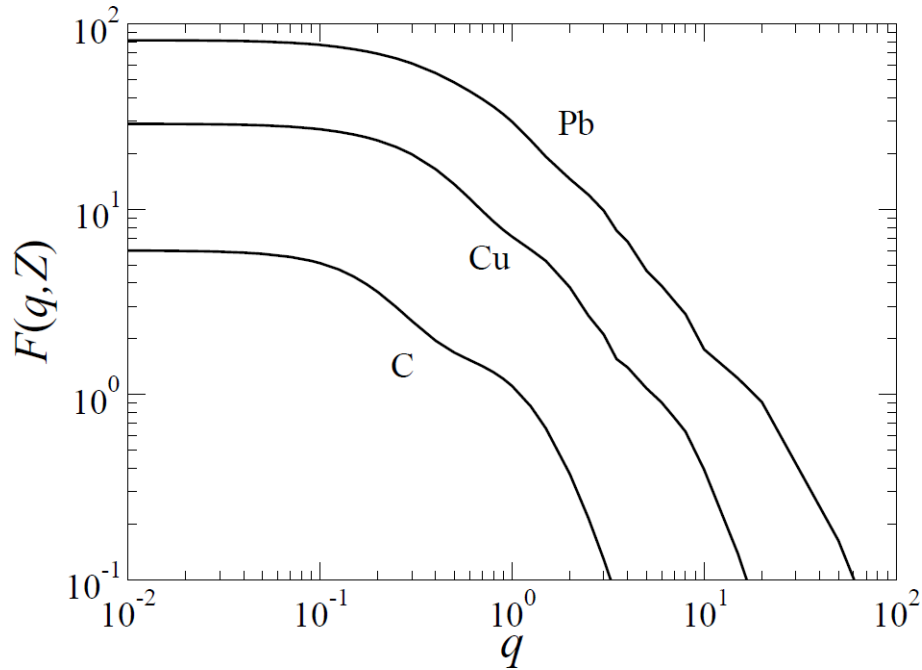


Figura 4. Factores de forma atómicos para C, Cu y Pb (Hubbell et al.)

La sección eficaz total (por átomo) de *scattering* Rayleigh se obtiene a partir de:

$$\sigma(E) = \pi r_e^2 \int_{-1}^1 (1 + \cos^2(\theta)) |F(q, Z)|^2 d(\cos(\theta)) \quad (43)$$

Para energías bajas, el factor de forma en la integral es, aproximadamente, $F(0, Z) = Z$ y por lo tanto la dispersión coherente se reduce a la dispersión Thomson:

$$\sigma = \frac{8}{3} \pi r_e^2 Z^2 \quad (44)$$

Mientras que en el límite de alta energía se tiene:

$$\sigma \sim E^{-2} \quad (45)$$

⁵véase Hubbell et al. Phys. Chem. Ref. Data 4 (1975) 471. Erratum: ibid. 6 (1977) 615.

Estos comportamientos asintóticos pueden apreciarse en la Figura 5, donde se han representado las secciones eficaces totales Rayleigh para C, Cu y Pb.

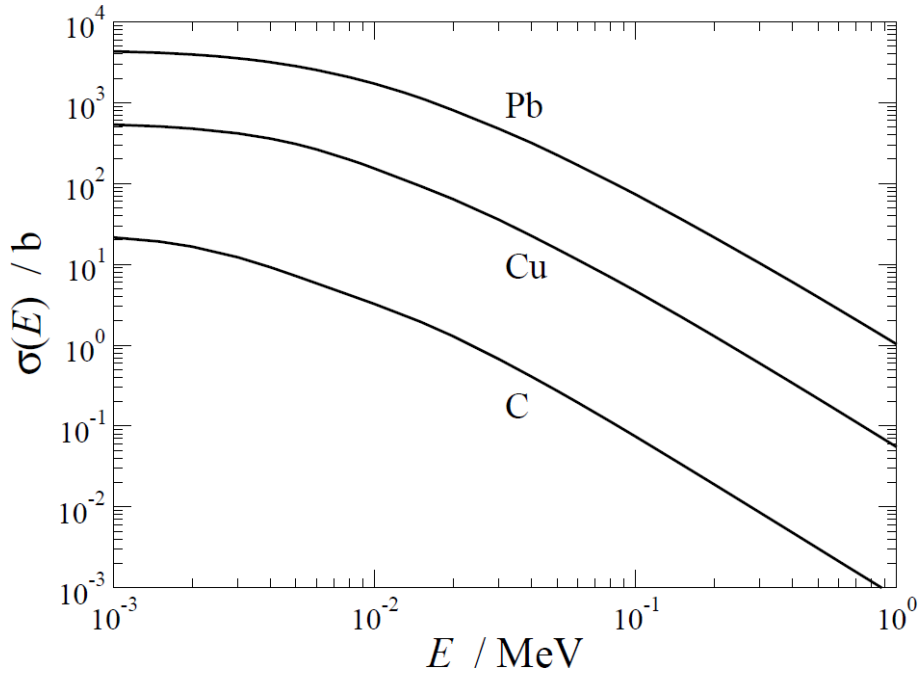


Figura 5. Secciones eficaces Rayleigh para C, Cu y Pb.

Dispersión coherente anómala

En un sentido estricto, la expresión 38 es adecuada sólo para fotones si $E \gg U_K$, para U_K : energía de ligadura de la capa K del átomo. El comportamiento predicho por la expresión 44 es alterado sustancialmente cuando se introducen los factores (reales) de dispersión “anómala” f' y f'' , cuyo origen está en el Hamiltoniano relativista H'_{tot} tratado a segundo orden⁶. En este tratamiento, la sección eficaz diferencial resulta:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma_T}{d\Omega} |F(q, Z) + f'(E, Z) + if''(E, Z)|^2 \quad (46)$$

La correspondiente sección eficaz total presenta cerca de los bordes de absorción una marcada reducción respecto de la sección eficaz predicha por la expresión 43.

Afortunadamente, cuando aparecen estos efectos de dispersión anómala el *scattering* coherente es mucho menos probable que la absorción fotoeléctrica. Por tanto, para muchos propósitos, es posible aproximar el factor de forma por medio de la expresión 43.

⁶Lo que se denomina “método de la matriz S de dispersión”.

1.3.3.. Scattering incoherente o Compton

En la dispersión incoherente de fotones (efecto Compton), un fotón de energía $E = \kappa m_e c^2$ interactúa inelásticamente con un electrón atómico que lo absorbe y se re-emite un fotón secundario con energía $E' = \tau E < E$ en la dirección θ relativa a la dirección del fotón incidente. Tras la colisión, el electrón retrocede con una energía cinética ϵ_e en la dirección θ_e .

Si el electrón blanco está inicialmente libre y en reposo, se tiene que $\epsilon_e = (1 - \tau)E$. La conservación de energía y momentum implica:

$$\cos(\theta) = \frac{1}{\kappa} \left(\kappa + 1 - \frac{1}{\tau} \right) \quad (47)$$

$$\cos(\theta_e) = (\kappa + 1) \sqrt{\frac{1 - \tau}{\kappa [2 + \kappa(1 - \tau)]}} \quad (48)$$

Por lo tanto:

$$\tau = \frac{1}{1 + \kappa(1 - \cos(\theta))} \quad (49)$$

$$E' = \frac{E}{1 + \frac{E}{m_e c^2} (1 - \cos(\theta))} \equiv E_C \quad (50)$$

Sujeto a $\tau_{\min} = \frac{1}{1 + 2\kappa} \leq \tau \leq \tau_{\max} = 1$, que corresponden a *scattering* hacia atrás ($\theta = \pi$) y hacia adelante ($\theta = 0$), respectivamente.

La formulación de Klein-Nishina

Suponiendo que los electrones del blanco están libres y en reposo, la sección eficaz diferencial angular (por electrón) para fotones no polarizados se obtiene a partir de la fórmula de Klein-Nishina:

$$\frac{d\sigma_{K-N}}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{E_C}{E} \right)^2 \left[\frac{E_C}{E} + \frac{E}{E_C} - \sin^2(\theta) \right] = \quad (51)$$

$$\frac{r_e^2}{2} [1 + \kappa(1 - \cos(\theta))]^{-2} \left[1 + \cos^2(\theta) + \frac{\kappa^2(1 - \cos(\theta))^2}{1 + \kappa(1 - \cos(\theta))} \right] \quad (52)$$

Puede verse que en el límite de bajas energías ($\kappa \rightarrow 0$), la sección eficaz $\frac{d\sigma_{K-N}}{d\Omega}$ se reduce a la fórmula de Thomson (38)

Sin embargo, generalmente es más conveniente expresar la sección eficaz de Klein-Nishina en términos de τ (que describe la fracción de energía del fotón secundario):

$$\frac{d\sigma_{K-N}}{d\tau} = \frac{d\sigma_{K-N}}{d\Omega} \frac{2\pi d(\cos(\theta))}{d\tau} = \frac{\pi r_e^2}{\kappa^3} \left(\frac{1}{\tau^2} + \frac{\kappa^2 - 2\kappa - 2}{\tau} + (2\kappa + 1) + \kappa^2 \tau \right) \quad (53)$$

La correspondiente sección eficaz total (por electrón) de Klein-Nishina resulta:

$$\sigma_{K-N} = \int_{\tau_{\min}}^{\tau_{\max}} d\tau \frac{d\sigma_{K-N}}{d\tau} = \pi r_e^2 \left[\frac{4}{\kappa^2} + \frac{\kappa^2 - 2\kappa - 2}{\kappa^2} \ln(1 + 2\kappa) + \frac{2(\kappa + 1)}{(1 + 2\kappa)^2} \right] \quad (54)$$

La aproximación de Waller-Hartree

En la aproximación de Waller-Hartree se incluyen los efectos de ligadura de los electrones atómicos. En este formalismo, la sección eficaz Compton (por átomo) se obtiene a partir de:

$$\frac{d\sigma}{d\tau} = \frac{d\sigma_{K-N}}{d\tau} S(q, Z) \quad (55)$$

donde $S(q, Z)$ es la *función de dispersión incoherente* del átomo blanco, con

$$q^2 = \frac{E^2 + E'^2 - 2EE' \cos(\theta)}{c^2} = (m_e c)^2 \kappa [2 + \kappa - 2\tau(1 + \kappa) + \tau^2 \kappa] \quad (56)$$

siendo entonces q el módulo de la transferencia de momento al electrón.

La función de dispersión incoherente se calcula a partir de la función de onda atómica del estado fundamental Ψ_0 mediante:

$$S(q, Z) = \langle \Psi_0 | \sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^Z e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} / \hbar | \Psi_0 \rangle \quad (57)$$

De aquí se sigue que $S(q, Z)$ es una función monótonamente creciente de q que toma valores desde $S(0, Z) = 0$ hasta $S(\infty, Z) = Z$. Se observa que la función de dispersión incoherente inhibe las colisiones “blandas”, *i.e.* aquellas en las que la transferencia de momento q es pequeña, reduciendo la sección eficaz diferencial; de hecho $\frac{d\sigma}{d\tau}$ se anula para $\tau = 1$ ya que $q^2(\tau = 1) = 0$.

En el caso del átomo de hidrógeno, la función de dispersión incoherente admite una expresión analítica ya que $i = j = 1$, luego:

$$S_H(q, Z) = 1 - [F_H(q, Z)]^2 \quad (58)$$

Nuevamente, para el caso de átomos multielectrónicos es necesario recurrir al cálculo numérico para evaluar las funciones $S(q, Z)$ ⁷.

En situaciones prácticas puede convenir el empleo de funciones de dispersión incoherente aproximadas pero expresadas en forma analítica ⁸, en vez de extensas tablas de difícil manejo. La Figura 6 reporta funciones de dispersión incoherente correspondientes a los átomos de C, Cu y Pb.

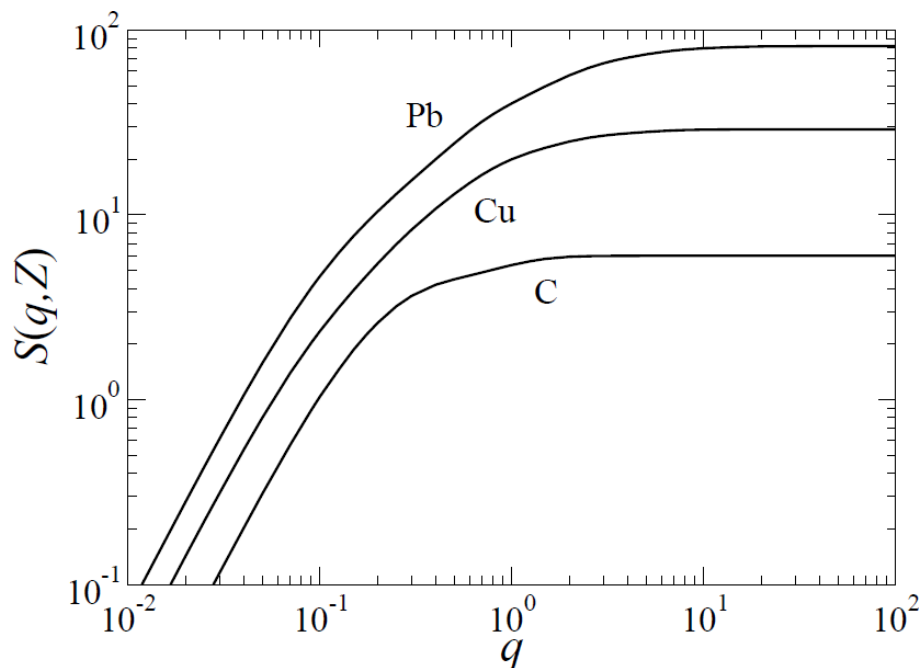


Figura 6. Funciones de dispersión incoherente de C, Cu y Pb (Hubbell et al.)

La sección eficaz total incoherente (por átomo) es entonces:

$$\sigma(E) = \int_{\tau_{\min}}^{\tau_{\max}} \frac{d\sigma_{KN}}{d\tau} S(q, Z) d\tau \quad (59)$$

El comportamiento de σ en función de la energía del fotón puede observarse en la Figura 7 para dos especies atómicas (Al y Au).

La sección eficaz total tiende a cero para fotones de bajas energías, mientras que la sección eficaz total obtenida a partir de la fórmula de Klein-Nishina (σ_{KN}) permanece finita en $E = 0$. La diferencia entre secciones eficaces totales obtenidas de la expresión 59 y de la fórmula de Klein-Nishina aumenta cuando la energía del fotón disminuye y es apreciable para energías menores a ~ 100 keV.

⁷Hubbell et al. compilaron tablas de $S(q, Z)$ para todos los elementos desde $Z = 1$ a 100, a partir de funciones de onda atómicas autoconsistentes de tipo Hartree-Fock.

⁸Véase, por ejemplo, J. Baró et al. Radiat. Phys. Chem. **44**, 531, 1994.

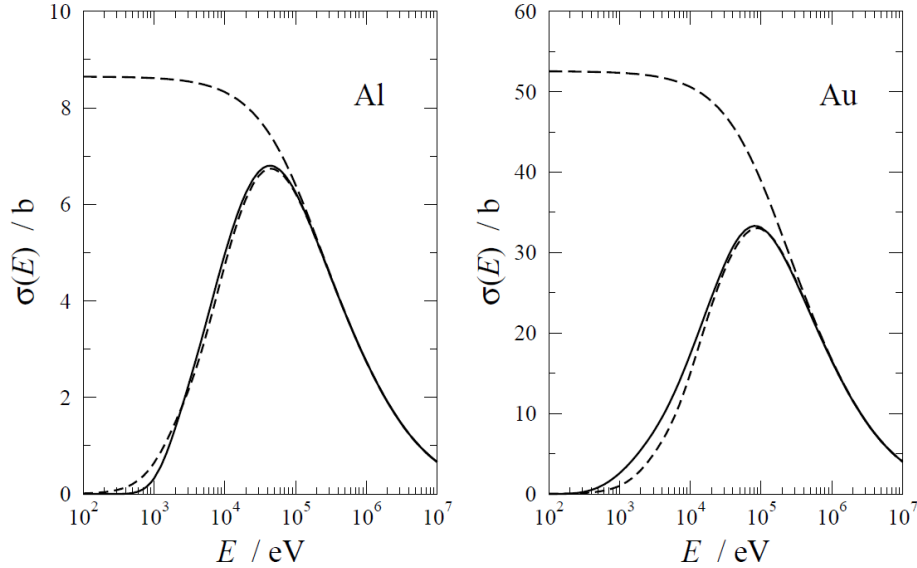


Figura 7. Secciones eficaces Compton de Al y Au. Las curvas a trazos largos y cortos son las predicciones de Klein-Nishina y Waller-Hartree, respectivamente. Las curvas continuas corresponden a la aproximación de impulso relativista, considerado, junto al método de la matriz de dispersión S , uno de los dos formalismos más precisos.

Scattering Compton: aproximaciones de mayor precisión

Existen modelos teóricos más elaborados para describir la dispersión incoherente de fotones teniendo en cuenta que el electrón activo está ligado y en movimiento antes de la colisión. Entre ellos, cabe mencionar: la *aproximación de impulso* y el *método de la matriz S de dispersión*. La aproximación de impulso sólo considera H'_{tot} a primer orden, mientras que el método de la matriz S de dispersión trata H'_{tot} a segundo orden. Desafortunadamente, la dificultad de realizar los cálculos numéricos hace que aún no existan tabulaciones completas basadas en estos formalismos⁹.

1.3.4.. Producción de pares electrón-positrón

En el proceso de la creación de pares, el fotón de energía E “desaparece” y su energía es invertida en crear un electrón y su antipartícula, el positrón. Sea $E_{\pm}$ la energía cinética de estas dos entidades (partícula y anti-partícula) cargadas, e^{-} y e^{+} respectivamente, la conservación de la energía exige que sea: $E = E_{-} + E_{+} + 2m_e c^2$. Puede observarse que la creación de pares sólo será posible si $E > 2m_e c^2 \approx 1,022 \text{ MeV}$. Por otra parte, la conservación de la cantidad de movimiento obliga a que el proceso tenga lugar cerca de una partícula cargada masiva que absorba una pequeña cantidad de movimiento y una fracción despreciable de energía. Esa partícula masiva podrá ser tanto un núcleo como alguno de los electrones atómicos. En este último caso -sólo puede suceder si $E > 4m_e c^2$ - el proceso se denomina *creación de tripletes*, pues el electrón que absorbe la cantidad de movimiento es desligado del átomo.

⁹Válido hacia fines del siglo XX.

El cálculo de las secciones eficaces del proceso de creación de pares es complicado, pues se debe recurrir a la electrodinámica cuántica. Empleando este formalismo, y suponiendo que las partícula/anti-partícula cargadas emergentes son lo bastante rápidas como para poder ser descritas mediante ondas planas (aproximación de Born), Bethe y Heitler obtuvieron una expresión para la sección eficaz diferencial en la energía cinética del electrón creado (E_-)¹⁰:

$$\frac{d\sigma_{BH}^{e^-e^+}}{dE_-} = Z(Z+1)f(Z, E, E_-) \quad (60)$$

No resulta de interés prioritario para los fines de esta exposición, profundizar en los detalles de la función $f(Z, E, E_-)$, pero cabe mencionar que ésta depende del factor de forma atómico. En cambio, sí vale la pena destacar que -tal como se anticipó- aparecen dos contribuciones, una proporcional a Z^2 que da cuenta de la creación de pares en el campo del núcleo y otra proporcional a Z que se debe a la contribución de los Z electrones atómicos al proceso (creación de tripletes).

El ángulo polar promedio de emisión del electrón y del positrón está dado por:

$$\langle \theta_{\pm} \rangle \approx \left(1 + \frac{E}{m_e c^2} \right)^{-1} \quad (61)$$

La sección eficaz total de creación de pares se obtiene al integrar $\frac{d\sigma_{BH}^{e^-e^+}}{dE_-}$ respecto de E_- . La Figura 8 reporta las secciones eficaces de creación de pares y tripletes¹¹ en C, Cu y Pb según la energía del fotón incidente.

1.3.5.. Reacciones fotonucleares

Cuando el fotón tiene una energía superior a algunos MeV cobra importancia la posibilidad de que interactúe directamente con el núcleo atómico. Las reacciones fotonucleares más probables son las de tipo (γ, n) , en las que el fotón arranca un neutrón, que es liberado. Por supuesto, las correspondientes secciones eficaces dependen fuertemente de la energía, así como del nucleido en cuestión (es decir, de Z y A).

1.4.. Coeficiente de atenuación: Introducción

Para cada modo de interacción i (i = “fotoeléctrico”, “Rayleigh”, “Compton”, “creación de pares”, “creación de tripletes”), se define el coeficiente de atenuación (lineal) μ_i dado por:

¹⁰Expresión conocida como fórmula de Bethe-Heitler.

¹¹Físicamente no se viola ningún principio al permitir la producción de tripletes o, incluso, mayor cantidad de partículas en el proceso de conversión masa-energía. Es usual denominar al conjunto de procesos como *creación de pares* bajo el supuesto que representa la posibilidad de creación de diferente cantidad de partículas/anti-partículas.

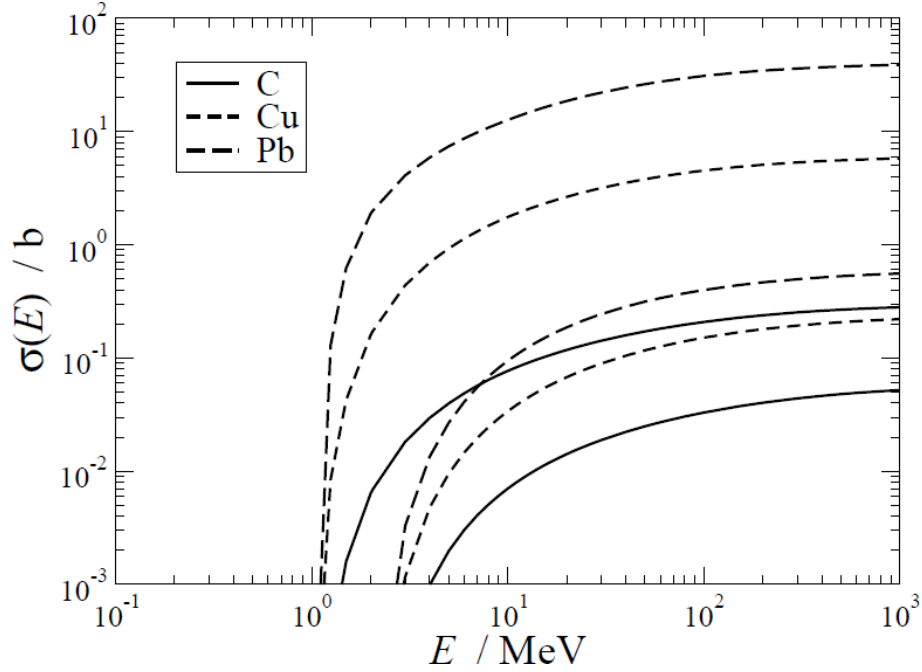


Figura 8. Secciones eficaces de creación de pares (curvas a izquierda, menor energía umbral requerida) y tripletes (curvas a derecha, mayor energía umbral requerida) en C, Cu y Pb.

$$\mu_i \equiv \mathcal{N} \sigma_i \quad (62)$$

donde $\mathcal{N}$ es el número de átomos o moléculas por unidad de volumen. Como $\mathcal{N}$ es proporcional a la densidad másica ρ , resulta más conveniente definir los coeficientes de atenuación másicos parciales μ_i/ρ , y el coeficiente de atenuación másico total:

$$\frac{\mu}{\rho} \equiv \frac{N_{Av}}{A_w} \sum_i \sigma_i \quad (63)$$

Las dos tabulaciones de coeficientes de atenuación másicos más empleadas son la base de datos EPDL '97, de Cullen et al. y la del NIST de Berger-Hubbell. Esta última cubre energías de fotones superiores a 1 keV y se puede generar mediante el programa llamado XCOM. Nótese que, convencionalmente, las tabulaciones de coeficientes de atenuación másicos no incluyen la contribución debida a reacciones fotonucleares. A modo de ejemplo, la Figura 9 reporta los coeficientes de atenuación másicos de Al y Pb generados con XCOM.

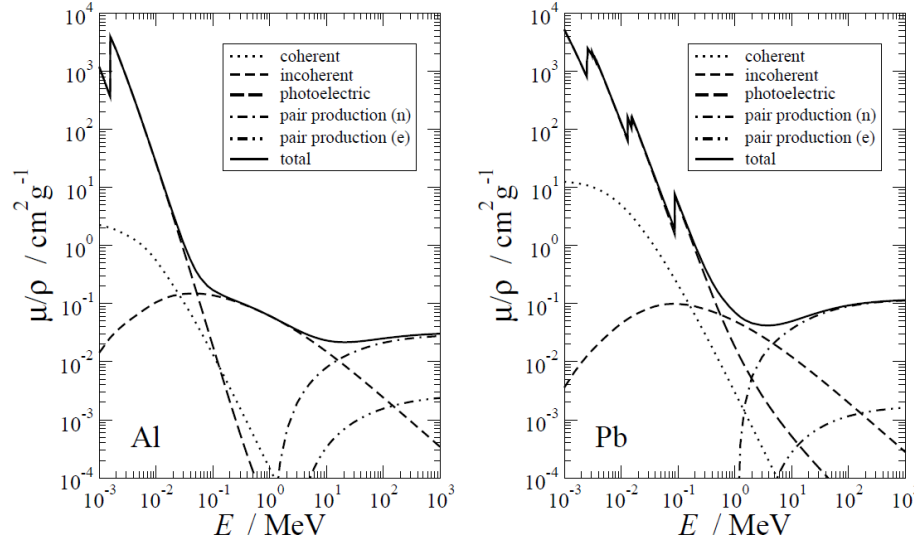


Figura 9. Coeficientes de atenuación másicos de Al y Pb, obtenidos con el programa XCOM.

1.5.. Coeficiente de atenuación másico para compuestos

Cuando el medio por el que se propagan los fotones es un compuesto o una mezcla, el coeficiente de atenuación másico puede aproximarse¹² como sigue:

$$\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{comp} \approx \sum_j w_j \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_j \quad (64)$$

donde la suma se extiende sobre los j componentes elementales (puros) presentes en el compuesto, siendo w_j la fracción en peso del elemento j -ésimo. Nótese que en esta expresión 64 se ignoran los efectos de agregación, ya sean moleculares o de materia condensada.

1.6.. Introducción a la interacción de las partículas cargadas con la materia

Esta sección se concentra en la descripción de los procesos de interacción que experimentan las partículas cargadas (carga $Z_1 q_e$, masa M) al atravesar un medio material de número atómico Z_2 . Se indicará con $\vec{v}$, $\vec{p}$ y E la velocidad, momento lineal y energía cinética del proyectil antes de la colisión, mientras que las variables primadas ($\vec{v}'$, $\vec{p}'$ y E') corresponden a cantidades después de la colisión. Se define, además, las transferencias de momento lineal y energía en la colisión como $\vec{q} \equiv \vec{p} - \vec{p}'$ y $W \equiv E - E'$, respectivamente.

Conviene recordar que, cuando se trata de partículas relativistas, se define $\beta \equiv \frac{v}{c}$ y $\gamma \equiv (1 - \beta^2)^{-\frac{1}{2}}$. El momento lineal y la energía cinética se expresan entonces como $p = \gamma M \beta c$ y $E = (\gamma - 1) M c^2$. Es imprescindible emplear la cinemática relativista cuando $\beta \gtrsim 0,1$, lo cual sucede para electrones y positrones con $E \gtrsim 5$ keV y para partículas cargadas pesadas con $E/M \gtrsim 10$ MeV/u.

¹²Véase, por ejemplo, M. Valente et al., 2018 *Water-equivalence of gel dosimeters for radiology medical imaging*, Appl. Rad. Isot. **141**, pp. 193.198.

Se verá que son posibles colisiones tanto elásticas como inelásticas y la emisión de radiación de frenado. La masa de las partículas cargadas determina la importancia de cada uno de estos modos de interacción. De hecho, las partículas cargadas pesadas ($M \gg m_e$) apenas sufren cambios de dirección y viajan esencialmente en línea recta.

1.6.1.. Scattering elástico de electrones y positrones

Las partículas cargadas pueden interactuar elásticamente con los átomos del material, cambiando de dirección pero sin perder energía, *i.e.* $E' = E$ y $\Psi_f = \Psi_i$.

Sección eficaz diferencial de Rutherford

Considérese un electrón (o positrón) que modifica su dirección de vuelo al interactuar elásticamente con el potencial de Coulomb producido por el núcleo del átomo blanco. El correspondiente Hamiltoniano es H'_{cp1} (expresión 21). Es un hecho notable que para este Hamiltoniano los cálculos no-relativistas clásico y cuántico (tanto exacto como en la aproximación de Born) de la correspondiente sección eficaz diferencial conducen a la misma expresión¹³:

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{(2m_e Z_1 Z_2 q_e^2)^2}{q^4} = \left(\frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{m_e v^2} \right)^2 \frac{1}{(1 - \cos(\theta))^2} \quad (65)$$

Esta es conocida como *fórmula de Rutherford*, y la versión relativista (ignorando el spin) es:

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{(2m_e Z_1 Z_2 q_e^2)^2}{q^4} = \left(\frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{\beta^2 \gamma m_e c^2} \right)^2 \frac{1}{(1 - \cos(\theta))^2} = \left(\frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{(p\beta c)} \right)^2 \frac{1}{(1 - \cos(\theta))^2} \quad (66)$$

La divergencia de la sección eficaz diferencial de Rutherford en $\theta = 0$ es una consecuencia directa de no haber tenido en cuenta el apantallamiento del potencial de Coulomb por los electrones atómicos, *i.e.* haber despreciado H'_{cp2} .

La fórmula de Rutherford con apantallamiento

Una manera relativamente sencilla de evitar los problemas de la fórmula de Rutherford consiste en partir del potencial de Wentzel (V_W):

$$H'_{cp} \sim V_W = \frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{r} e^{-\frac{r}{R}} \quad (67)$$

El factor exponencial reproduce, al menos cualitativamente, los efectos de apantallamiento de la carga nuclear por los electrones atómicos. La distancia de apantallamiento R puede estimarse con ayuda del modelo atómico de Thomas-Fermi, obteniendo:

¹³Véase N. Gauthier, Eur. J. Phys. **21** L17, 2000.

$$R \approx 0,885 Z^{-\frac{1}{3}} a_0 \quad (68)$$

Luego, la sección eficaz diferencial se obtiene empleando la primera aproximación de Born:

$$\frac{d\sigma_{SR}}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{(p\beta c)} \right)^2 \frac{1}{(2A + 1 - \cos(\theta))^2} \quad (69)$$

que es la *fórmula de Rutherford con apantallamiento*. El parámetro de apantallamiento (adimensional) A está dado por:

$$A \equiv \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar}{p} \right)^2 R^{-2} \quad (70)$$

Finalmente, puede calcularse la correspondiente sección eficaz total:

$$\sigma_{SR} = \left(\frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{(p\beta c)} \right)^2 \frac{\pi}{A(A + 1)} \quad (71)$$

Método de ondas parciales

En el caso de energías bajas y números atómicos altos es necesario recurrir a formalismos más sofisticados para obtener las secciones eficaces elásticas. En particular, los métodos basados en los desarrollos en ondas parciales proporcionan una descripción adecuada de estos procesos para energías superiores a unos 100 eV, ya que están en buen acuerdo con las medidas experimentales disponibles. Además dan cuenta de las diferencias en el *scattering* de electrones y positrones, que según la fórmula de Rutherford (con o sin apantallamiento) no debieran existir.

En los últimos años, ICRU ¹⁴ ha revisado a fondo los modelos de dispersión elástica de electrones y positrones y ha elaborado una tabulación basada en el método de ondas parciales relativista. La Figura 10 reporta, a modo de ejemplo, las secciones eficaces diferenciales de Al y Pb para electrones y positrones de varias energías, tomadas de la base de datos del informe 77 de ICRU.

¹⁴International Commission on Radiation Units and Measurements, Inc. (ICRU)

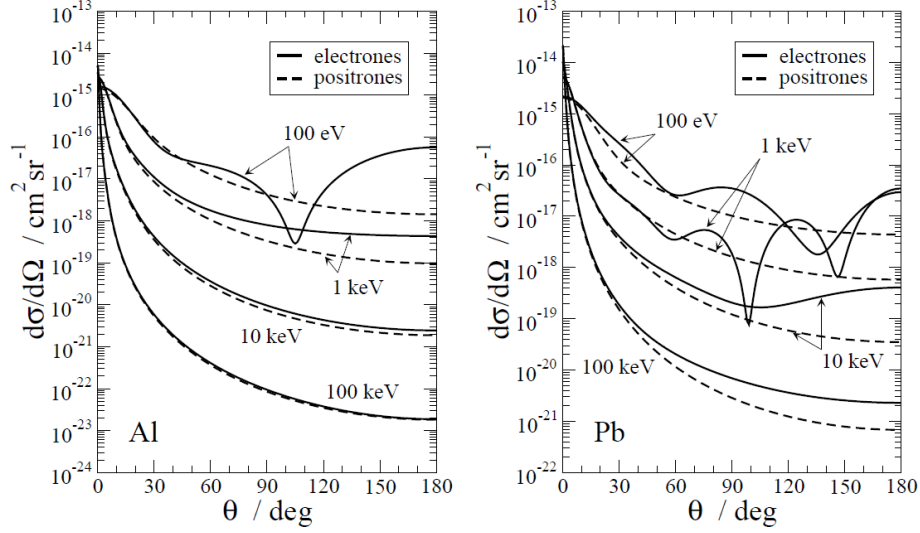


Figura 10. Secciones eficaces diferenciales de *scattering* elástico de electrones (línea sólida) y positrones (línea de trazos) para Al (izquierda) y Pb (derecha).

1.6.2.. Scattering inelástico de electrones y positrones

En estas colisiones la partícula cargada incidente experimenta una reducción de su energía, *i.e.* $E' < E$, que se invierte en excitar o ionizar el átomo blanco ($\Psi_f \neq \Psi_i$). Normalmente, un único electrón -al que se denomina “electrón activo”- efectúa una transición desde un orbital ligado i a otro f , que puede ser ligado (excitación) o libre (ionización). Por supuesto, sólo se podrá ionizar la capa atómica i -ésima si $E > U_i$ mientras que el electrón secundario (rayo δ) se emite con energía cinética $\epsilon_e = W - U_i$.

Fórmulas de Rutherford, Møller y Bhabha

Una manera relativamente simple de abordar el problema consiste en suponer que los Z_2 electrones del átomo blanco están libres y en reposo, de modo que $W \approx \epsilon_e$. La conservación del momentum y energía imponen que la pérdida de energía W del proyectil (no-relativista) cumpla:

$$W \leq W_{\text{máx}} \equiv \frac{2m_e v^2}{\left(1 + \frac{m_e}{M}\right)^2} \quad (72)$$

En esta aproximación, la sección eficaz diferencial (por electrón) en la transferencia de energía W está dada por la fórmula de Rutherford (no-relativista):

$$\frac{d\sigma_R}{dW} = \frac{2\pi Z_1^2 q_e^4}{m_e v^2} \frac{1}{W^2} \quad (73)$$

para $W \leq W_{\text{máx}}$. Vale destacar que $\frac{d\sigma_R}{dW}$ depende de la carga y velocidad del proyectil, pero no de su masa.

Si la partícula cargada es un electrón, la fórmula de Rutherford no es correcta, pues no tiene en cuenta el carácter indistinguible de los electrones incidente y blanco. Debe emplearse en su lugar la *fórmula de Møller* (relativista):

$$\frac{d\sigma_M}{dW} = \frac{2\pi q_e^4}{m_e c^2 \beta^2} \frac{1}{W^2} \left[1 - \frac{W}{E-W} + \left(\frac{W}{E-W} \right)^2 + \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \right)^2 \left(\frac{W}{E-W} + \frac{W^2}{E^2} \right) \right] \quad (74)$$

limitando las pérdidas de energía a $W \leq W_{\text{máx}} = E/2$, pues por convenio se considera que después de la colisión el electrón más energético es el primario.

Cuando la partícula incidente es un positrón, la expresión relativista correcta para la sección eficaz diferencial (por electrón) es la *fórmula de Bhabha*:

$$\frac{d\sigma_B}{dW} = \frac{2\pi q_e^4}{m_e c^2 \beta^2} \frac{1}{W^2} \left[1 - b_1 \frac{W}{E} + b_2 \left(\frac{W}{E} \right)^2 - b_3 \left(\frac{W}{E} \right)^3 + b_4 \left(\frac{W}{E} \right)^4 \right] \quad (75)$$

con $W \leq W_{\text{máx}} = E$ y

$$\begin{aligned} b_1 &\equiv \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \right)^2 \frac{2(\gamma+1)^2-1}{\gamma^2-1} & b_2 &\equiv \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \right)^2 \frac{3(\gamma+1)^2-1}{(\gamma+1)^2} \\ b_3 &\equiv \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \right)^2 \frac{2\gamma(\gamma-1)}{(\gamma+1)^2} & b_4 &\equiv \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \right)^2 \frac{(\gamma-1)^2}{(\gamma+1)^2} \end{aligned} \quad (76)$$

El factor $\frac{1}{W^2}$ presente en todas estas expresiones indica que predominarán las colisiones con pequeñas pérdidas de energía. Sin embargo, la divergencia en $W = 0$ no se debe producir, pues los electrones atómicos no están libres sino ligados.

Aproximación de Born con ondas planas (no-relativista)

Un modelo más realista, que tiene en cuenta los efectos de ligadura y movimiento de los electrones atómicos (y por tanto evita la divergencia de las fórmulas de Rutherford, Möller y Bhabha en $W = 0$), está basado en la aproximación de Born con ondas planas. Este formalismo trata la perturbación H'_{cp} , a primer orden y proporciona una expresión para la sección eficaz doble diferencial de ionización del orbital atómico i -ésimo ($\frac{d^2\sigma_i}{d\Omega dW}$) tomando ondas planas como funciones de onda no perturbadas del proyectil. En concreto, en el caso no-relativista:

$$\frac{d^2\sigma_i}{dQ dW} = \frac{2\pi Z_1^2 q_e^4}{m_e v^2} \frac{1}{W Q} \frac{df_i(Q, W)}{dW} \quad (77)$$

donde en vez del ángulo polar de dispersión θ del proyectil (o el ángulo sólido) es más conveniente utilizar la variable

$$Q \equiv \frac{q^2}{2m_e} = \frac{M}{m_e} \left[2E - W - 2\sqrt{E(E-W)} \cos(\theta) \right] \quad (78)$$

Los primeros factores de la expresión 77 son puramente cinemáticos, mientras que el último describe la respuesta del átomo blanco a la perturbación causada por el proyectil incidente. Este último factor se conoce como *intensidad de oscilador generalizada*, y se calcula a partir de las funciones de onda inicial y final del átomo ionizado:

$$\frac{df_i(Q, W)}{dW} = \frac{W}{Q} |\langle \Psi_f | \sum_{j=1}^{Z_2} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{r}_j} | \Psi_i \rangle|^2 \quad (79)$$

Expresando las funciones de onda atómicas Ψ_i y Ψ_f como determinantes de Slater que difieren únicamente en el orbital de spin monoparticular del electrón activo, el elemento de matriz se reduce a $\langle \Psi_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{r}} | \Psi_i \rangle$. La intensidad de oscilador generalizada del orbital 1S del átomo de hidrógeno admite una expresión analítica, pero la de los orbitales de átomos multielectrónicos ha de calcularse numéricamente tras efectuar un desarrollo en ondas parciales de la función de onda Ψ_f del orbital libre.

La sección eficaz diferencial en la transferencia de energía W se obtiene integrando la expresión 77 respecto de Q :

$$\frac{d\sigma_i}{dW} = \int_{Q_-}^{Q_+} \frac{d^2\sigma_i}{dQ dW} \wedge Q_{\pm} \equiv Q \cos(\theta) = \pm 1. \quad (80)$$

Las predicciones de la fórmula de Rutherford están en buen acuerdo con los resultados que se obtienen de la ecuación anterior (80) sólo para $U_i \ll W < W_{\text{máx}}$, *i.e.* cuando la transferencia de energía es tan grande que los efectos de ligadura y movimiento pasan a ser irrelevantes. Además, $\frac{d\sigma_i}{dW} = 0$ para $W < U_i$, lo que elimina la divergencia de la fórmula de Rutherford en $W = 0$.

En el límite $Q \rightarrow 0$ la intensidad de oscilador generalizada es proporcional a la sección eficaz de efecto fotoeléctrico calculada en la aproximación dipolar eléctrica. En cambio, para valores grandes de W y Q los N_i electrones del orbital activo se comportan como si estuvieran libres y en reposo, y entonces:

$$\frac{df_i(Q, W)}{dW} \approx N_i \delta(W - Q) \quad (81)$$

Cabe destacar que empleando esta aproximación e integrando la expresión 80 respecto de los valores cinemáticamente permitidos de Q se recupera la fórmula de Rutherford.

Finalmente, la sección eficaz inelástica total para la ionización de la capa atómica considerada es:

$$\sigma_i(E) = \int_{U_i}^E \frac{d\sigma_i}{dW} dW \quad (82)$$

que toma un valor finito.

Métodos más precisos para la ionización de capas atómicas por impacto de e^-/e^+

La aproximación de Born con ondas planas predice que las secciones eficaces (diferenciales y totales) de ionización son iguales para e^- y e^+ . Esta sobresimplificación puede evitarse si se emplea la *aproximación de Born con ondas distorsionadas*. En este formalismo, parte de la perturbación H_{cp} se incluye en el Hamiltoniano H_0 , con lo que la función de onda de orden cero del proyectil pasa a ser una onda distorsionada. La nueva “perturbación”, que es “menor” que H_{cp} se trata a primer orden.

Trabajos como la referencia [23] contienen una parametrización, basada en las aproximaciones de Born con ondas planas y distorsionadas (relativistas), de las secciones eficaces de ionización de las capas K , L y M de todos los átomos por impacto de electrones y positrones. La Figura 11 presenta estas secciones eficaces para las capas más internas del Al.

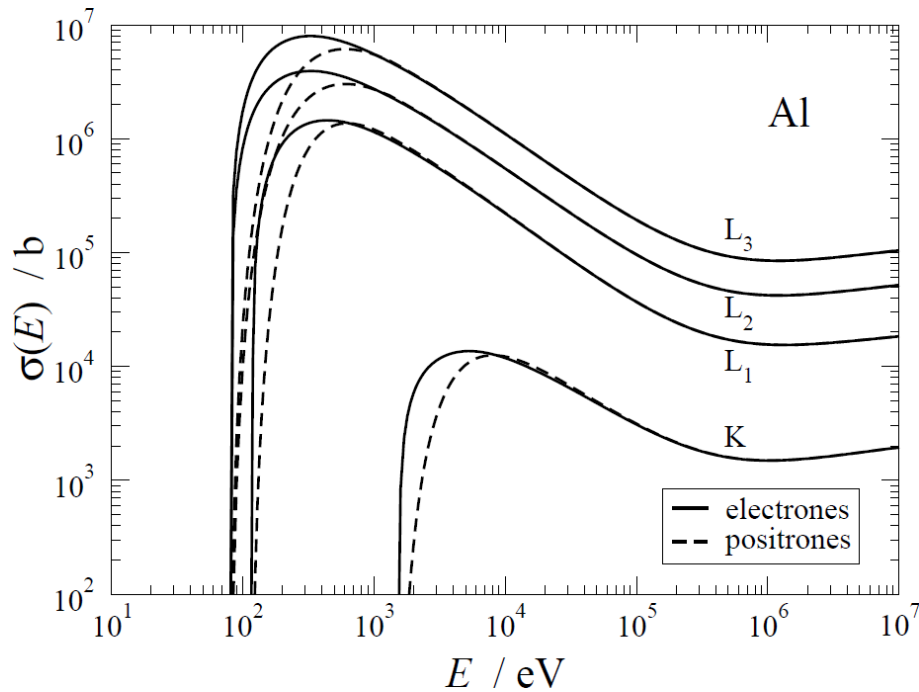


Figura 11. Sección eficaz de ionización de las capas $1s_{1/2}$, $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ y $2p_{3/2}$ del átomo de Al por impacto de electrones (curvas continuas) y positrones (curvas a trazos).

1.6.3.. Scattering inelástico de iones positivos “vestidos”

Un ión de carga positiva (protón, partícula α , etc.) puede viajar acompañado de uno o varios electrones que reducen su carga neta, apantallándolo parcial o totalmente. Se dice que es un “ión vestido”. Es posible incorporar este apantallamiento en la expresión de la sección eficaz doble diferencial (80) reemplazando Z_1 por $Z_1 - F(q, Z_1)$, donde $F(q, Z_1)$ es el factor de forma atómico del proyectil. Dado que $0 \leq F(q, Z_1) \leq Z_1$, la interacción del ión vestido es menor que cuando se trata de una carga $Z_1 q_e$ “desnuda”.

Además, en el transcurso de la colisión el ión puede capturar o perder un electrón, modificando su estado de carga. Las correspondientes secciones eficaces de captura y pérdida varían con la velocidad del proyectil, predominando los procesos de captura/pérdida a velocidades bajas/altas, respectivamente.

1.6.4.. Emisión de radiación de frenado o Bremsstrahlung

Es bien sabido que las partículas cargadas emiten radiación electromagnética (radiación de frenado Bremsstrahlung) cuando están sometidas a aceleraciones. Un resultado de la electrodinámica clásica indica que la intensidad de radiación ha de ser proporcional al cuadrado de la aceleración. Recurriendo a la primera ley de Newton, y sabiendo que la interacción Coulombiana es la responsable de la fuerza que da lugar a dicha aceleración, se deduce que la intensidad será proporcional a los cuadrados de las cargas del proyectil y del núcleo, e inversamente proporcional al cuadrado de la masa de la partícula. Este resultado cualitativo indica que la emisión de Bremsstrahlung es muchos órdenes de magnitud más baja (prácticamente despreciable) para partículas cargadas pesadas ($M \gg m_e$) que para electrones y positrones. De hecho, la emisión de Bremsstrahlung acaba siendo el proceso dominante de pérdida de energía de estos leptones ¹⁵ cuando su energía es suficientemente alta.

Del mismo modo que para el caso de la creación de pares, hay que recurrir a la electrodinámica cuántica para obtener expresiones de las secciones eficaces. Como la emisión de Bremsstrahlung es un proceso emparentado con la creación de pares, no es de extrañar que Bethe y Heitler establecieran también una fórmula para este proceso, basada en la aproximación de Born:

$$\frac{d\sigma_{BH}}{dW} = Z(Z+1) \frac{1}{W} f(Z, E, W) \quad (83)$$

donde W es igual a la energía del fotón emitido. La función $f(Z, E, W)$ involucra el factor de forma atómico y es complicada de calcular. El factor $\frac{1}{W}$ indica que será más probable la emisión de fotones poco energéticos, y el factor $Z(Z+1)$ da cuenta de las contribuciones del núcleo y de los electrones atómicos.

Seltzer y Berger prepararon, sintetizando diferentes modelos teóricos (cálculos de ondas parciales, aproximación de Bethe-Heitler), una tabulación de secciones eficaces diferenciales reducidas:

$$\chi(Z, E, W/E) = \frac{\beta^2}{Z^2} W \frac{d\sigma}{dW} \quad (84)$$

para electrones con energías comprendidas entre 1 keV y 10 GeV. La Figura 12 presenta algunas de estas funciones para Al y Pb.

¹⁵Electrones y positrones son clasificados dentro del conjunto denominado “leptones”, que refiere - brevemente- a partículas con spin $\pm 1/2$ (-1/2 en el caso de los neutrinos y $\pm 1/2$ en los demás, “fermiones”) que no experimenta interacción fuerte.

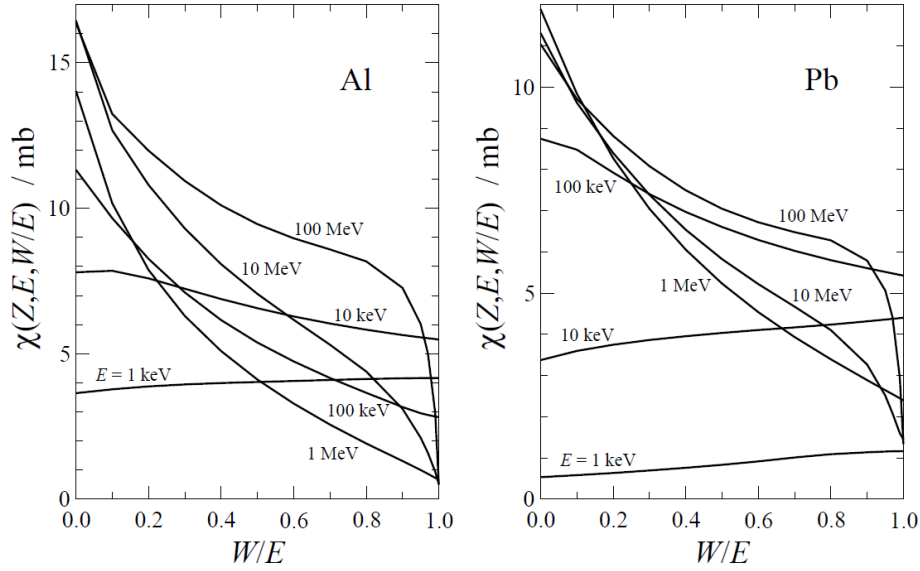


Figura 12. Secciones eficaces diferenciales reducidas para la emisión de Bremsstrahlung por electrones en Al (izquierda) y Pb (derecha).

La distribución angular del fotón emitido se obtiene a partir de la sección eficaz doble diferencial. En concreto, dados Z , E y W/E la densidad de probabilidad de $\cos(\theta)$ es:

$$p(Z, E, W/E, \cos(\theta)) = \frac{d^2\sigma}{dW d(\cos(\theta))} \quad (85)$$

Kissel et al. calcularon secciones eficaces diferenciales, empleando métodos de ondas parciales, para electrones con energía cinética entre 1 y 500 keV, y a partir de sus resultados tabularon $p(Z, E, W/E, \cos(\theta))$ para unos cuantos valores de Z , E y W/E . Éstos y otros autores han propuesto fórmulas analíticas que permiten obtener la densidad de probabilidad de $\cos(\theta)$ cuando el número atómico o la energía no se corresponden con los de las tablas. También existen en la literatura expresiones analíticas sencillas para estimar la distribución angular en el límite de altas energías. En este límite $\gamma \gg 1$ el ángulo polar promedio de emisión del fotón de Bremsstrahlung disminuye al aumentar la energía del electrón siguiendo la relación aproximada:

$$\langle \theta \rangle \approx \gamma^{-1} \quad (86)$$

Una descripción detallada, desde principios de electrodinámica clásica a modelos cuánticos de la emisión de Bremsstrahlung para electrones en regímenes típicos de aplicaciones en física médica se encuentra en Valente et al. *Characterisation of a megavoltage linear accelerator Bremsstrahlung by means of Monte Carlo simulations*. *X-ray Spectrometry* **39** (6), 2010

1.6.5.. Aniquilación e^+e^-

Como se vió, los positrones interactúan con la materia de manera similar a como lo hacen los electrones (aunque las correspondientes secciones eficaces no son idénticas). Sin embargo, al ser el positrón la antipartícula del electrón, es inestable mientras se propaga por la materia, pudiéndose aniquilar ambos en uno o varios fotones. Lo más probable es que la aniquilación tenga lugar una vez que el positrón se encuentra prácticamente en reposo (después de frenarse) y se emitan dos fotones. Las leyes de conservación de energía y momento lineal obligan entonces a que éstos tengan una energía igual a $m_e c^2 \approx 511$ keV y viajen en la misma dirección y sentidos contrarios.

1.6.6.. Scattering elástico múltiple de electrones y positrones

Los recorridos libres medios entre colisiones elásticas de electrones o positrones son muy pequeños. Como consecuencia de este hecho, si un electrón/positrón recorre un cierto camino s dentro del medio material en el que se mueve, experimentará numerosas deflexiones angulares, aunque la mayor parte de ellas será de ángulo pequeño, relativamente. Despreciando las pérdidas de energía, se considera un régimen de *condiciones de dispersión elástica múltiple*.

Conviene entonces recurrir a una descripción global del cambio de dirección tras recorrer la distancia s . El objetivo es por tanto determinar, dado un valor de s , la distribución $p(\Theta, s)$ de ángulos polares de dispersión acumulados Θ .

Modelo gaussiano de scattering elástico múltiple de e^- y e^+

Se presenta en esta sección un modelo que permite evaluar de un modo simple la distribución de ángulos Θ en función de s . La Figura 13 indica esquemáticamente la situación que se aborda: Θ_x es el ángulo proyectado sobre el plano $x-z$.

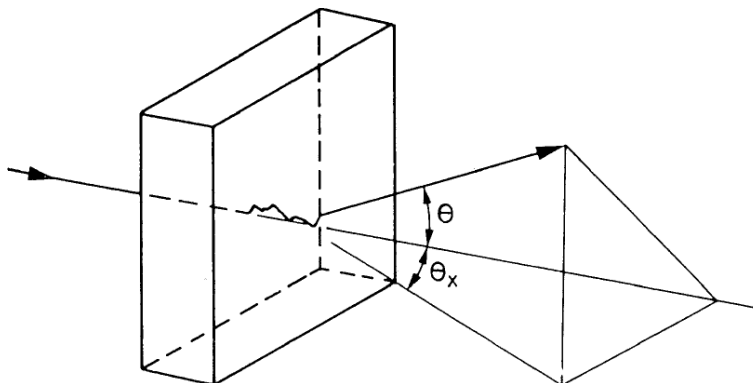


Figura 13. *Scattering* elástico múltiple. (manual de ENELOPE v. 2008 y Fernández-Várea et al.)

Debido a la simetría axial del problema, se tiene que $\langle \Theta_x \rangle = 0$, y por tanto la varianza de Θ_x será igual a $\langle \Theta_x \rangle^2$. Como ya mencionado, Θ_x es el resultado de numerosos cambios de dirección diminutos. El teorema del límite central garantiza que en estas condiciones la distribución ha de ser Gaussiana, luego:

$$p(\Theta_x, s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\langle \Theta_x \rangle^2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{\Theta_x^2}{\langle \Theta_x \rangle^2}} \quad (87)$$

y una expresión análoga para $p(\Theta_y, s)$.

Visto que $\Theta^2 \approx \Theta_x^2 + \Theta_y^2$ (aproximación de ángulos pequeños) y $\langle \Theta_x^2 \rangle = \langle \Theta_y^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle \Theta^2 \rangle$. Luego,

$$p(\Theta, s) = p(\Theta_x, s)p(\Theta_y, s) = \frac{1}{\pi\langle \Theta^2 \rangle} e^{-\frac{\Theta^2}{\langle \Theta^2 \rangle}} \quad (88)$$

Sólo queda por determinar el valor de $\langle \Theta^2 \rangle$, que es proporcional al número de colisiones promedio s/λ y al valor esperado de θ^2 en una colisión:

$$\langle \Theta^2 \rangle = \frac{s}{\lambda} \langle \theta^2 \rangle = s \mathcal{N} \int_{\mathfrak{R}^+} \theta^2 \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi\theta d\theta \quad (89)$$

lo cual depende de la sección eficaz diferencial elástica adoptada, por ejemplo la fórmula de Rutherford apantallada relativista.

Considerando que $\langle \Theta^2 \rangle \propto s$, puede definirse el *poder de scattering/dispersión* T :

$$T \equiv \frac{d\langle \Theta^2 \rangle}{ds} \quad (90)$$

lo que proporciona el incremento de $\langle \Theta^2 \rangle$ por unidad de recorrido ¹⁶. El modelo Gaussiano presentado es válido para ángulos $\Theta \ll 1$ rad y está emparentado con el modelo de Fermi-Eyges.

Distribuciones angulares de Goudsmit-Saunderson y de Molière

Goudsmit y Saunderson obtuvieron en 1940 la siguiente expresión (91) para la distribución angular de un electrón que ha recorrido un trayecto s :

$$p(\Theta, s) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} e^{-\frac{s}{\lambda_\ell}} P_\ell(\cos(\Theta)) \quad (91)$$

donde los P_ℓ son polinomios de Legendre y

¹⁶ICRU publica tablas con poderes de dispersión máscicos, T/ρ , para diversos materiales.

$$\lambda_\ell \equiv \mathcal{N} \int_{-1}^1 [1 - P_\ell(\cos(\theta))] \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi d(\cos(\theta)) \quad (92)$$

Este resultado es más realista que la aproximación Gaussiana, pues es válido para ángulos Θ arbitrarios y cualquier sección eficaz diferencial elástica.

La Figura 14 presenta, a modo de ejemplo, las distribuciones angulares de electrones de 1 MeV en Al después de recorrer distancias s iguales a $10 \mu\text{m}$ y $20 \mu\text{m}$ (49.4 y 98.8 colisiones elásticas en promedio, respectivamente).

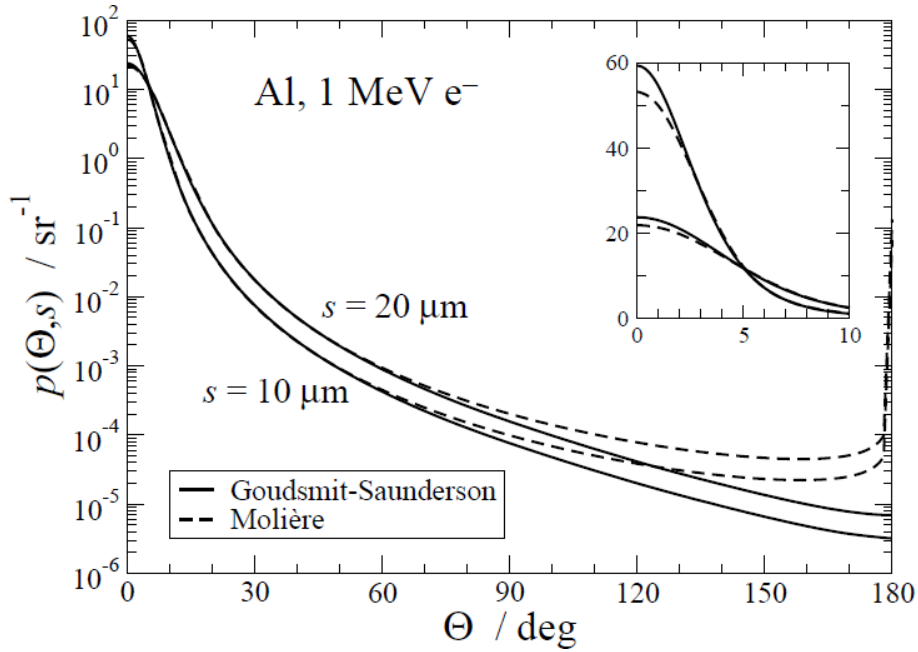


Figura 14. Distribuciones angulares de electrones de 1 MeV tras recorrer $10 \mu\text{m}$ y $20 \mu\text{m}$ en Al. Las curvas continuas y a trazos corresponden a las distribuciones de Goudsmit-Saunderson y de Molière, respectivamente.

Las distribuciones de Goudsmit-Saunderson y Molière están en buen acuerdo excepto para ángulos acumulados Θ grandes, cuyas probabilidades son muy pequeñas. Obsérvese la anomalía que presenta la distribución de Molière en $\theta = 180$. También se aprecia discrepancias entre ambos modelos de $p(\Theta, s)$ para ángulos cercanos a cero, aunque son poco relevantes pues los correspondientes ángulos sólidos son pequeños.

1.6.7.. Scattering inelástico múltiple de electrones y positrones

Al igual que en el caso de dispersión elástica múltiple, resulta de interés lograr una descripción global de las colisiones inelásticas que experimenta una partícula cargada al

recorrer una distancia s mucho mayor que el correspondiente recorrido libre medio inelástico (que es pequeño). Se trata de condiciones de *scattering/dispersión inelástico múltiple*. De manera análoga, surge una distribución Gaussiana en la pérdida de energía acumulada W . No obstante, es usual simplificar aún más esta descripción, y se adopta la denominada *aproximación de frenado continuo*, que retiene el valor promedio de W pero desprecia las fluctuaciones estadísticas. Es decir, sólo interesa el valor medio de la Gaussiana sin tomar en cuenta la varianza (ni, por supuesto, tampoco momentos de orden superior).

La cantidad clave en esta forma de proceder es el *stopping power / poder de frenado*, definido como la pérdida de energía cinética por unidad de recorrido (S):

$$S \equiv -\frac{dE}{ds} = \frac{\langle W \rangle}{\lambda} = \mathcal{N} \int_0^E W \frac{d\sigma}{dW} dW \quad (93)$$

En el caso de electrones y positrones, las pérdidas de energía pueden deberse a colisiones inelásticas y a la emisión de Bremsstrahlung, por lo que se definen el *stopping power / poder de frenado de colisión*, S_{col} , y el de radiación (o radiativo), S_{rad} ; respectivamente. Recordando que $S_{rad} \approx 0$ para partículas cargadas pesadas.

Stopping power de colisión o electrónico

En 1915, previo a la formulación de la mecánica cuántica, Bohr dedujo el poder de frenado de partículas cargadas pesadas suponiendo que los electrones atómicos están ligados armónicamente, obteniendo:

$$S_{col} = \frac{4\pi Z_1^2 q_e^4}{m_e v^2} \mathcal{N} Z_2 \ln \left[\frac{1,123 m_e v^3}{Z_1 q_e^2 \langle w \rangle} \right] \quad (94)$$

donde la frecuencia angular promedio $\langle w \rangle$ se define mediante:

$$Z_2 \ln(\langle w \rangle) = \sum_j f_j \ln(w_j) \quad (95)$$

Esta fórmula es válida para partículas α lentas e iones pesados (incluyendo fragmentos de fisión), pero sobreestima el poder de frenado de electrones, protones e incluso partículas α rápidas.

Trabajando en el formalismo de la mecánica cuántica, S_{col} puede calcularse a partir de la expresión 93, con la sección eficaz diferencial $\frac{d\sigma}{dW}$. Este procedimiento requiere evaluar la intensidad de oscilador generalizada con las funciones de onda de todos los electrones de los átomos del medio. Como éstas son complicadas de obtener en el caso de un sólido, resulta más práctico realizar de entrada simplificaciones que eviten tener que calcularlas.

Hacia 1930, Bethe pudo deducir una expresión analítica para S_{col} empleando la aproximación de Born con ondas planas, con la hipótesis adicional de que la partícula cargada se mueve mucho más rápido que los electrones atómicos. Este importante resultado, conocido como *fórmula de Bethe* (no-relativista), es:

$$S_{col} = \frac{4\pi Z_1 q_e^2}{m_e v^2} \mathcal{N} Z_2 \ln \left[\alpha \frac{m_e v^2}{I} \right] \quad (96)$$

donde:

$$\alpha = \begin{cases} 2 & \text{part. cargadas pesadas} \\ 1 & \text{positrones} \\ \sqrt{e/8} \approx 0,583 & \text{electrones} \end{cases} \quad (97)$$

La magnitud más relevante que aparece en esta expresión es la *energía media de excitación*, I , una propiedad de cada sustancia que debe determinarse experimentalmente o mediante la relación:

$$Z_2 \ln(I) = \int_{\Re^+} \frac{df(Q=0, W)}{dW} \ln(W) dW \quad (98)$$

donde $\frac{df(Q=0,W)}{dW}$ es la intensidad de oscilador en aproximación óptica.

Nótese la similitud de esta expresión con la ecuación 95. Los valores de I para los elementos de la tabla periódica se han representado en la Figura 15. Obsérvese que, salvo oscilaciones características, $I \approx 10 \times Z_2$ eV para $Z_2 \geq 15$. Otro aspecto notable de la fórmula de Bethe es que el poder de frenado depende de la velocidad y la carga de la partícula, pero no de su masa.

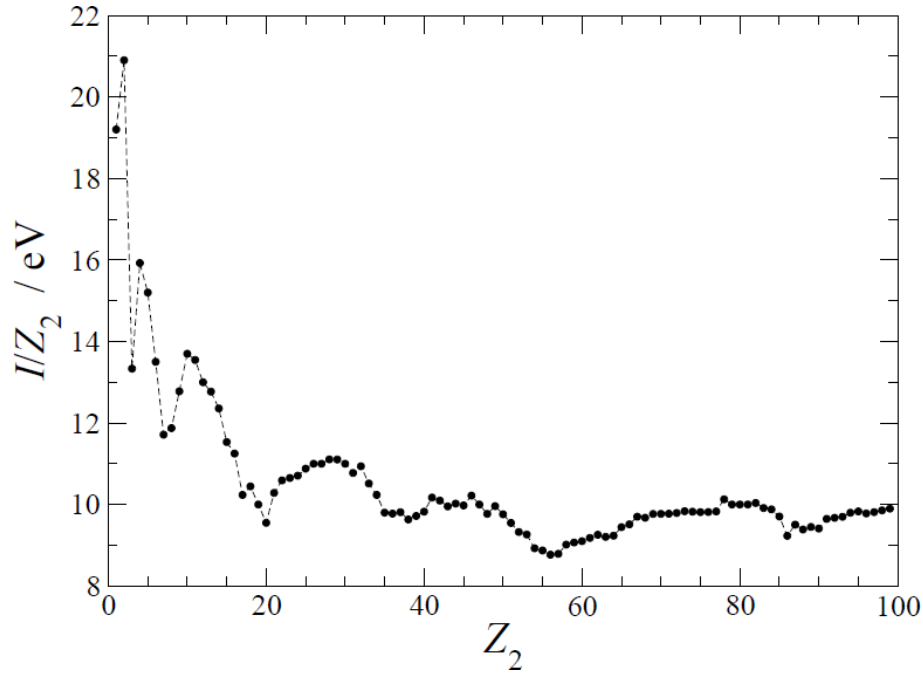


Figura 15. Energías medias de excitación I en función del número atómico del blanco/centro dispersor Z_2 (ICRU 37 *Stopping Powers for Electrons and Positrons*).

La validez de la fórmula de Bethe puede ser extendida a energías mayores y menores incluyendo varios efectos que no son tenidos en cuenta por la expresión 96. Introduciendo $\mathcal{N}$ ($=N$ en 1), y el radio clásico del electrón r_e , la expresión resultante es la *fórmula de Bethe-Bloch* para el poder de frenado másico por colisión de partículas cargadas pesadas.

$$\frac{S_{col}}{\rho} = \frac{K}{\beta^2} \frac{Z_2}{A} Z_1^2 L(\beta) \quad (99)$$

donde:

$$K \equiv 4\pi r_e^2 c^2 / m_u = 0,307 \text{ MeV cm}^2 / \text{g} \quad \wedge \quad L(\beta) = L_0 + Z_1 L_1 + Z_1^2 L_2 + \dots \quad (100)$$

$L(\beta)$ es una función adimensional. El primer término de esta serie es:

$$L_0(\beta) = \ln \left(\frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2}{I} \right) - \beta^2 - \frac{C}{Z_2} - \frac{\delta}{2} \quad (101)$$

e incluye una corrección de capas, C/Z_2 , y una corrección por *efecto de densidad*, δ . Los términos $Z_1 L_1$ y $Z_1^2 L_2$ extienden el tratamiento más allá de la primera aproximación de Born añadiendo términos de orden superior en la serie de Born.

La corrección por efecto de densidad da cuenta de la reducción del poder de frenado debido a la polarización del medio, más apreciable cuanto mayor es la energía del proyectil como muestra la Figura 16.

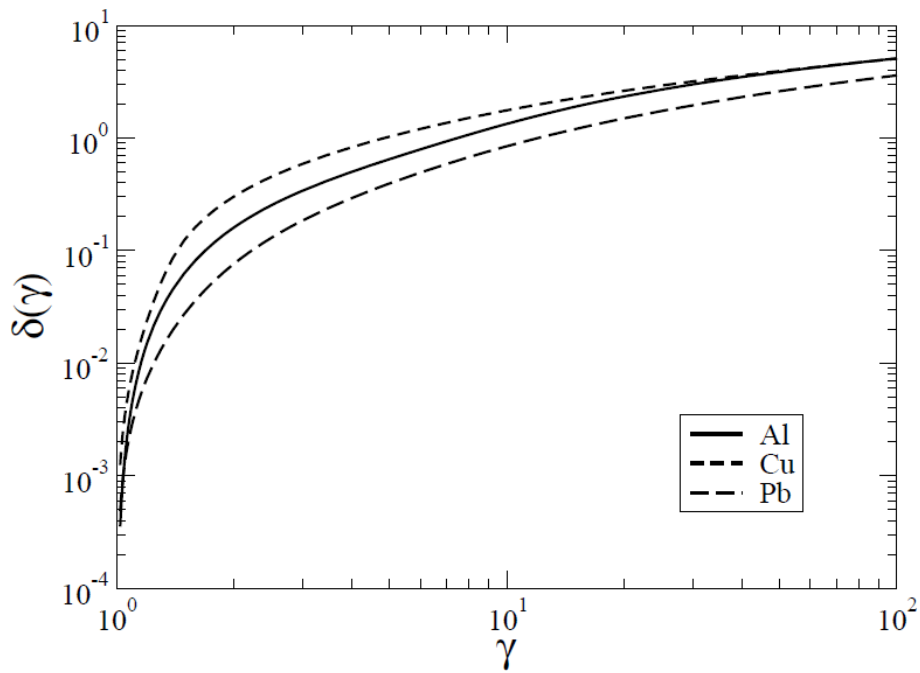


Figura 16. Efecto de densidad de Al, Cu y Pb (ICRU 37 *Stopping Powers for Electrons and Positrons*).

Vale la pena indicar que, dada una sustancia, δ sólo depende de la velocidad de la partícula cargada o, equivalentemente, del factor relativista γ .

El término $Z_1 L_1$ se conoce como corrección de Barkas, y origina diferencias en el poder de frenado de partículas de carga opuesta (como por ejemplo un protón y un antiprotón). Este fenómeno fue observado por Barkas y colaboradores en los años cincuenta. Varios autores han evaluado $Z_1 L_1$ teóricamente, aunque los valores de Ashley, Ritchie y Brandt son los más usados. El término $Z_1^2 L_2$ resulta de una extensión de la fórmula de Bethe debida a Bloch, por lo que se le denomina corrección de Bloch. Incorpora, de modo aproximado,

la perturbación de las funciones de onda de los electrones atómicos causada por el proyectil incidente. Este término puede ser escrito en la forma:

$$Z_1^2 L_2 = -y^2 \sum_{n=1}^{\infty} [n(n^2 + y^2)]^{-1} \quad (102)$$

con $y \equiv Z_1 v_0 / v = Z_1 \alpha / \beta$. $Z_1^2 L_2 \approx 0$ si $y \ll 1$, mientras que para $y \approx 1$ es

$$Z_1^2 L_2 \approx -c_E - \ln(y) \quad (103)$$

donde $c_E = 0,577216 \dots$ es la constante de Euler.

Sumando este valor asintótico al límite no-relativista de la ecuación 101 (con $C/Z_2 = 0$ y $\delta = 0$), se recupera la expresión clásica de Bohr para el poder de frenado.

Stopping power de iones vestidos

En el caso de partículas cargadas pesadas positivas, sólo si viajan con velocidades elevadas pueden ser considerados como iones desnudos de carga Z_1 . En cambio, conforme se van frenando aumenta la probabilidad de capturar electrones del medio atravesado; el ión viaja entonces parcial o totalmente apantallado. El estado de carga promedio $\langle Q \rangle$ es el resultado del equilibrio dinámico entre estos procesos de captura y pérdida de electrones. Una expresión muy empleada para $\langle Q \rangle$ es la debida a Northcliffe:

$$\langle Q \rangle = Z_1 \left[1 - e^{-\frac{v}{v_0 Z_1^{2/3}}} \right] \quad (104)$$

donde v_0 es la velocidad de Bohr.

La Figura 17 se presenta los estados de carga promedio de varios iones ligeros en función de su velocidad, calculados con la ecuación 104. Puede observarse que $\langle Q \rangle \rightarrow 0$ cuando $v \rightarrow 0$, mientras que $\langle Q \rangle \rightarrow Z_1$ si $v \gg v_0 Z_1^{2/3}$.

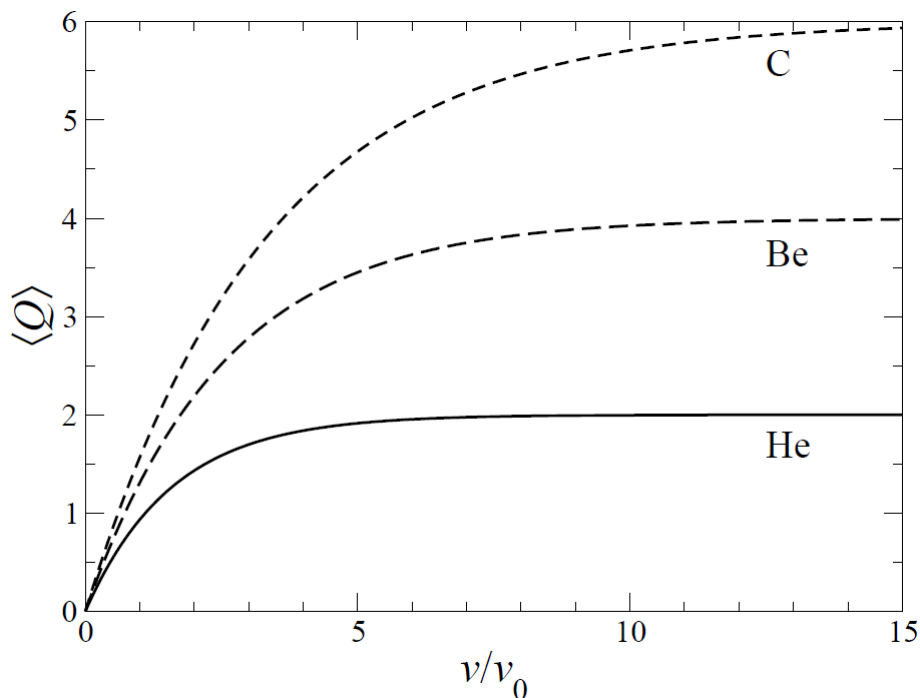


Figura 17. Estado de carga promedio de iones de He, Be y C en función de su velocidad, calculado con la ecuación 104.

Para tener en cuenta este fenómeno, en la fórmula de Bethe-Bloch, se suele reemplazar Z_1 por una carga efectiva $Z_1^*(v) \leq Z_1$ que reduce el poder de frenado electrónico. Tomar $Z_1^*(v) = \langle Q \rangle$ es una buena aproximación, siempre y cuando Z_1 no sea demasiado grande.

ICRU ha publicado tablas con valores recomendados de S_{col}/ρ para protones y partículas α ; estos valores pueden generarse fácilmente empleando los programas PSTAR¹⁷ y ASTAR¹⁸, respectivamente.

A modo de ejemplo, la Figura 18 muestra los poderes de frenado máxicos electrónicos de protones y partículas α en Al, Cu y Pb. Recientemente ICRU también ha proporcionado tablas de S_{col}/ρ para iones comprendidos entre el Li y el Ar.

¹⁷url: <https://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/PSTAR.html>

¹⁸url: <https://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/ASTAR.html>

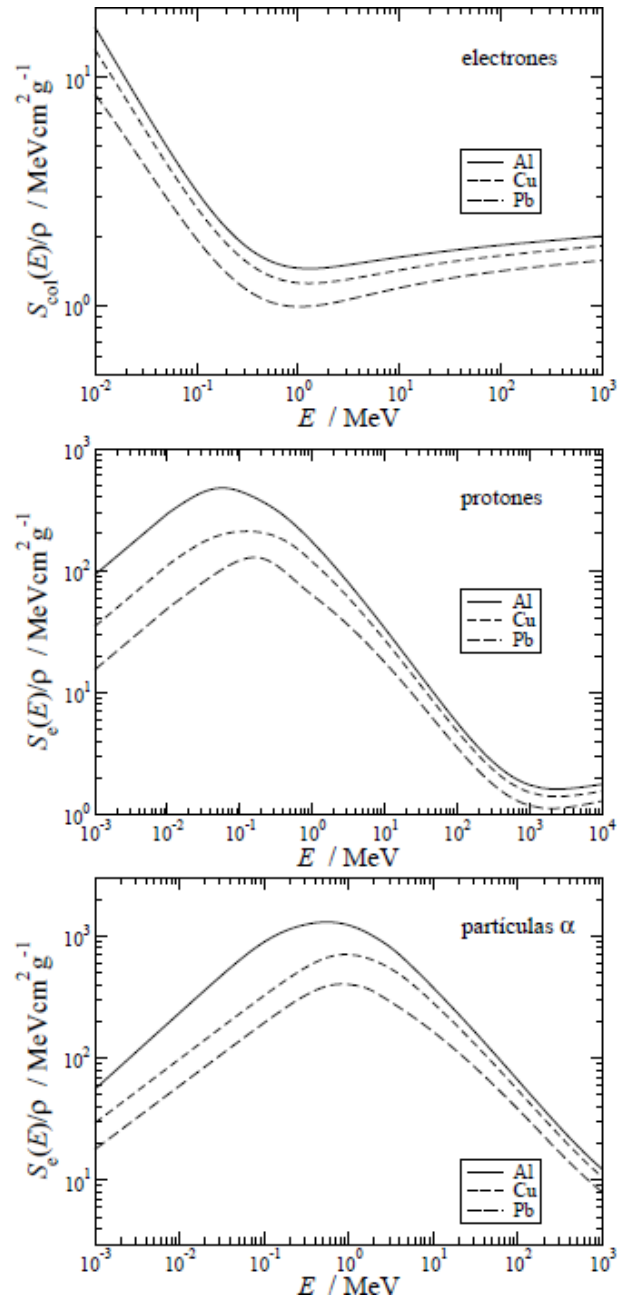


Figura 18. Poder de frenado másico por colisión de electrones, protones y partículas α en Al (arriba), Cu (centro) y Pb (abajo).

Stopping power de electrones y positrones

El *stopping power* por colisión de electrones y positrones relativistas está dado por:

$$S_{col} = \mathcal{N} Z_2 \frac{2\pi q_e^4}{m_e c^2 \beta^2} \left[\ln \left(\frac{E^2 \gamma + 1}{I^2} \right) + f^\pm(\gamma) - \delta \right] \quad (105)$$

Con:

$$f^-(\gamma) = \gamma^{-2} \left[1 - (2\gamma - 1) \ln(2) + \frac{1}{8}(\gamma - 1)^2 \right] \quad (106)$$

$$f^+(\gamma) = 2 \ln(2) - \frac{1 - \gamma^{-2}}{12} \left[23 + \frac{14}{\gamma + 1} + \frac{10}{(\gamma + 1)^2} + \frac{4}{(\gamma + 1)^3} \right] \quad (107)$$

ICRU ha publicado tabulaciones extensas con valores recomendados de S_{col}/ρ para numerosos materiales. La Figura 19 muestra los poderes de frenado másicos por colisión de electrones en Al, Cu y Pb. Los valores de S_{col}/ρ han sido obtenidos empleando el programa estar.

Regla de Bragg-Kleeman

Cuando el medio por el que se propagan las partículas cargadas es un compuesto o una mezcla, en las expresiones de S_{col} debe emplearse el valor de I determinado experimentalmente para la sustancia en cuestión. Cuando esto no es posible por desconocerse I procederemos, análogamente al caso de fotones, haciendo:

$$\frac{S_{col}}{\rho} = \sum_j w_j \left(\frac{S_{col}}{\rho} \right)_j \quad (108)$$

indicando w_j la fracción en peso del elemento j -ésimo. Como $S_{col}/\rho \propto (Z/A) \ln(I)$ (cuando el ión es suficientemente rápido), esta regla equivale a definir:

$$\langle Z/A \rangle = \sum_j w_j \left(\frac{Z_j}{A_j} \right) \quad (109)$$

$$\langle Z/A \rangle \ln(I) = \sum_j w_j \left(\frac{Z_j}{A_j} \ln(I_j) \right) \quad (110)$$

Esta manera de estimar el valor de I se conoce como *regla de Bragg-Kleeman* y, al igual que en el caso de la aditividad de coeficientes de atenuación másicos, no tiene en cuenta los efectos de agregación del medio.

Stopping Power de radiación (o radiativo)

A energías elevadas la emisión de radiación de frenado acaba siendo responsable de la mayor parte de pérdidas de energía de electrones y positrones. El programa **ESTAR** permite generar tablas con los poderes de frenado másicos radiativos de estas partículas que son idénticas a la publicadas por ICRU. La Figura 19 reporta los valores para electrones en Al, Cu y Pb.

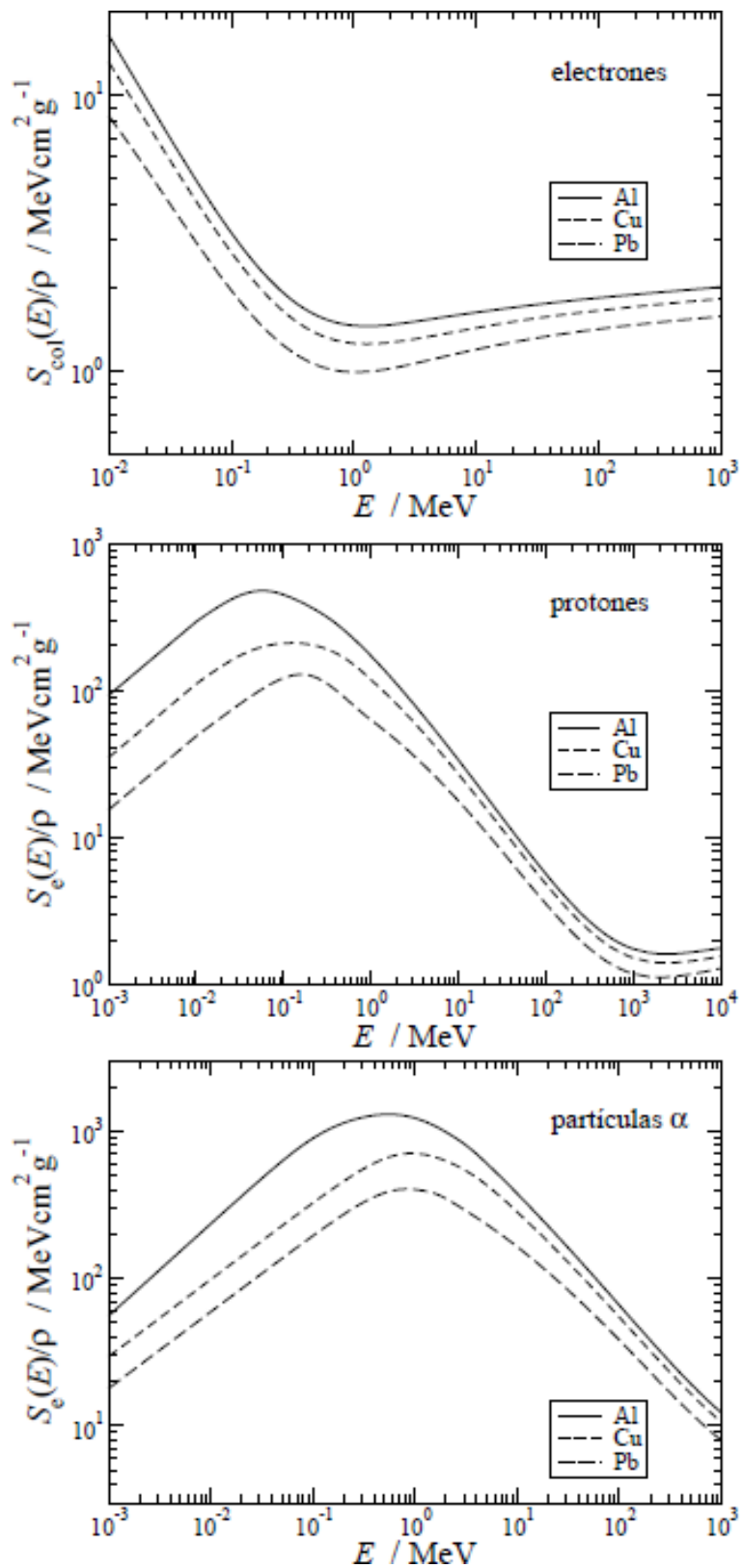


Figura 19. Poder de frenado másico radiativo de electrones en Al (línea sólida), Cu (línea punteada trazo corto) y Pb (línea punteada trazo largo).

Obsérvese que $S_{rad} \propto E$ para energías por encima de unos pocos MeV.

Rango de partículas cargadas

En la aproximación de frenado continuo (*Continuous Slowing Down Approximation - CSDA*) se asume que las partículas cargadas pierden energía de una forma gradual, a un ritmo dictado por el poder de frenado. La distancia que recorren desde que poseen una cierta energía cinética hasta quedar en reposo se denomina *rango* o *alcance* de CSDA y será igual para todas ellas (pues se ha despreciado el carácter estocástico de las colisiones inelásticas). El rango r_0 se calcula mediante la expresión:

$$r_0(E) \equiv \int_0^s ds' = \int_0^E \frac{dE'}{-\frac{dE'}{ds}} = \int_0^E \frac{dE'}{S(E')} \quad (111)$$

donde S es el poder de frenado total, incluyendo las contribuciones de colisión y radiativa (esta última sólo en el caso de electrones y positrones). La Figura 20 presentado el rango másico de electrones, protones y partículas α en Al, Cu y Pb.

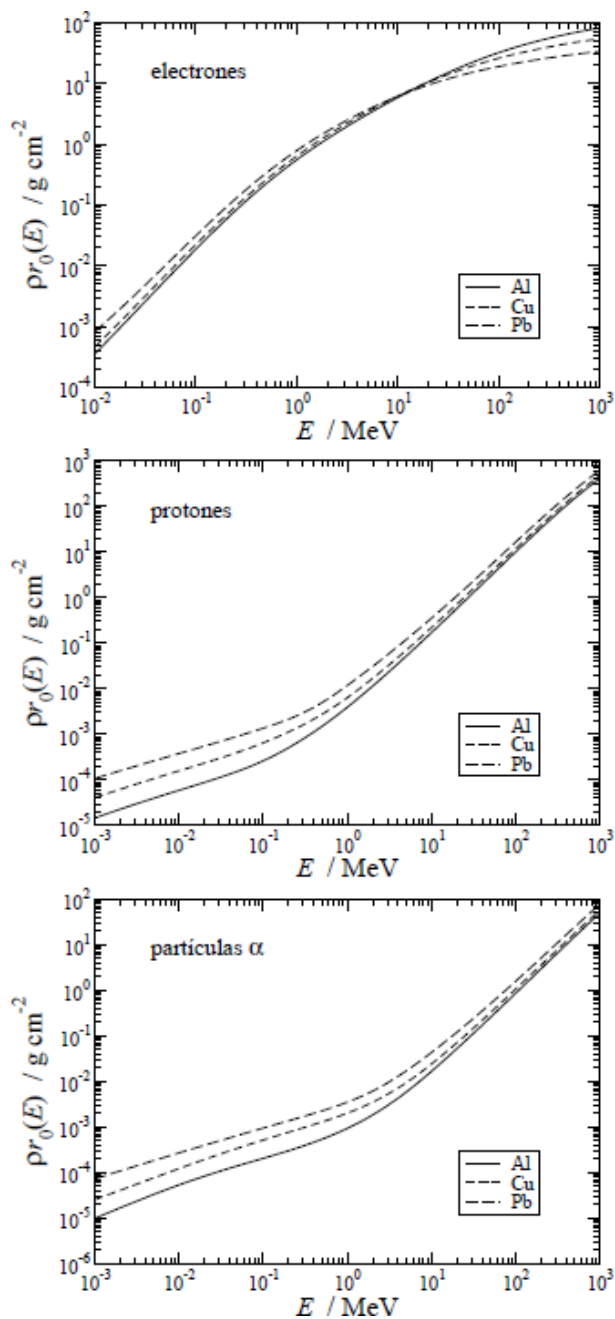


Figura 20. Rango másico (en la aproximación de frenado continuo) de electrones (arriba), protones (centro) y partículas α (abajo) en Al (línea sólida), Cu (línea punteada trazo corto) y Pb (línea punteada trazo largo).

Rendimiento radiativo de electrones y positrones

El *rendimiento radiativo* $Y(E)$ es la fracción de la energía inicial E de un electrón (o

positrón) que es convertida en Bremsstrahlung durante su frenado. En la aproximación de frenado continuo está dado por:

$$Y(E) = \frac{1}{E} \int_0^E \frac{S_{rad}(E')}{S_{col}(E') + S_{rad}(E')} dE' \quad (112)$$

Tablas con los rendimientos radiativos de todos los elementos pueden encontrarse en literatura; los mismos valores pueden generarse con el programa `ESTAR`. La Figura 21 muestra que $Y(E)$ de electrones varía entre 0 y valores cercanos a 1, aumentando con la energía, y siendo mayores para los materiales de número atómico elevado. Esto último es debido a que aproximadamente $S_{col} \propto Z_2$, mientras que $S_{rad} \propto Z_2^2$.

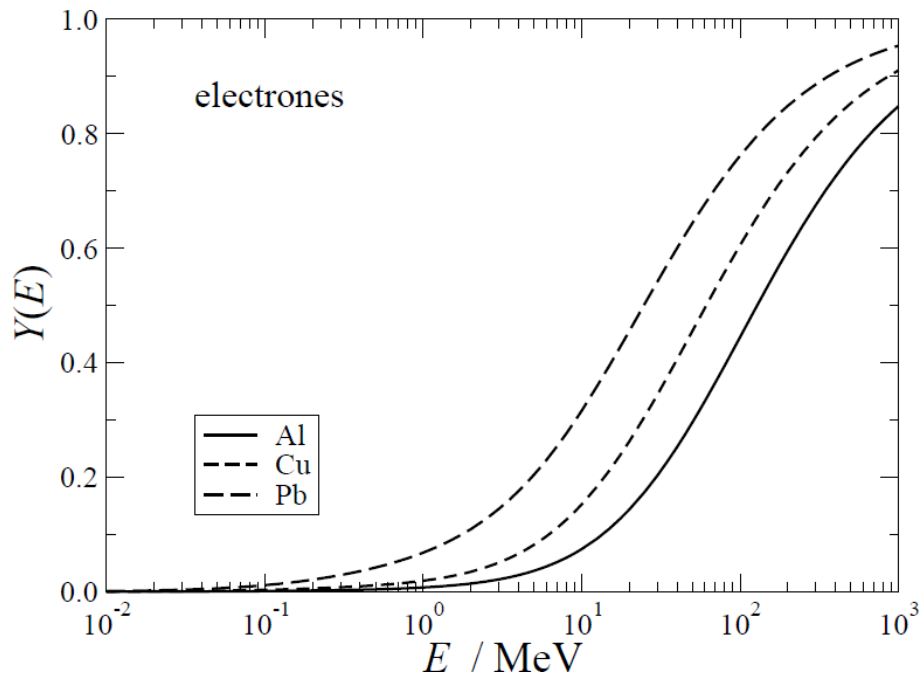


Figura 21. Rendimiento radiativo de electrones en Al (línea sólida), Cu (línea punteada trazo corto) y Pb (línea punteada trazo largo) en función de la energía.

1.7.. Radiación fluorescente: rayos X característicos y electrones Auger

La ionización de capas atómicas internas puede producirse por interacciones de fotones (efecto fotoeléctrico o Compton) o por impacto de partículas cargadas. Tras la ionización tiene lugar la relajación atómica, es decir, el exceso de energía del ión excitado residual se emite isotrópamente en forma de radiación fluorescente. Ésta comprende los rayos X característicos y los electrones Auger.

Rayos X característicos

Si la vacancia en la capa atómica interna se “llena” con un electrón proveniente de capas menos ligadas y la diferencia de energías se emite en forma de un fotón (rayo X característico), la transición se denomina radiativa. Las transiciones que respetan las reglas de selección $\Delta\ell = \pm 1$ y $\Delta j = 0, \pm 1$ están “permitidas” (a primer orden de teoría de perturbaciones) y son muy probables; de lo contrario están fuertemente inhibidas (son “prohibidas”). La energía del fotón está dada, aproximadamente, por: $E_X \approx U_X - U_Y$, donde X es la (sub)capa donde se produjo la vacancia e Y la (sub)capa de la que proviene el electrón que realiza la transición, respectivamente.

Las notaciones clásica (de Siegbahn) y moderna (IUPAC) de los rayos X característicos se indican en la Figura 22 para las principales líneas K y L .

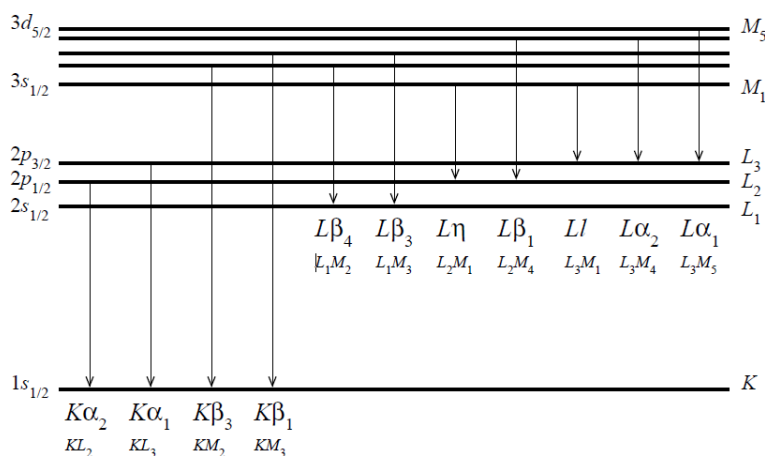


Figura 22. Notaciones de Siegbahn e IUPAC de los rayos X característicos de las líneas K y L más importantes.

La probabilidad w_i de que tras producirse una vacancia en la capa i -ésima el átomo emita un rayo X característico se denomina rendimiento de fluorescencia; $w_i(Z)$ es una función creciente.

Electrones Auger

En algunos casos la energía del electrón que efectúa la transición de Y a X se entrega a otro electrón, inicialmente en la subcapa Z que es liberado con energía cinética $\epsilon_e \approx U_X - U_Y - U_Z$. La emisión de electrones Auger es por tanto un proceso no radiativo. Por razones históricas, cuando la transición la efectúa un electrón de la misma capa en la que está la vacante original, el proceso se denomina Coster-Kronig. Si el electrón liberado también es de la misma capa, el proceso se llama super Coster-Kronig (ver los ejemplos de la Figura 23). Después de una transición no radiativa el átomo queda con una vacancia más.

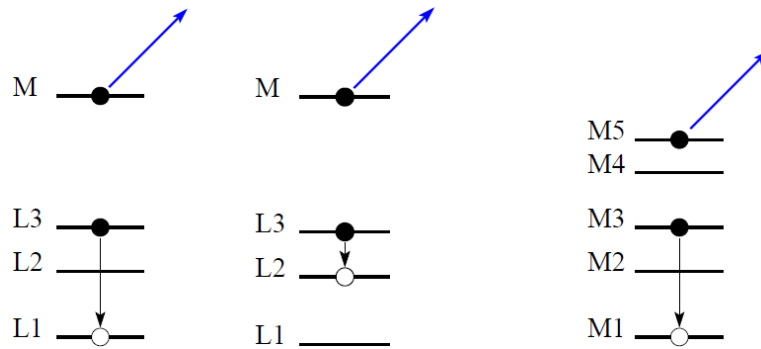


Figura 23. Ejemplos de transiciones Coster-Kronig L_1L_3M , L_2L_3M y super Coster-Kronig $M_1M_3M_5$.

La Figura 24 muestra las probabilidades de las transiciones no radiativas (KYZ) y radiativas (KY) que ocurren tras producirse una vacancia en la capa K , *i.e.* a_K y w_K , respectivamente. Como puede verse, la emisión de electrones Auger predomina para números atómicos bajos, mientras que para valores de Z intermedios o grandes es más probable la emisión de rayos X característicos, sobre todo $K_{\alpha 1}$. Las probabilidades han sido extraídas de la base de datos EADL.

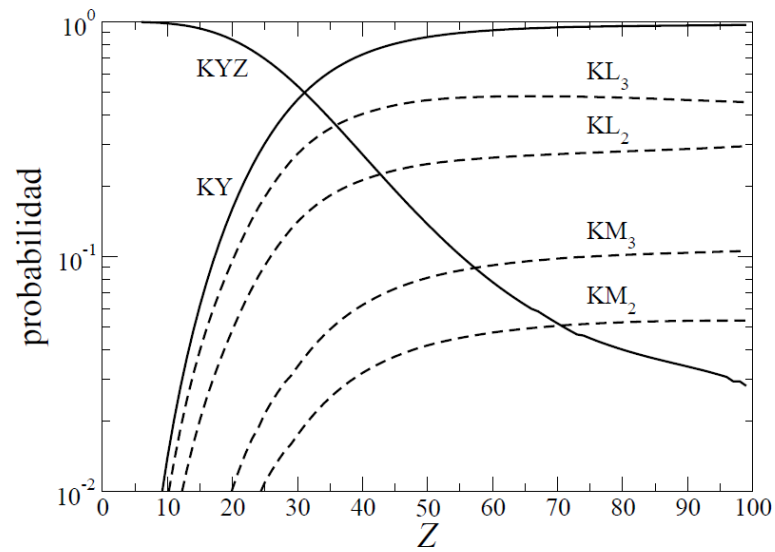


Figura 24. Las curvas continuas representan las probabilidades de las transiciones no radiativas (KYZ) y radiativas (KY) consecuencia de una vacancia en la capa K, mientras que las curvas a trazos indican las transiciones radiativas más probables (KL₂, KL₃, KM₂ y KM₃).

1.8.. Interacción de los neutrones con la materia: Conceptos básicos

Al igual que el fotón, el neutrón carece de carga eléctrica, y por lo tanto no experimenta interacciones Coulombianas con los núcleos y electrones del medio atravesado. El principal modo de interacción es mediante la fuerza fuerte que experimenta con los núcleos. Como la fuerza fuerte es de muy corto alcance y los núcleos ocupan un volumen minúsculo en comparación con el tamaño atómico, no es de extrañar que los neutrones sean partículas muy penetrantes. Se les considera, junto con los fotones, radiación indirectamente ionizante. Por otro lado, el neutrón posee una masa en reposo similar a la del protón, y es una partícula inestable, con un período de unos 10.6 min.

Los neutrones pueden experimentar diversos procesos nucleares, principalmente dispersiones elásticas y reacciones de absorción. Debido a la significativa dependencia con la energía de tales interacciones, es habitual clasificar a los neutrones atendiendo a su energía cinética:

térmicos	$E \approx 25meV$
epitérmicos	$E \sim 1eV$
lentos	$E \sim 1keV$
rápidos	$E \approx 100keV - 10MeV$

Cuadro 1. Denominación de los neutrones.

Análogamente al caso de los fotones, un haz de neutrones monoenergético bien colimado se atenúa siguiendo la denominada ley de atenuación exponencial. El coeficiente de atenuación másico también se define mediante la ecuación (63), aunque ahora σ_i son las secciones eficaces de los distintos mecanismos de interacción de los neutrones.

Scattering elástico de n^0

Se considera una colisión elástica entre un neutrón con energía cinética E_0 y un núcleo blanco de número másico A inicialmente en reposo. Como la colisión es elástica, el neutrón cambia de dirección sin modificar el estado cuántico del núcleo blanco. Aunque se conserva la energía cinética en el sistema de referencia del centro de masas, la energía final E del proyectil es menor que E_0 (tanto E_0 como E están referidas al sistema de referencia del laboratorio). De hecho las colisiones elásticas son las principales responsables del frenado de los neutrones rápidos, proceso que se suele denominar *moderación*. Empleando las leyes de conservación de momento lineal y energía cinética es fácil ver que:

$$\frac{E_0}{E} = \frac{A^2 + 1 + 2A \cos(\theta_{cm})}{(A + 1)^2} \quad (113)$$

donde θ_{cm} es el ángulo de dispersión del neutrón en el sistema de referencia del centro de masas; en esta sección las masas se expresan en unidades de la masa del neutrón. Cuando no hay dispersión ($\theta_{cm} = 0$) se tiene que $(E/E_0)_{\text{máx}} = 1$. La mayor pérdida de energía ocurre en colisiones frontales ($\theta_{cm} = 180$), con lo que:

$$\left(\frac{E_0}{E}\right)_{\text{mín}} = \left(\frac{A - 1}{A + 1}\right)^2 \equiv \alpha \quad (114)$$

En consecuencia los valores permitidos de E/E_0 están comprendidos en el intervalo $(\alpha, 1)$. Obsérvese que cuando la dispersión tiene lugar con un átomo de hidrógeno ($A = 1$), el neutrón puede ceder toda su energía al protón pues $\alpha = 0$ (lo mismo sucede en un choque frontal de dos bolas de billar de igual masa). En general los mejores moderadores de neutrones son sustancias con A bajo (hidrógeno, deuterio, agua, agua pesada, grafito, parafina, etc).

En el caso de neutrones con energías de unos 10 MeV e inferiores, la sección eficaz diferencial elástica en el sistema de referencia del centro de masas es prácticamente isotrópica. Entonces la probabilidad dp de dispersión hacia el ángulo sólido $d\Omega_{cm}$ es simplemente:

$$dp = \frac{d\Omega_{cm}}{4\pi} = \frac{2\pi \sin(\theta_{cm}) d\theta_{cm}}{4\pi} \quad (115)$$

Derivando la expresión 113:

$$\frac{dE}{dE_0} = \frac{2A}{(A+1)^2} \sin(\theta_{cm}) d\theta_{cm} \quad (116)$$

Y combinando las dos últimas ecuaciones, se obtiene:

$$p_1(E) \equiv \frac{dp}{dE} = \frac{(A+1)^2}{4A} \frac{1}{E_0} = \frac{1}{(1-\alpha)E_0} \quad (117)$$

Los valores de E en una colisión están uniformemente distribuidos en el intervalo $(\alpha E_0, E_0)$. Este resultado puede ser utilizado para evaluar, de forma iterativa, la distribución de energía $p_n(E)$ después de $n \geq 2$ colisiones; las expresiones analíticas para $n = 2$ y 3 pueden encontrarse en literatura. Después de n colisiones los valores de E están comprendidos en el intervalo $(\alpha E_0, E_0)$.

La Figura 25 muestra las distribuciones $p_n(E)$ de neutrones cuya energía inicial es de 1 MeV tras experimentar entre 1 y 10 colisiones elásticas con núcleos de ^{12}C .

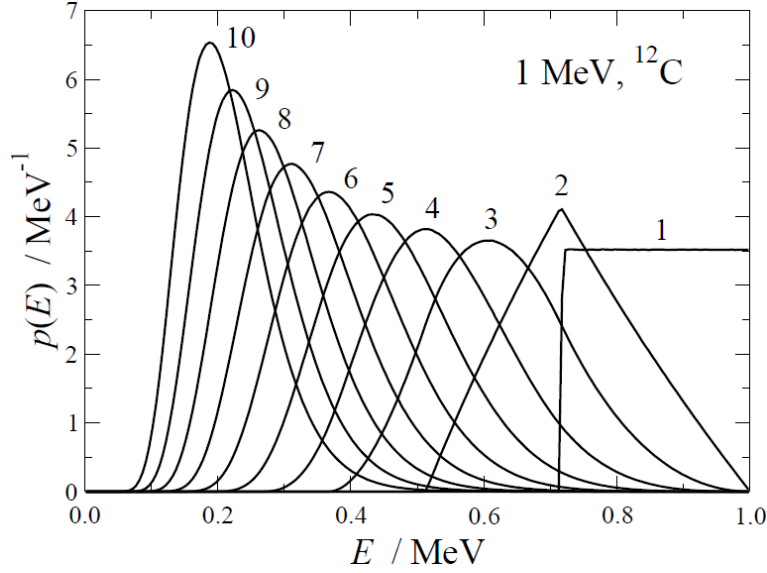


Figura 25. Distribuciones de energía de neutrones después de 1, 2, $\dots$, 10 colisiones elásticas con núcleos de ^{12}C ($\alpha = 0.716$). La energía inicial es $E_0 = 1$ MeV.

En este punto surge la pregunta de cuántas colisiones elásticas son necesarias, en promedio, para reducir la energía de un neutrón desde E_0 hasta un valor dado E . Este número de colisiones, $\bar{n}(E)$, puede estimarse fácilmente si primero se define:

$$\begin{aligned}\xi(E) &\equiv \left\langle \ln \left(\frac{E_0}{E} \right) \right\rangle = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{cm} \ln \left[\frac{(A+1)^2}{A^2 + 1 + 2A \cos(\theta_{cm})} \right] \\ &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos(\theta_{cm})) \ln \left[\frac{(A+1)^2}{A^2 + 1 + 2A \cos(\theta_{cm})} \right]\end{aligned}\quad (118)$$

El resultado de esta integral es:

$$\xi(E) = 1 + \frac{(A-1)^2}{2A} \ln \left(\frac{A-1}{A+1} \right) = 1 + \frac{\alpha \ln(\alpha)}{1-\alpha} \quad (119)$$

que no depende de la energía del neutrón. En cada colisión $\langle \ln(E) \rangle$ decrece en ξ , y después de $\bar{n}$ colisiones será:

$$\ln(E) = \ln(E_0) - \bar{n}\xi \quad (120)$$

De donde se obtiene:

$$\bar{n} = \xi^{-1} \ln(E_0/E) \quad (121)$$

Scattering inelástico, reacciones nucleares y captura radiativa de n^0

Las colisiones inelásticas (n, n') dejan al núcleo en un estado excitado, que posteriormente puede decaer mediante la emisión de un fotón. Como el neutrón debe tener energía suficiente para excitar al núcleo, la sección eficaz es cero por debajo de una energía umbral del orden de 1 MeV.

Los neutrones también pueden interactuar con los núcleos mediante un amplio abanico de reacciones nucleares. Los procesos con mayor probabilidad son las reacciones de tipo (n, p), (n, α), (n, d), etc, en las que el neutrón incidente "arranca" del núcleo blanco uno o más nucleones. Además, son posibles reacciones (n, γ), denominadas captura radiativa.

Las secciones eficaces de estos procesos son en general proporcionales a v^{-1} , lo cual favorece tales mecanismos en el caso de neutrones con baja velocidad. A este comportamiento suave se le superpone un número variable de resonancias, intervalos de energía estrechos en los que la sección eficaz pasa por un máximo pronunciado. Estos picos están relacionados con la gran estabilidad del núcleo compuesto que se forma al ser absorbido el neutrón. Por último, la fisión nuclear por neutrones térmicos es viable para nucleidos con A muy elevado.

MÓDULO II

Medidas de radiación

Referencias

- [1] I. Bankman. *Handbook of medical image processing and analysis*. ElSevier Academic Press, California, 2009.
- [2] Seibert A. Leidholt E. Boone J. Bushberg, J. *The essential physics of medical imaging*. Lippincot Williams and Wilkins, 2001.
- [3] T. Buzug. *Computed Tomography*. Springer-Verlag, 2008.
- [4] P. Suetens. *Fundamentals of Medical Imaging*. Cambridge University Press, second edition, 2009.
- [5] 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.
- [6] S. España, J. L. Herraiz, E. Vicente, J. J. Vaquero, M. Desco, and J. M. Udias. Penelope, a monte carlo pet simulation tool based on penelope: features and validation. *Phys. Med. Biol.*, (54):1723–1742, 2009.
- [7] R. Figueroa and M. Valente. hysical characterization of single convergent beam device for teletherapy: Theoretical andMonte Carlo approach. *Physics in Medicine and Biology* 60:7191–7206, 2015.
- [8] G. Tirao, C. Quintana, and M. Valente. Mammography image quality optimisation: a monte carlo study. *Int. J. Low Radiation*, 7(4):276–297, 2010.
- [9] C. Epstein. *Introduction to the mathematics of medical imaging*. Siam, Philadelphia, 2003.
- [10] G. Saha. *Physics and radiobiology of nuclear medicine*. Springer-Verlag, 2006.
- [11] 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.
- [12] F.H. Attix. *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*. Wiley-VCH, 1987.
- [13] S Dupree and S. Fraley. *A Monte Carlo premier*. Kluver-Plenum, New York., 2002.
- [14] P. Bevington and D. Keith Robinson. *Data reduction and error analysis*. McGraw Hill, 2003.
- [15] H. Tijms. *Understanding Probability: Chance Rules in Everyday Life*. Cambridge University Press, 2004.
- [16] M. Ljungberg, S. Strand, and M. King, editors. *Monte Carlo calculations in nuclear medicine: Applications in diagnostic imaging*. Institute of Physics Publishing, 1998.

- [17] J. Ducote and S. Molloy. Scatter correction in digital mammography based on image deconvolution. *Physics in Medicine and Biology*, Vol. 55(No. 5):1295–1309, March 2010.
- [18] 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.
- [19] A. Kak and M. Slaney. *Principles of Computerized Tomographic Imaging*. IEEE Press, New York, 2001.
- [20] S. Bushong. *Computed Tomography*. McGraw-Hill, 2000.
- [21] M. Stabin. *Fundamentals of nuclear medicine dosimetry*. Springer Science+Business Media, Spring Street, New York, NY 10013, USA, 2008.
- [22] A. Ferrari et al. *Fluka: a multi-particle transport code* v. 2011.1.2 ORGANISATION EUROPÉENNE POUR LA RECHERCHE NUCLÉAIRE CERN, 2012.