

PROCESOS FÍSICOS, QUÍMICOS Y BIOLÓGICOS POR ACCIÓN DE LA RADIACIÓN IONIZANTE

Mauro Valente^{†} & Facundo Mattea^{†**} & Marcelo Romero^{†***}*

[†] CONICET & Universidad Nacional de Córdoba; Argentina

Primer semestre - año académico 2023



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

* Contacto e-mail M. V.: mauro.valente@unc.edu.ar

** Contacto e-mail F. M.: fmattea@unc.edu.ar

*** Contacto e-mail M. R.: marcelo.ricardo.romero@unc.edu.ar

Prefacio

El presente trabajo *Notas de Procesos físicos, químicos y biológicos por acción de la radiación ionizante* es un compendio original de notas elaborado original y conjuntamente por Mauro Valente, Facundo Mattea y Marcelo Romero en 2023, para ser utilizado como material de estudio y referencia para el curso de posgrado y de especialización de grado titulado *Procesos físicos, químicos y biológicos por acción de la radiación ionizante* en el ámbito de física médica en la Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación de la Universidad Nacional de Córdoba, Argentina.

El contenido del libro de notas está dedicado a los formalismos y las metodologías para el área específica de física médica orientado a exponer integralmente los efectos sobre los sistemas materiales sometidos a radiaciones ionizantes, describiendo los conceptos necesarios para un abordaje inter y multidisciplinario, abarcando desde los procesos físicos primordiales de colisión e interacción, pasando por los efectos químicos inducidos y las reacciones de respuesta, hasta los efectos a nivel biológico en escala tardía. Como objetivo principal, se pretende lograr un abordaje integral y profundo a los fenómenos generados por las radiaciones ionizantes en los sistemas materiales. Para ello, se desarrolla una exposición de fundamentos teóricos, prácticos y experimentales para aplicación destinados a ejercitar los contenidos formales en situaciones prácticas, específicamente de interés para la física médica.

El contenido incluye los procesos de interacción de diferentes tipos de radiaciones con sistemas materiales, y sus consecuencias tanto microscópicas como macriscópicas, los efectos sobre la estructura atómica y molecular, las reacciones inducidas y las consecuencias de éstas sobre sistemas biológicos. El compendio de notas proporciona elementos de teoría, técnicas determinísticas y estocásticas, herramientas de cálculo y experiencias complejas de laboratorio para abordar de modo completo el estudio de los procesos de transporte e interacción de radiaciones en los diferentes tipos de materiales, para aplicaciones desde dosimetría a radioquímica y radiobiología.

Programa y contenido

MÓDULO I: Interacción de la radiación ionizante con la materia: Repaso

1. Definición de cantidades físicas: Sección eficaz.
2. Interacción de partículas cargadas con medios materiales: electrones/positrones y hadrones cargados.
3. Modelo de CDSA (*continuous slowing down approximation*) y *stopping power* para radiación directamente ionizante.
4. Interacción de partículas no cargadas con la materia: fotones y neutrones.

MÓDULO II: Radiofísica

1. Efectos de la radiación ionizante en medio materiales.
2. Definición de magnitudes radiofísicas.
3. Escala temporal de procesos radiofísicos.
4. Modelos radiofísicos.
5. Inducción de producción de radicales y especies por radiación ionizante.

MÓDULO III: Elementos de química

1. Enlaces químicos.
2. Enlace iónico, covalente, apolar y polar.
3. Enlaces simples, dobles, triples, enlaces de coordinación.
4. Fuerzas intermoleculares. principales (Puente Hidrógeno, Van der Waals, dipolares inducidos y permanentes en el agua).
5. Reacciones químicas.
6. Reacciones radicalarias.
7. Propiedades de los radicales, diferencia entre moléculas de bajo y elevado peso molecular.
8. Macromoléculas, polímeros naturales y sintéticos.
9. Reacciones de polimerización.

MÓDULO IV: Radioquímica

1. Radioquímica en líquidos.
2. Herramientas para estudios radioquímicos: el electrón solvatado (agua, alcoholes y líquidos polares, reacciones).
3. Radiólisis del agua.
4. Radioquímica aplicada: dosimetría química (gel de Fricke, polimérica).
5. Síntesis y reacciones industriales inducidas por la radiación.
6. Esterilización e irradiación de alimentos.

MÓDULO V: Elementos de biología

1. Célula eucariota y procariota.
2. Elementos básicos de la anatomía y fisiología celular.
3. Descripción de organelas y funciones fundamentales.
4. El genoma, núcleo celular, cromosomas y superenrollamiento del ADN.
5. Ciclo celular (análisis de fases).
6. Mecanismos de replicación, transcripción y traducción de la información génica.
7. Técnicas analíticas en bioquímica y microbiología.

MÓDULO VI: Radiobiología: aspectos biológicos

1. Daño inducido en el ADN por la radiación ionizante
2. Mecanismos de daño directo de DNA, movimiento de cargas en ADN y mecanismos de respuesta de reparación de genomas.
3. Radicales libres y proteínas, daño inducido por la radiación ionizante en membranas lipídicas y lipoproteínas.
4. Predicción de la distribución de daño en biomoléculas.

MÓDULO VII: Modelos radiobiológicos y aplicaciones en radioterapia

1. Modelos radiobiológicos.
2. Modelo Lineal-Cuadrático (LQ).
3. Modelo lineal-cuadrático modificado.
4. Radiosensibilización.
5. Efecto del nivel de oxigenación y radiobiología de haces de iones pesados.
6. Efectos térmicos: hipertermia.
7. Efectos de realce dosimétrico por nanopartículas.
8. Teranóstica.

TRABAJOS PRÁCTICOS ESPECIALES Y ACTIVIDAD COMPLEMENTARIA

Trabajo Práctico I: Aplicaciones sobre radiofísica. Actividad integradora de modelamiento computacional y experimentación en laboratorio.

Trabajo práctico II: Aplicaciones sobre radioquímica. Actividad integradora de modelamiento computacional y experimentación en laboratorio. Diseño, formulaciy uso de un dosímetro polimérico.

Trabajo práctico III: Aplicaciones sobre radiobiología. Actividad integradora de modelamiento computacional y experimentación en laboratorio. Preparación y caracterización de un dosímetro biológico.

Trabajo práctico IV: Aplicación integradora sobre efectos físicos, químicos y biológicos con técnicas de modelamiento computacional y experimentación en laboratorio.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA SUGERIDA

- F. Kahn. *The physics of the radiation therapy* 3th ed, Lippincott Williams & Wil, 2003.
- F. Attix. *Introduction to radiological physics and radiation dosimetry*. Ed. John Wiley and Sons, 1986.
- F. Salvat et al. *PENELOPE, an algorithm and computing code for Monte Carlo simulation of electron photon showers* Ed. NEA, 2003.
- 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>)
- P. Yurkanis Bruice *Fundamentos de química orgánica*. Pearson Educación, 2015.
- M. Spothem-Maurizot, M. Mostafavi, T. Douki J. Belloni. *Radiation Chemistry. From Basics to applications in material and life sciences*. Editorial EDP Sciences (Francia), 2008.
- A. Mozumder. *Fundamentals of Radiation Chemistry*. Academic Press (USA) 1999.
- Alberts B, Johnson A, Lewis J, et al. *Molecular Biology of the Cell*. Ed. 4. New York: Garland Science; 2002. Disponible en: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK21054/>

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 (PENELOPÉ) code for the characterization of gel-layer detectors in radiotherapy* NUCLEAR INSTRUMENTS AND METHODS IN PHYSICS RESEARCH A - ACCELERATORS, SPECTROMETERS, DETECTORS AND ASSOCIATED EQUIPAMENT 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 EQUIPAMENT 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 EQUIPAMENT 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 EQUIPAMENT 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 campo de la radiofísica.
- Adquirir conocimientos teórico-prácticos en el campo de la radioquímica.
- Adquirir conocimientos teórico-prácticos en el campo de la radiobiología.
- Instruir al alumno en la cadena de efectos sucesivos derivados del uso de radiaciones ionizantes sobre sistemas inertes y biológicos.
- Introducir al alumno al manejo de técnicas de modelamiento de efectos derivados de la radiación ionizante.

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 la materia: Repaso	13
1.1.. Contexto histórico	13
1.1.1.. Tipos de interacciones de las radiaciones ionizantes	14
1.1.2.. Efectos observables de la interacción de las radiaciones ionizantes con la materia	15
1.2.. Teoría de dispersión	15
1.2.1.. Matrices de dispersión y de transición	16
1.2.2.. Probabilidad de dispersión	17
1.3.. Stopping power y sección eficaz	18
1.3.1.. Tasa de dispersión	19
1.3.2.. Densidad de Estados finales	19
1.3.3.. Flujo incidente	20
1.3.4.. Medias sobre estados iniciales	20
1.4.. Dispersión de neutrones térmicos	20
1.4.1.. Potencial de Fermi	21
1.4.2.. Scattering lengths	22
1.4.3.. Factores de estructura	22
1.4.4.. Funciones de dispersión intermediarias	22
1.5.. Emisión y absorción	27
1.5.1.. Emisión	27
1.5.2.. Emisión espontánea	29
1.5.3.. Emisión estimulada	29
1.5.4.. Absorción	31
1.5.5.. Radiación de cuerpo negro	31
1.6.. Teoría de de Wigner-Weisskopf	32
1.6.1.. Interacción de un átomo con un único modo electromagnético	32
1.6.2.. Interacción de un átomo con varios modos electromagnéticos	34
1.7.. Ejemplos de aplicación: Interacciones de fotones y electrones con medios materiales	36
1.7.1.. Dispersión Rayleigh de rayos X	42
1.7.2.. Dispersión de luz visible	43
1.7.3.. Efecto fotoeléctrico	45
1.7.4.. Dispersión Thompson de electrones libres	48
2.. Módulo II: Radiofísica	52
2.1.. Efectos de la radiación ionizante sobre medios materiales	52
2.1.1.. Proceso de ionización	52
2.1.2.. Proceso de excitación	53
2.1.3.. Proceso de disociación	53
2.2.. Procesos radiofísicos y escala temporal	54
2.3.. Producción de especies por parte de la radiación ionizante	54
3.. Estimación del stopping power	56
3.1.. Stopping power de dosímetros poliméricos con nanopartículas de alto número atómico	56
3.2.. Objetivos del Trabajo Práctico I	56

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	$6,58211915 \cdot 10^{-16} \text{ eVs}$
Constante de Planck reducida	$\hbar \equiv h/2\pi$	$1,0545718 \cdot 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kgs}^{-1}$
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 Bequerel (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 la materia: Repaso

1.. **Módulo I: Interacción de la radiación ionizante con la materia: Repaso**

El *Capítulo 1.* se destina a presentar un resumen básico sobre los diferentes mecanismos de interacción entre los diferentes tipos de radiaciones ionizantes y los medios materiales tanto para radiaciones directa como indirectamente ionizantes. Se repasan sintéticamente los conceptos de sección eficaz y *stopping power* y su relevancia para describir los efectos en los sistemas materiales derivados de la radiación ionizante.

1.1.. **Contexto histórico**

En el siglo XX, la mayor parte del conocimiento sobre las interacciones entre las partículas cargadas veloces (energéticas) con la materia se presentó en términos de cantidades medias para los haces de partículas, con un gran número de colisiones a lo largo de cada trayectoria de partículas. La mayoría de los modelos desarrollados utilizaron métodos matemático-analíticos para derivar promedios como el del *stopping power* (poder de frenado), el rango, el *straggling* o la dispersión múltiple. En este contexto, se derivaron varios métodos ingeniosos para simplificar los cálculos, como: reglas de aditividad, transformaciones, y diversas aproximaciones entre las que se destaca el uso de la sección eficaz de Rutherford como base para colisiones inelásticas de partículas cargadas con los electrones/positrones.

Actualmente, la capacidad de cómputo disponible permite resolver una amplísima variedad de problemas complejos empleando métodos informático-analíticos o de tipo Monte Carlo. Cabe enfatizar que este tipo de cálculos emplean menos aproximaciones, aunque requieren información más detallada sobre las propiedades de los materiales involucrados y de los procesos de colisión. A modo de ejemplo, para medios dispersantes/absorbentes delgados, las funciones clásicas de *stopping power* y de Landau no proporcionan usualmente información adecuada para aplicaciones prácticas. Sin embargo, las cantidades medias tienen poco significado en situaciones que pretendan describir segmentaciones de *tracks* de partículas individuales. Ya hacia 1924, Enrico Fermi formuló la existencia de una estrecha relación entre los procesos de fotoabsorción y las secciones eficaces para la colisión de partículas cargadas.

Los promedios de las distancias aleatorias x_i entre las colisiones a lo largo del *track* de las partículas se denominan camino libre medio λ y presentan amplísimas variaciones. Para las colisiones electrónicas inelásticas de protones, a modo de ejemplo en el Silicio (Si), λ varía desde menos de 5 nm hasta unos 250 nm, mientras que en los gases condiciones normales de P y T , λ asume valores de un factor 1000 mayor, comparativamente. Para el caso de colisiones elásticas de electrones $10 < \lambda(\text{nm}) < 2000$.

Las pérdidas de energía E en las colisiones inelásticas tienen una amplia gama de valores. Para la mayoría de las aplicaciones, las pérdidas de energía más pequeñas son del orden de 10 eV. Resulta práctico considerar que las pérdidas de energía pequeñas son inferiores a 100 eV. Aproximadamente el 80 % de todas las pérdidas de energía en colisiones simples son pequeñas. La mayor pérdida de energía en una única colisión para un electrón con masa

en reposo m se considera la mitad de su energía, para un positrón puede ser toda su energía. Para partículas más pesadas con masa en reposo M y velocidad v existe una pérdida máxima de energía E_M para un electrón dada en la aproximación no relativista por la expresión 1

$$E_M = 2mv^2 \quad (1)$$

Mientras que la expresión ?? es el equivalente relativístico:

$$E_M = \frac{2mc^2\beta^2\gamma^2}{1 + (2\gamma m/M) + (m/M)^2} \quad (2)$$

donde: $\beta \equiv \frac{v}{c}$ y $\gamma \equiv \sqrt{\frac{1}{1-\beta^2}}$.

La pérdida media de energía $\langle E \rangle$ por colisión contra elementos livianos (bajo número atómico Z) con $0.05 < \beta\gamma < 100$ alcanza valores en el rango de [50, 120] eV. Para colisiones elásticas las pérdidas de energía para partículas pesadas son pequeñas. El efecto principal es una desviación angular típicamente baja. En el caso de los electrones pueden producirse grandes desviaciones y pérdidas de energía, pero son poco frecuentes.

1.1.1.. Tipos de interacciones de las radiaciones ionizantes

La palabra *partícula* suele referirse a cualquiera de las partículas subatómicas. Se presentarán los tipos o mecanismos de interacción según se trate de partículas cargadas o neutras. Para el caso de partículas cargadas de alta velocidad, se tiene: $\beta = v/c \gg 0.05$; lo que implica: energía cinética $T \gg 1$ keV para electrones, y $T \gg 1$ MeV para protones). Para explorar y comprender los procesos de interacción se describen los mecanismos de interacción para partículas individuales, frecuentemente bajo el supuesto de que los iones son núcleos totalmente desprovistos de electrones (iones desnudos).

Las interacciones de las partículas son con la materia. Sólo se consideran dos estados de la materia: gaseoso y condensado. En general, el término *centro dispersor* designa tanto átomos como también moléculas, y por consiguiente los modelos no incorporan los efectos relacionados con la estructura cristalina (por ejemplo, *channeling*). Se describe a las interacciones en términos de las colisiones individuales que se producen a distancias (aleatorias) x_i a lo largo de un *track* de la partícula. Las colisiones dan lugar a pérdidas de energía E_i separadas, discretas y aleatorias de las partículas.

Los diferentes mecanismos de interacción pueden clasificarse en:

- Interacciones en las que las partículas desaparecen, ejemplos: efecto fotoeléctrico, reacciones nucleares.
- Interacciones en las que las partículas cambian de energía T y de momento p , ejemplos: dispersión inelástica, Bremsstrahlung, producción de pares, efecto Compton.
- Colisiones elásticas en las que la transferencia de momento es grande pero la pérdida de energía es despreciable, ejemplo: Dispersión Coulomb de partículas cargadas en colisiones con núcleos de átomos como un todo (también denominadas *colisiones nucleares*).

En este sentido, los *haces de partículas* están formados por un tipo de partículas con trayectorias relacionadas que se extienden sobre un área pequeña y una pequeña dispersión de velocidades.

Los mecanismos de interacción para los fotones son:

- Absorción fotoeléctrica
- Dispersión Compton
- Producción de par e^-e^+
- Interacciones/reacciones nucleares

Para las partículas cargadas, son más frecuentes dos tipos de colisiones:

- Colisiones inelásticas: las partículas pierden energía por excitación e ionización de los átomos o de la materia condensada (excitaciones colectivas locales); pueden producirse radiaciones secundarias, como electrones secundarios (llamados rayos delta), electrones Auger, fotones (fluorescencia), radiaciones de Cherenkov y de transición, Bremsstrahlung, etc.
- Dispersión elástica (Coulomb o Rutherford)

1.1.2.. Efectos observables de la interacción de las radiaciones ionizantes con la materia

Las pérdidas de energía así como las radiaciones secundarias dan lugar a la deposición de energía en la materia. En lo que respecta a la transferencia de energía, es importante distinguir entre el efecto sobre la partícula incidente, descrito como una pérdida de energía y los efectos sobre el material dispersor/absorbente, como la producción de excitaciones y radiaciones secundarias (por ejemplo, rayos delta, fotones, fonones) que dan lugar a la deposición de energía.

Por su parte, los fotones y las partículas neutras deben producir una partícula cargada antes de poder ser observados. Los fotones de baja energía son una excepción porque pueden producir efectos fotoquímicos. Un ejemplo es la observación de la luz en la retina o en las emulsiones fotográficas.

1.2.. Teoría de dispersión

El concepto del modelo subyace en la necesidad de describir la interacción de la radiación ionizante con la materia como un proceso de dispersión. En concreto, se requiere calcular la tasa de dispersión (y luego la sección transversal), como medida de la tasa de transición entre un estado inicial (estado inicial de la materia + partícula entrante) y un estado final (estado final del blanco + radiación saliente).

En líneas generales y desde la perspectiva de la mecánica cuántica, este problema encuadra en el típico caso que puede resolverse mediante la *Teoría de Perturbaciones Dependientes del Tiempo (TDPT)*. En lugar de considerar una perturbación constante como se

hace para derivar la regla de oro de Fermi, se analiza el caso de un potencial de dispersión, en su forma más general. Se describe un evento de dispersión como una partícula que se acerca a un blanco o a un medio, interactúa con él y luego es desviada. Así, en función del tiempo, el Hamiltoniano de interacción V varía como muestra la 1.

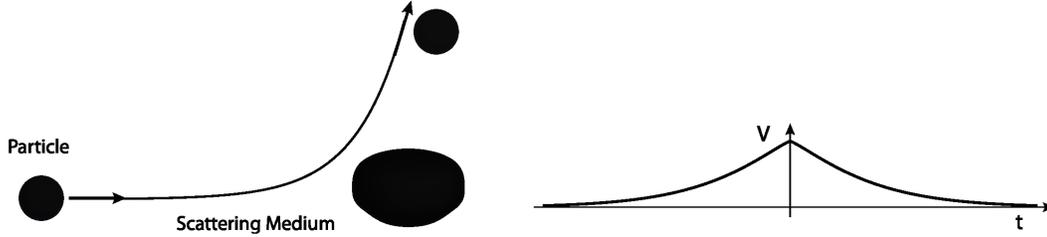


Figura 1. Modelo para la dispersión: Trayectoria de la partícula (izq.) y dependencia temporal del potencial V (der.).

Se requiere calcular la probabilidad de dispersión $P_{i \leftarrow f}$ desde un estado inicial i hacia un estado final f :

$$P_{i \leftarrow f} = |\langle f | U_I(t) | i \rangle|^2 = \left| \langle f | \left(\mathbf{1} - i \int_{-\infty}^{+\infty} V_I(t') dt' + \dots \right) | i \rangle \right|^2 \quad (3)$$

Obsérvese que también se consideran tiempos negativos, *i.e.* lo que corresponde a la llamada *conmutación adiabática*, ya que se supone que la interacción se enciende lentamente desde el principio del tiempo y vuelve a cero durante tiempos suficientemente largos.

1.2.1.. Matrices de dispersión y de transición

Recordando el formalismo propio de la mecánica cuántica, en los problemas de dispersión, el propagador U_I se denominará *matriz de dispersión* S . Para simplificar el cálculo, puede suponerse que V es realmente independiente del tiempo t . Entonces, a partir de la TDPT aplicada a primer orden ($S^{(1)}$) se obtiene la expresión 4:

$$\langle f | S^{(1)} | i \rangle = -i V_{if} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_f t} dt = -2\pi i \delta(\omega_f - \omega_i) \quad (4)$$

Mientras que la contribución a segundo orden $S^{(2)}$ se obtiene de 5:

$$\langle f | S^{(2)} | i \rangle = -\langle f | \left(\sum_l V | l \rangle \langle l | V \right) | i \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} dt_a e^{i\omega_f t_a} \int_{-\infty}^{t_a} dt_b e^{i\omega_l t_b} \quad (5)$$

Nótese que la última integral en 5 no está bien definida para $t \rightarrow -\infty$, por lo tanto se re-escribe como 6:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{t_a} dt_b e^{i(\omega_i - i\varepsilon)t_b} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} -i \frac{e^{i\omega_i t + \varepsilon t}}{\omega_i t - \varepsilon t} \Big|_{-\infty}^{t_a} \quad (6)$$

Entonces, al tomar el límite $t \rightarrow -\infty$ el término exponencial $e^{\varepsilon t} \rightarrow 0$ (lo que elimina las oscilaciones) y resulta la expresión 7:

$$\langle f|S^{(2)}|i \rangle = i \sum_l V_{fl} V_{li} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_a \frac{e^{i(\omega_f - i\varepsilon)t_a}}{\omega_l - i\varepsilon} = -2\pi i \delta(\omega_f - \omega_l) \sum_j \frac{|\langle f|V|l \rangle| |\langle l|V|i \rangle|}{\omega_i - \omega_l} \quad (7)$$

Por lo tanto, atendiendo a los resultados obtenidos para el primer y segundo orden de S , puede verificarse la generalización indicada en la expresión 8:

$$\langle f|S|i \rangle = -2\pi i \delta(\omega_f - \omega_i) \langle f|T|i \rangle \quad (8)$$

donde se ha introducido la *matriz de Transición T*, cuya expansión está dada por la expresión 9:

$$\langle f|T|i \rangle = \mathbf{1} + \sum_l \frac{\langle f|V|l \rangle \langle l|V|i \rangle}{\omega_i - \omega_l} + \sum_{l,k} \frac{V_{fl} V_{lk} V_{ki}}{(\omega_i - \omega_l)(\omega_i - \omega_k)} + \dots \quad (9)$$

1.2.2.. Probabilidad de dispersión

Retornando al objetivo inicial, con los resultados de la expresión 9 es posible calcular la probabilidad de dispersión/scattering $P_{scat} = |\langle f|S|i \rangle|^2$. Se calcula entonces la probabilidad total de dispersión considerando todos los posibles estados finales, como indica la expresión 10:

$$P_{scat} = 4\pi^2 |\langle f|T|i \rangle|^2 \delta(\omega_f - \omega_i) \quad (10)$$

Puede verse¹ entonces que aunque la probabilidad no está tan bien definida, si lo está la tasa de dispersión/textitscattering dada por $W_{scat} \equiv \frac{P_{scat}}{2t}$ en la expresión 11:

$$W_{scat} = 2\pi |\langle f|T|i \rangle|^2 \delta(\omega_f - \omega_i) \quad (11)$$

así, se obtiene la tasa para un estado final aislado, mientras que si se considera que se tiene un continuo de estados finales, con densidad de estados $\rho(\omega_f)$ se requiere sumar (integrar) sobre todos los estados finales posibles, como se muestra en 12 que se denomina *Regla de Oro de Fermi*:

$$W_{scat} = 2\pi \int 2\pi |\langle f|T|i \rangle|^2 \delta(\omega_f - \omega_i) \rho(\omega_f) d\omega_f = 2\pi |\langle f|T|i \rangle|^2 \rho(\omega_i) \quad (12)$$

¹Considérense las propiedades de la función delta de Dirac: $\delta^2(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \delta(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt (\omega) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{t}{\pi} \delta(\omega)$

1.3.. Stopping power y sección eficaz

Debe prestarse atención a las definiciones propias y rigurosas de cada magnitud, su representación simbólica y conceptos asociados. En particular, el símbolo $\frac{dE}{ds}$ puede encontrarse en literatura para describir varios conceptos, al menos seis, entre ellos: la pérdida de energía (Δ), la ionización J en un segmento del track y también el *output* digital Q de aparatos de análisis electrónico.

Debe recordarse que el significado original de $\frac{dE}{ds}$ es la cantidad estocástica *pérdida media de energía de partículas rápidas por unidad de longitud recorrida a lo largo del path* y se utiliza correctamente sólo en física nuclear de baja energía.

A continuación, se emplean herramientas de TDPT para calcular la *sección eficaz* (σ) de dispersión, la que se define como la tasa de dispersión normalizada por el flujo entrante de partículas (Φ_{in}), como indica la expresión 13:

$$\frac{d\sigma}{dE d\Omega} \propto \frac{W_{scat}(E, \Omega)}{\Phi_{in}} \quad (13)$$

donde se ha considerado al sistema como un todo (centro dispersor + partícula proyectil), y la partícula representa algún tipo de radiación aproximada como una onda plana de momento \vec{k} . En general, se requiere definir y considerar también otros grados de libertad, denotados de manera genérica, por el índice ℓ , por ejemplo para fotones se considera la polarización, mientras que para las partículas (por ejemplo, neutrones) el spin.

De este modo, resulta que el Hamiltoniano no perturbado es $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_R + H_M$ (para la radiación (R) y medio (M)). Bajo el supuesto de que para $t \rightarrow \pm\infty$ los sistemas de radiación y materia, como indica la 2, conservan su independencia, con sus correspondientes autoestados, se obtiene 14:

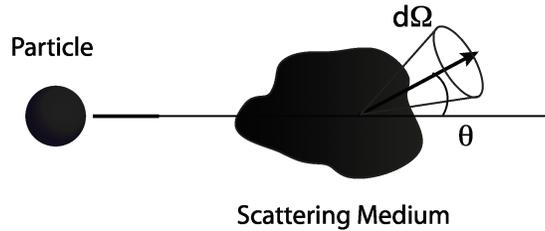


Figura 2. Sistema considerado para el modelo de dispersión: Partícula proyectil (radiación R) y medio dispersor/absorbente (medio M) .

$$|i\rangle = |k_i, l_i\rangle \quad |f\rangle = |k_f, l_f\rangle \quad (14)$$

Con energías dadas por 15:

$$\mathcal{H}_R |k_i\rangle = \hbar\omega_i |k_i\rangle \quad \mathcal{H}_R |k_f\rangle = \hbar\omega_f |k_f\rangle \quad \mathcal{H}_M |l_i\rangle = \varepsilon_i |l_i\rangle \quad \mathcal{H}_M |l_f\rangle = \varepsilon_f |l_f\rangle \quad (15)$$

donde las energías totales del sistema son: $E_i = \hbar\omega_i + \varepsilon_i$ y $E_f = \hbar\omega_f + \varepsilon_f$.

1.3.1.. Tasa de dispersión

A partir de los resultados de la sección precedente, es posible calcular la velocidad de dispersión W_{fi} como se indica en 16:

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|T|i\rangle|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (16)$$

Como de costumbre, se pretende sustituir, mientras sea posible, la función δ por la densidad final de estados. Sin embargo, sólo la radiación R queda en un continuo de estados, mientras que el material dispersor/absorbente M queda en un estado definido (uno de entre los varios posibles). Para describir esta distinción, se separa el estado final en cada uno de los dos subsistemas, para lo cual resulta útil definir la *proyección parcial sobre los estados de radiación* solamente $T_{k_f, k_i} = \langle k_f|T|k_i\rangle$, utilizando la expresión integral para la función δ , como se muestra en 17 :

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \langle l_f|T_{k_f, k_i}|l_i\rangle \langle l_i|T_{k_f, k_i}^\dagger|l_f\rangle \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\omega_f - \omega_i)t} e^{i(\epsilon_f - \epsilon_i)\frac{t}{\hbar}} \quad (17)$$

Utilizando los autovalores de la expresión 15, se obtiene la tasa o velocidad de dispersión W_{fi} dada por 18:

$$W_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\omega_f - \omega_i)t} \left[\langle l_i|T_{k_f, k_i}^\dagger(0)|l_f\rangle \langle l_f|T_{k_f, k_i}(t)|l_i\rangle \right] dt \quad (18)$$

1.3.2.. Densidad de Estados finales

La densidad final de estados describe los estados disponibles para la radiación R . Debido a que se ha supuesto que aplica la aproximación de que la radiación puede representarse por ondas planas (y suponiendo por comodidad que están contenidas en una cavidad de lado L), la densidad final de estados resulta 19:

$$\rho(k_f) d^3k_f = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k_f^2 dk_f d\Omega \quad (19)$$

La relación en energía es: $\rho(k) d^3k = \rho(E) dE d\Omega$, entonces, para el caso de fotones ($k = \frac{E}{\hbar c}$), se obtiene:

$$\rho(E) = 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{E^2}{\hbar^3 c^3} \quad (20)$$

donde el factor 2 da cuenta de los posibles estados de polarización.

Para el caso de neutrones (n^0), por ejemplo, se tiene que $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{n0}}$, se obtiene:

$$\rho(E) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{k}{\hbar^2} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{2m_{n0}E}{\hbar^3} \quad (21)$$

Y, por último, si el objetivo material puede quedar en más de un estado final, se sumas sobre éstos estados finales $|f\rangle$, obteniendo la tasa media de dispersión dada por $\bar{W}_{scat} = W_{fi} \rho(E) dE d\Omega$ ((suponiendo que W_{fi} no vaie mucho en dE y $d\Omega$).

1.3.3.. Flujo incidente

El flujo entrante Φ_{in} se define como el número de centros dispersores por unidad de superficie A y unidad de tiempo t , *i.e.*: $\Phi_{in} \equiv \frac{\#}{A \cdot t}$, donde $\#$ denota la cantidad de centros dispersores. Para el caso de la cavidad de lado L , $t = \frac{L}{v}$, obteniendo el flujo entrante/incidente $\Phi_{in} = \frac{v}{L^3}$, lo que implica para fotones ($v = c$): $\Phi_{in} = \frac{c}{L^3}$, mientras que para partículas masivas, como neutrones ($v = \hbar k m_{n^0}$), se obtiene: $\Phi_{in} = \frac{\hbar k}{m_{n^0} L^3}$

1.3.4.. Medias sobre estados iniciales

En los casos en que pueda aproximarse que el medio dispersor/absorbente se encuentra a una temperatura definida (y finita) T , éste estará en un estado mixto, por lo que debe sumarse sobre todos los posibles estados iniciales:

$$\rho_i = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}_M}}{Z} \longleftarrow P_i = \frac{e^{-i \frac{\epsilon_i}{\hbar k_B T}}}{\sum_i e^{-i \frac{\epsilon_i}{\hbar k_B T}}} \quad (22)$$

Y, entonces, la tasa total de *scattering* es:

$$W_{scat} (i \rightarrow (\Omega + d\Omega, E + dE)) = \rho(E) \sum_i P_i \sum_f W_{fi} \quad (23)$$

Utilizando el resultado de la expresión 18, se obtiene:

$$\begin{aligned} W_{scat} (i \rightarrow (\Omega + d\Omega, E + dE)) &= \rho(E) \sum_{f,i} \frac{P_i}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_f t} \langle l_i | T_{k_k, k_i}^\dagger(0) | l_f \rangle \langle l_f | T_{k_k, k_i}(t) | l_i \rangle \\ &= \frac{\rho(E)}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_f t} dt \quad (24) \end{aligned}$$

1.4.. Dispersión de neutrones térmicos

A modo de ejemplo, a partir de la tasa de dispersión obtenida, y considerando el flujo entrante y la densidad de estados, puede obtenerse la sección eficaz ($\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega}$) para neutrones térmicos, como muestra las expresiones 25 y 26:

$$\frac{\rho(E)}{\Phi} = \frac{\left[\left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{m k_f}{\hbar^2} \right]}{\left[\frac{\hbar k_i}{m L^3} \right]} = \frac{(m L^3)^2 k_f}{(2\pi \hbar)^3 k_i} \quad (25)$$

Entonces:

$$\frac{d^2\sigma_{n.t.}}{d\omega d\Omega} = \hbar \frac{W}{\Phi} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{m L^3}{2\pi \hbar^2} \right)^2 \frac{k_f}{k_i} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle T_{if}^\dagger(0) T_{fi} e^{i\omega_{if} t}(t) \rangle dt \quad (26)$$

Por lo tanto, considerando que los auto-estados $|k_{i,f}\rangle$ son aproximado como ondas planas ($\langle r|k\rangle = \Psi_k(r) = \frac{e^{ikr}}{L^{3/2}}$, se introduce $Q \equiv k_i - k_f$ y se obtiene el elemento de la matriz de transición como indica 27:

$$\begin{aligned}
 T_{fi}(t) &= \langle k_f | T(t) | k_i \rangle = \int_{L^3} d^3 \Psi_{k_f}(r) * T(r,t) \Psi_{k_i}(r) = \frac{1}{L^3} \int_{L^3} r d^3 r e^{iQr} T(r,t) \\
 T_{fi}^\dagger(0) &= \frac{1}{L^3} \int_{L^3} d^3 r e^{-iQr} T^\dagger(r,0) \quad (27)
 \end{aligned}$$

1.4.1.. Potencial de Fermi

A primer orden, puede aproximarse T por el potencial V (potencial nuclear en el referencial del centro de masa del sistema neutrón+ núcleo). Tomando en cuenta que el potencial nuclear es un potencial muy intenso ($V_0 \sim 30MeV$) y muy estrecho, de corto alcance ($r_0 \sim 2fm$), pueden emplearse estas características para abordar el problema con técnicas perturbativas. El hecho de que el potencial sea estrecho implica que la interacción se limita a producirse durante un tiempo muy corto, y por lo tanto, si se calcula la media temporal, debería obtenerse una interacción débil. Dado que la interacción de dispersión sólo depende de la *longitud de dispersión* a , que es del orden $a \sim V_0 r_0$, si se considera la aproximación de a constante, puede verse que existen diferentes configuraciones posibles de V y r que determinan el mismo comportamiento de dispersión.

Por lo tanto, puede sustituirse el potencial nuclear fuerte por un pseudopotencial más débil \hat{V}_0 , asumiendo que éste tiene un rango mucho mayor \hat{r}_0 , tal que $a \sim V_0 r_0 = \hat{V}_0 \hat{r}_0$. En particular, pueden elegirse \hat{V}_0 y \hat{r}_0 de modo que el potencial sea débil ($\sim eV$) pero el alcance siga siendo corto en comparación con la longitud de onda del neutrón entrante, $k\hat{r}_0 \ll 1$, lo que permite reemplazar al potencial con una función δ -Dirac en el origen:

$$V(r) = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu} a \delta(r) \quad (28)$$

A partir de la forma dada en 28 para el potencial, también puede introducirse la *bound scattering length* (b) dada por: $b \equiv \frac{\mu}{m_n} a \approx \frac{A+1}{A}$, siendo m_n la masa en reposo del neutrón y A el número másico. Nótese que b (longitud de interacción o longitud de dispersión ligada) es una función de la fuerza potencial y del rango (o alcance), que dependen de cada configuración nuclear con la que interactúe el neutrón.

Entonces, en primer orden, la matriz de transición es $T_{fi} = \frac{2\pi\hbar^2}{m_n} b$, o de manera generalizada al considerar varios centros dispersores, cada uno en una posición $r_x(t)$, se tiene:

$$T_{fi}(t) = \frac{2\pi\hbar^2}{m_n} \sum_x b_x e^{iQr_x(t)} \quad (29)$$

DE donde se obtiene la sección eficaz de interacción para neutrones térmicos como muestra 30:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = \frac{1}{2\pi} \frac{k_f}{k_i} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_i t} \langle \sum_{x,y} b_x b_y e^{-iQr_x(t)} e^{iQr_y(t)} \rangle dt \quad (30)$$

Nótese en 30 que debido a que las colisiones dependen del spin, es necesario promediar entre configuraciones nucleares (isótopos) y estados de spin, sustituyendo: $b_x b_y$ por $b_x \bar{b}_y$.

1.4.2.. Scattering lengths

Nótese que el *scattering length* b no depende explícitamente del vector posición \vec{r} , aunque la posición determina con cuál centro dispersor se considera la interacción.

Entonces, $b_x \bar{b}_y$ en 30 involucra dos contribuciones: i) para $x = y$, se tiene $b_x \bar{b}_y = \bar{b}^2 \delta_{x,y}$ y ii) $x \neq y$, resulta $b_x \bar{b}_y = \bar{b}^2 (1 - \delta_{x,y})$. Por lo tanto, se tiene: $b_x \bar{b}_y = (\bar{b}^2 - \bar{b}^2) \delta_{x,y} + \bar{b}^2$, lo que puede re-escribirse como: $b_x \bar{b}_y = b_i^2 + b_c^2$, donde se han introducido la *longitud de dispersión coherente* (*coherent scattering length*) $b_c \equiv \bar{b}$ y la *longitud de dispersión incoherente* (*incoherent scattering length*) $b_i \equiv \bar{b}^2 - \bar{b}^2$.

Por lo tanto, para un sistema con N centros dispersores, se tiene:

$$\sum_{x,y} b_x \bar{b}_y = N (b_c^2 + b_i^2) \quad (31)$$

1.4.3.. Factores de estructura

La expresión 30 para la sección eficaz ($\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega}$) de interacción con un sistema compuesto por N centros dispersores, puede re-escribirse en términos de los factores de estructura como se indica en 32:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = N \frac{k_f}{k_i} (b_c^2 S(Q, \omega) + b_i^2 S_s(Q, \omega)) \quad (32)$$

donde se han introducido *factor total de estructura dinámica* (*total dynamic structure factor*) ($S(Q, \omega)$) y el *factor de estructura autodinámico* (*self-dynamic structure factor*) ($S_s(Q, \omega)$) dados por:

$$S(Q, \omega) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_{if}t} \left\langle \frac{1}{N} \sum_{x,y} b_x \bar{b}_y e^{-iQr_x(0)} e^{iQr_y(t)} \right\rangle dt \quad (33)$$

$$S_s(Q, \omega) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_{if}t} \left\langle \frac{1}{N} \sum_x b_x \bar{b}_y e^{-iQr_x(0)} e^{iQr_x(t)} \right\rangle dt = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_{if}t} \left\langle \frac{1}{N} \sum_x b_x \bar{b}_y e^{-iQr(0)} e^{iQr(t)} \right\rangle dt$$

A partir de 34 puede verificarse que los factores de estructura dependen únicamente de las propiedades del material. Por tanto, la información que proporcionan se sobre éste puede aprovecharse para caracterizaciones experimentales.

1.4.4.. Funciones de dispersión intermedias

Una vez definidos los *factores de estructura*, cuyas expresiones se muestran en 34, es posible identificar que los factores de estructura representan la transformada de Fourier (con respecto al tiempo) de las magnitudes definidas en 35:

$$F(Q, t) \equiv \frac{1}{N} \left\langle \sum_{x,y} e^{-iQr_x(0)} e^{iQr_y(t)} \right\rangle \quad (34)$$

$$F_s(Q, t) \equiv \frac{1}{N} \left\langle \sum_x e^{-iQr(0)} e^{iQr_x(t)} \right\rangle$$

donde las cantidades $F(Q,t)$ y $F_s(Q,t)$ se denominan *funciones de dispersión intermedias* (*intermediate scattering functions*).

Es mas, es posible considerar también a estas funciones como transformadas de Fourier (con respecto a la posición), obteniendo, por ejemplo, para el caso de centros dispersores equivalentes (distribución uniforme de isótopo y spins):

$$F_s(Q,t) = \langle e^{-iQr(0)} e^{iQr(t)} \rangle \quad (35)$$

Y, definiendo la posición de una partícula de muestra: $n(R,t) = \delta(R - r(t))$, se calcula la transformada de Fourier de $n(R,t)$ según 36:

$$n(Q,t) = \int d^3r e^{iQR} n(R,t) = e^{iQr(t)} \quad (36)$$

Entonces, se tiene: $F_s(Q,t) = \langle n(Q,t) n(-Q,0) \rangle$, y finalmente la función de dispersión intermedia resulta:

$$F_s(Q,t) = \int d^3r e^{iQR} G_s(r,t) \quad (37)$$

En 37 se ha introducido la *función de correlación espacio-temporal de van-Hove* ($G_s(r,t) \equiv \int d^3r' \langle n(r',0) - n(r+r',t) \rangle$).

La expresión 37 deja claro que F_s es la transformada de Fourier (con respecto al espacio) de la correlación dependiente del tiempo de la densidad de partículas de muestra, $n(R,t)$, cantidad que sólo depende de las características del material *target*.

A modo de ejemplo, considérese el caso de un núcleo libre y en reposo. Entonces, sólo se requiere considerar la inteacción con (dispersión desde) un único núcleo supuesto libre y en reposo, para lo cual se emplea el factor de estructura auto-dinámico y se tiene $b_c = \bar{b} = b$, entonces la sección eficaz resulta como indica 38:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = \frac{k_f}{k_i} b^2 S(Q, \omega) = \frac{\sigma_b}{2\pi\hbar} \frac{k_f}{k_i} S(Q, \omega) \quad (38)$$

donde se ha utilizado la *sección eficaz de ligadura* (*bound*) definida por $\sigma_b \equiv 4\pi b^2$.

Por otro lado, dado que al núcleo, único centro dispersor del sistema, se lo considera libre, la función de dispersión intermedia resulta sencilla, y puede calcularse a partir de 39:

$$F_s(Q,t) = \langle e^{-iQr(0)} e^{iQr(t)} \rangle \quad (39)$$

empleando la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff, denominada *fórmula BCH*, para obtener 40:

$$F_s(Q,t) = \langle e^{-iQ[r(0)-r(t)] + \frac{1}{2}[Qr(0), Qr(t)]} \rangle \quad (40)$$

En 40 se requiere calcular $[r(0), r(t)]$, y para el caso de una partícula libre se tiene: $r(t) = r(0) + \frac{p}{m}t$, y se conoce la conmutación da: $[r(0), p] = i\hbar$, entonces resulta 41:

$$F_s(Q,t) = \langle e^{-iQ[r(0)-r(t)] + i\frac{\hbar}{2m}Q^2t} \rangle = \langle e^{-iQ\frac{p}{m}t} \rangle e^{i\frac{\hbar}{2m}Q^2t} \quad (41)$$

Por lo tanto, considerando en la expresión 41 que el único centro dispersor (núcleo) está en reposo, $p = 0$, lo que implica:

$$F_s(Q, t) = e^{i\frac{\hbar}{2m}Q^2 t} \quad (42)$$

Y, a partir de la función de dispersión intermediaria, $F_s(Q, t)$ puede obtenerse el factor de estructura $S_s(Q, t)$ por medio de la transformada de Fourier, según las definiciones de dichas magnitudes y el procedimiento descrito. Así, se obtiene entonces:

$$S_s(Q, t) = \delta\left(\omega - \frac{\hbar Q^2}{2m}\right) \quad (43)$$

Y, finalmente, a partir de la expresión 43, puede obtenerse la sección eficaz correspondiente a un único centro dispersor (núcleo) libre y en reposo, como muestra la 44:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = \frac{\sigma_b}{2\pi\hbar} \frac{k_f}{k_i} S(Q, \omega) = \frac{\sigma_b}{2\pi\hbar} \frac{k_f}{k_i} \delta\left(\omega - \frac{\hbar Q^2}{2m}\right) \quad (44)$$

Nótese en 44 que considerando que $Q = k_f - k_i$, $Q^2 = k_f^2 + k_i^2 - 2k_f k_i \cos(\theta)$, donde θ representa el ángulo polar de dispersión; y $\omega = E_f - E_i$ representa la variación de energía cinética en la dispersión. Además, puede verificarse la siguiente aproximación: $k_j^2 = 2mE_j \approx 2AE_j$, para $j = i, f$ y se emplea la aproximación de que la masa molar A represente la masa total del núcleo.

La sección eficaz para todo ángulo de dispersión se obtiene integrando, respecto del ángulo sólido Ω (o equivalentemente respecto del ángulo polar θ), la expresión 44 para la sección eficaz doble diferencial, obteniendo 45:

$$\frac{d\sigma}{dE} = \int_0^\pi \frac{\sigma_b}{2\pi\hbar} \frac{k_f}{k_i} \delta\left(\omega - \frac{\hbar Q^2}{2m}\right) 2\pi \sin(\theta) d\theta = \frac{\sigma_b}{4} \frac{A}{E_i} \int_{\frac{(A-1)^2}{(A+1)^2} E_i}^{E_i} \delta(\zeta) d\zeta \quad (45)$$

En esta instancia, resulta útil definir la *sección eficaz de átomo libre*² (σ_f) dada por 46:

$$\sigma_f \equiv \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{A}\right)^2} \sigma_b \quad (46)$$

Entonces, combinando 45 y 46, se obtiene:

$$\frac{d\sigma}{dE} = \begin{cases} \sigma_f \frac{(A+1)^2}{4AE} & \text{si } \left(\frac{A-1}{A+1}\right)^2 E < E_f < E \\ \sigma_f \frac{(A+1)^2}{4AE} & \text{si } \left[\text{left} \left(\frac{A-1}{A+1}\right)^2 E \text{ right}\right] < E_f < E \\ 0 & \text{de otro modo} \end{cases} \quad (47)$$

Cabe remarcar que la expresión obtenida (47) para la sección eficaz también se obtuvo (de manera probablemente más sencilla) en cursos precedentes³ empleando argumentos de conservación de la energía total del sistema.

²Entiéndase como *sección eficaz de centro dispersor libre*.

³Véase, por ejemplo, Fundamentos de Física Médica.

Otro ejemplo de particular interés y utilidad didáctica es la dispersión con una red cristalina. Se considera en este caso, a modo de ejemplo ilustrativo, la dispersión de neutrones por parte de un cristal. Por simplicidad, se presenta el caso de una red cristalina unidimensional modelada como un oscilador armónico cuántico 1D. Por tanto, la posición $\vec{r} \rightarrow x$, de cada centro dispersor (núcleo) es representada como la posición del oscilador armónico correspondiente, de masa M y frecuencia angular ω_0 . Entonces, se tiene 48:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0}} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger) \quad (48)$$

donde el Hamiltoniano evolutivo \mathcal{H} está dado por 49:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2M} + \frac{M\omega_0^2}{2} x^2 = \hbar\omega_0 \left(\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (49)$$

En la aproximación en que no existan variaciones de tipo de centros dispersores (composición isotópica uniforme para el caso en consideración de neutrones dispersados por la red cristalina) ni tampoco variaciones de spins, sólo es necesario calcular la función de dispersión intermediaria y el factor de estructura autodinámicos como indica 50:

$$F_s(Q, t) = e^{-iQx(0)} e^{iQx(t)} = e^{-iQ[x(0)-x(t)]} e^{\frac{i}{2}[Q \cdot x(0), Q \cdot x(t)]} \quad (50)$$

La dependencia temporal de la posición (coordenada $x(t)$) del oscilador armónico es:

$$x(t) = x(0) \cos(\omega_0 t) + \frac{p(0)}{M\omega_0} \sin(\omega_0 t) \quad (51)$$

Entonces: $[x(0), x(t)] = \left[x(0), \frac{p(0)}{M\omega_0} \sin(\omega_0 t) \right] = \frac{i\hbar}{M\omega_0} \sin(\omega_0 t)$.

Finalmente: $[x(0), x(t)] = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0}} (\mathbf{a} e^{-i\omega_0 t} + \mathbf{a}^\dagger e^{i\omega_0 t})$

Considerando la propiedad de los operadores creación/anihilación (de estados) $(\mathbf{a}\mathbf{a}^\dagger)$, que satisfacen: $[\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] = \mathbf{1}$, puede evaluarse $\langle e^{iQ\Delta x(t)} \rangle$ (para $\Delta x(t) \equiv x(t) - x(0)$).

Utilizando la fórmula de BCH, se tiene:

$$e^{iQ\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0}} (\mathbf{a} e^{-i\omega_0 t} + \mathbf{a}^\dagger e^{i\omega_0 t})} = e^{\alpha \mathbf{a} - \alpha^* \mathbf{a}^\dagger} = e^{-\alpha^* \mathbf{a}^\dagger} e^{\alpha \mathbf{a}} e^{-|\alpha|^2 \frac{[\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger]}{2}} \quad (52)$$

En la expresión 52 se ha introducido $\alpha \equiv iQ\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0}} e^{-i\omega_0 t}$

Entonces, en 52, considerando la propiedad de \mathbf{a} y \mathbf{a}^\dagger , se requiere calcular el valor de expectación de $\langle e^{-\alpha^* \mathbf{a}^\dagger} e^{\alpha \mathbf{a}} \rangle$, lo que puede lograrse por expansión en series, como indica 53:

$$\langle e^{-\alpha^* \mathbf{a}^\dagger} e^{\alpha \mathbf{a}} \rangle = \sum_{m,n} \langle \mathbf{a}^{\dagger m} \mathbf{a}^n \rangle \frac{\alpha^n (-\alpha^*)^m}{n! m!} \quad (53)$$

Atendiendo a las propiedades de los operadores creación/anihilación, sólo los términos $m = n$, pueden ser no nulos, obteniendo 54:

$$\langle e^{-\alpha^* \mathbf{a}^\dagger} e^{\alpha \mathbf{a}} \rangle = \sum_n \langle \mathbf{a}^{\dagger n} \mathbf{a}^n \rangle \frac{-(|\alpha|^2)^n}{n!} = e^{-|\alpha|^2 [\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a}]} \quad (54)$$

Nótese que el último término en la expresión 54 es un caso particular de la identidad de Bloch ($\langle e^Y \rangle = e^{\frac{\langle Y^2 \rangle}{2}}$), donde $Y = c\mathbf{a} + d\mathbf{a}^\dagger$ con c y d constantes, representa cualquier combinación lineal de operadores creación/aniquilación.

Así, se obtiene finalmente la función de dispersión intermedia como indica 56:

$$F_s(Q, t) = e^{-iQ \cdot x(0)} e^{iQ \cdot x(t)} = e^{-\frac{Q^2 \hbar}{2M_0} (\langle \hat{n} \rangle + \frac{1}{2})} e^{\frac{1}{2} \frac{i\hbar Q^2}{M_0 \omega_0} \sin(\omega_0 t)} \quad (55)$$

$$\longrightarrow \langle e^{-iQ \cdot x(0)} e^{iQ \cdot x(t)} \rangle = \langle e^{iQ \Delta x} \rangle e^{\frac{1}{2} [Q \cdot x(0), Q \cdot x(t)]}$$

A partir de 56, de la identidad de Bloch y $\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x(0)^2 \rangle + \langle (x(t))^2 \rangle + 2\langle x(0)x(t) \rangle - \langle [x(0), x(t)] \rangle = 2\langle x^2 \rangle + 2\langle x(0)x(t) \rangle - \langle [x(0), x(t)] \rangle$, se tiene finalmente:

$$F_s(Q, t) = e^{-Q^2 \langle x^2 \rangle} e^{Q^2 \langle x(0)x(t) \rangle} \quad (56)$$

Si el oscilador se encuentra en el estado $|n\rangle$, se obtiene:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2M\omega_0} (2n + 1) \quad (57)$$

$$\langle x(0)x(t) \rangle = \frac{\hbar}{2M\omega_0} [2n \cos(\omega_0 t) + e^{i\omega_0 t}]$$

Para el caso particular en que los osciladores están en equilibrio térmico, se reemplaza n por n_{th} , mientras que en estados de alta temperatura se tiene $n \gg 1$ y puede aproximarse:

$$F_s(Q, t) = e^{-\frac{\hbar Q^2}{M\omega_0} \langle n \rangle [1 - \cos(\omega_0 t)]} = e^{-Q^2 \frac{W_0}{2}} e^{Q^2 \frac{W_t}{2}} \quad (58)$$

En 58 se ha introducido $W_0 \equiv \frac{2\langle n \rangle \hbar}{M\omega_0}$ y $W(t) \equiv W_0 \cos(\omega_0 t)$.

Cabe destacar que el resultado en la expresión 58 para la función intermedia coincide con el resultado que se obtiene a partir de un tratamiento clásico, con el término $e^{-Q^2 \frac{W_0}{2}}$ conocido como el *factor de Debye-Waller*.

La función de estructura intermedia resulta, entonces, ser una función Gaussiana, con un ancho dependiente del tiempo, $W_0 - W(t)$. Si $W_0 < 1$ puede hacerse una expansión del término dependiente del tiempo como sigue en 59:

$$F_s(Q, t) = e^{-Q^2 \frac{W_0}{2}} e^{Q^2 \frac{W_0 \cos(\omega_0 t)}{2}} \approx e^{-Q^2 \frac{W_0}{2}} \left[1 + W_0 \cos(\omega_0 t) + \frac{W_0^2}{2} \cos^2(\omega_0 t) + \dots \right] \quad (59)$$

Entonces, el factor de estructura S_s , que es la transformada de Fourier de F_s , resulta ser la suma de funciones de Dirac a frecuencias $\omega = \pm n\omega_0$ correspondientes a la contribución de n -fonones⁴ a la dispersión.

⁴Oscilaciones de la red.

Los términos del tipo $\delta(\omega - n\omega_0)$ corresponden, entonces, a eventos de dispersión en los que la energía es transferida del neutrón al centro dispersor (oscilador); mientras que los términos del tipo $\delta(\omega + n\omega_0)$ corresponden a transferencias de energía de la red cristalina al neutrón proyectil. El término constante ($\delta(\omega)$) describe eventos sin transferencia (dispersión elástica).

Además, W_0 puede describirse en términos de la temperatura T , para el límite de altas temperaturas: $\langle n \rangle \approx \frac{k_B T}{\hbar\omega_0}$, entonces: $W_0 = \frac{2k_B T}{M\omega_0^2}$.

Mientras que, por otro lado, para el límite de bajas temperaturas $\langle n \rangle \rightarrow 0$, obteniendo:

$$F_s(Q, t) \approx e^{-\frac{\hbar Q^2}{2M\omega_0} [2\langle n \rangle (1 - \cos(\omega_0 t + 1 - e^{i\omega_0 t}))]} \approx e^{-Q^2 \frac{\hbar Q^2}{2M\omega_0} e^{\frac{\hbar Q^2}{2M\omega_0} e^{i\omega_0 t}}} \quad (60)$$

Realizando la expansión en series del segundo término en la expresión 60, se obtiene:

$$F_s(Q, t) \approx e^{-Q^2 \frac{\hbar Q^2}{2M\omega_0}} \left[1 + \frac{\hbar Q^2}{2M\omega_0} e^{i\omega_0 t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar Q^2}{2M\omega_0} \right)^2 e^{2i\omega_0 t} + \dots \right] \quad (61)$$

Se verifica, entonces que aún a baja temperatura, el factor de estructura (la transformada de Fourier de la expresión en 61) es una suma de la función de Dirac, también llamada *expansión de fonones*.

Sin embargo, en este caso sólo aparecen los términos del tipo $\delta(\omega - n\omega_0)$, ya que la energía sólo puede ser cedida por parte del neutrón a la red cristalina (que inicialmente está en su estado fundamental).

1.5.. Emisión y absorción

Tanto los átomos como las moléculas pueden absorber proyectiles, como fotones por ejemplo, y efectuar transiciones de su estado base a un nivel excitado. Una vez en un estado excitado, éstos pueden emitir fotones (en presencia o ausencia de un campo electromagnético pre-existente) como parte de una transición a un nivel inferior, como se ilustra en la figura 3.

1.5.1.. Emisión

Utilizando la TPDT y la cuantización del campo, se puede calcular las velocidades de transición.

La tasa de emisión W viene dada por 62:

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | V | i \rangle|^2 \rho(E_f) \quad (62)$$

Separando el campo radiante emitido del emisor (centro dispersor), se tiene 64:

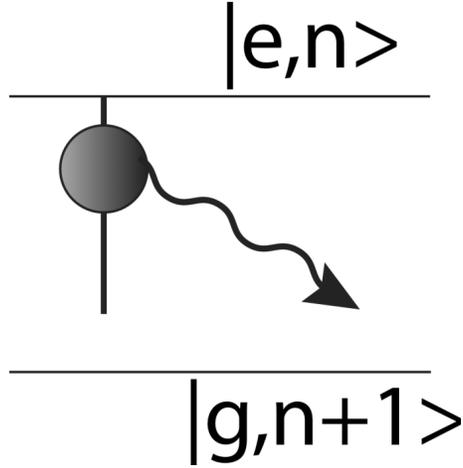


Figura 3. Esquema para el modelo de emisión: el centro dispersor (átomo o molécula) realiza una transición del nivel excitado ($|e\rangle$) al estado base (fundamental) $|g\rangle$) mientras que el número de fotones en el modo k, λ pasa de n a $n + 1$.

$$\begin{aligned} |i\rangle &= |n_{k,\lambda}\rangle |e\rangle \\ |f\rangle &= |n_{k,\lambda} + 1\rangle |g\rangle \end{aligned} \quad (63)$$

Tomando en cuenta que se están estudiando procesos atómicos/ópticos, la aproximación dipolar eléctrica resulta adecuada y la interacción se aproxima como $V = -\vec{d} \cdot \vec{E} = -q_e \cdot \vec{E}$, y el campo eléctrico se indica en 64:

$$\vec{E} = \sum_{k,\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{L^3}} (\mathbf{a}_{\mathbf{k},\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \mathbf{a}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) \vec{\epsilon}_{k,\lambda} \quad (64)$$

La posición del electrón que realiza la transición puede escribirse como $\vec{r} = \vec{R} + \vec{\rho}$, donde \vec{R} es la posición del centro dispersor (núcleo). Como la posición relativa del electrón respecto al núcleo es $\rho \ll \lambda$, puede despreciársela y sustituir r por R en la exponencial $\rho \cdot \vec{k} \ll 1$). Así, se simplifica la operación, y notando que R no es un operador, se obtiene:

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle g|\vec{d}|e\rangle \cdot \langle n_{k,\lambda} + 1|\vec{E}|n_{k,\lambda}\rangle|^2 \rho(E_f) \quad (65)$$

De 65 se obtiene 66:

$$W = \frac{(2\pi q_e)^2}{L^3} \sum_{k',\lambda'} \omega_{k',\lambda'} |\langle n_{k,\lambda} + 1| (\mathbf{a}_{\mathbf{k}',\lambda'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}} + \mathbf{a}_{\mathbf{k}',\lambda'}^\dagger e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}}) |n_{k,\lambda}\rangle|^2 \rho(E_f) \quad (66)$$

Atendiendo a que la emisión involucra sólo el operador creación (\mathbf{a}^\dagger), sólo términos proporcionales a \mathbf{a}^\dagger y con en vector de onda y polarización correctos en 66 podrían ser no nulos, resulta: $\langle n_{k,\lambda} + 1 | \mathbf{a}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger | n_{k,\lambda} \rangle = \sqrt{n_{k,\lambda} + 1}$ (y todos los demás términos se anulan).

Entonces, se obtiene:

$$W = \frac{(2\pi q_e)^2}{L^3} \omega_{k,\lambda} (n_{k,\lambda} + 1) |\langle g | \vec{r} \cdot \vec{\epsilon}_{k,\lambda} | e \rangle|^2 \rho(E_f) \quad (67)$$

Ahora, en 67 debe considerarse que posteriorv a la transición, el centro dispersor queda en algún específico estado final, la densidad de estados queda definida por el campo electromagnético como indica 68:

$$\rho(E_f) dE_f = \rho(\hbar\omega_k) \hbar d\omega_k \quad (68)$$

En 68 se utilizó $\omega_k = ck$ y $\rho(k) d^3k = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2 dk d\Omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{\omega^2}{c^3} d\omega d\Omega$. Entonces:

$$\rho(E) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{\omega^2}{\hbar c^3} d\Omega \quad (69)$$

1.5.2.. Emisión espontánea

A partir de la expresión 69, se define el *elemento de la matriz de trsanciión dipolar* ($d_{g,e} \equiv \langle g | d | e \rangle$) a partir del operador dipolar ($\vec{d} = q_e \vec{r}$) y se obtiene la tasa de emisión dada por 70:

$$W = \frac{\omega_k^3}{2\pi\hbar c^3} \left((n_{k,\lambda} + 1) |\epsilon_{k,\lambda} \cdot \vec{d}_{g,e}|^2 d\Omega \right) \quad (70)$$

Y, a partir de la expresión 70 pueden identificarse dos contribuciones a la emisión: la *emisión espontánea* W_{esp} dada por 71:

$$W_{esp} \equiv \frac{\omega_k^3}{2\pi\hbar c^3} |\epsilon_{k,\lambda} \cdot \vec{d}_{g,e}|^2 d\Omega \quad (71)$$

1.5.3.. Emisión estimulada

De manera análoga a la emisión espontánea W_{esp} , puede definirse la *emisión estimulada* W_{est} , contribución dada por 72, y que sólo puede suceder cuando existen n fotones con los valores apropiados de vector de onda y polarización:

$$W_{est} \equiv \frac{\omega_k^3}{2\pi\hbar c^3} n_{k,\lambda} |\epsilon_{k,\lambda} \cdot \vec{d}_{g,e}|^2 d\Omega \quad (72)$$

A modo de ejemplo de aplicación, considérese la *emisión espontánea* como se indica en la figura 4:

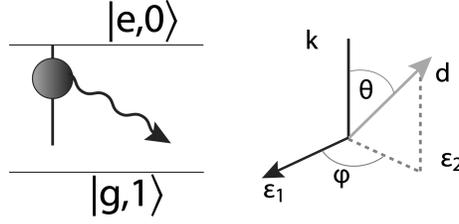


Figura 4. Esquema para el modelo de emisión espontánea.

Como los fotones emitidos pueden tener cualquier estado de polarización ϵ y cualquier dirección del vector de onda \vec{k} , se requiere integrar sobre todas las posibilidades de emisión.

Por lo tanto, se supone que, en general, el vector dipolo forma un ángulo θ con respecto al vector onda \vec{k} . Entonces los dos posibles vectores de polarización son perpendiculares a \vec{k} , como se esquematiza en la figura 4. La tasa de emisión resulta de la suma de las tasas para cada estado de polarización ($W_{esp} = W_1 + W_2$), cada una proporcional a $|d \cdot \epsilon_{k,1,2}|^2$, i.e.: $d \cdot \epsilon_{k,1} \equiv d \sin(\theta) \cos(\phi)$ y $d \cdot \epsilon_{k,2} \equiv d \sin(\theta) \sin(\phi)$, para θ y ϕ representados en la figura 4.

Por lo tanto, el término del módulo cuadrado en 72 genera el típico comportamiento $\propto \sin^2(\theta)$ característico de la dependencia angular de la componente dipolar⁵: $W_{esp} = \frac{\omega_k^3}{2\pi\hbar c^3} |d_{g,e}| \sin^2(\theta) V, d\Omega$.

El coeficiente de emisión total A_e denominado *coeficiente de emisión de Einstein* resulta, entonces:

$$A_e \equiv \int_{\Omega} W d\Omega = \frac{\omega_k^3}{2\pi\hbar c^3} |d_{g,e}|^2 2\pi \int_{-1}^1 (1 - \zeta^2) d\zeta = \frac{4}{3} \frac{\omega_k^3}{\hbar c^3} d_{g,e}^2 \quad (73)$$

Una vez conocida la tasa de emisión, resulta inmediato calcular la potencia emitida P , al incluir la energía, como muestra 74:

$$P \equiv EA_e = \hbar\omega_k A_e = \frac{4}{3} \frac{\omega_k^4}{c^3} d_{g,e}^2 \quad (74)$$

Notese en 74 que la potencia P es muy similar a la potencia emitida por un dipolo oscilante clásico (como si el campo electromagnético fuera emitido por electrones en órbita). Por otro lado, para el caso de la emisión estimulada: $W_{est k\lambda} = nW_{esp k}$, lo que implica que sólo se pueden emitir fotones con la misma frecuencia (\vec{k}) y polarización de los que ya están en el campo. En consecuencia, a medida que se emiten más fotones en un modo determinado, resulta aún más probable producir fotones en el mismo modo: generando un *haz* de fotones coherentes (es decir, todos con las mismas características y coherentes en fase entre sí). Si los átomos pueden mantenerse en los niveles excitados (emisores), se obtiene lo que se denomina *LASER* (light amplification by stimulated emission of radiation). Por supuesto, normalmente es más probable que los fotones sean absorbidos a que provoquen

⁵Inclusive, para dipolos clásicos.

una emisión estimulada, ya que en el equilibrio se tiene muchos más centros dispersores (átomos/moléculas) en estado fundamental o base que en estado excitado, *i.e.*: $n_g \gg n_e$. Se necesita entonces un mecanismo capaz de invertir la población de los estados atómicos (como el bombeo óptico) para soportar un laser.

1.5.4.. Absorción

A partir del desarrollo de los mecanismos de emisión, resulta relativamente directo obtener la *tasa de absorción*. La expresión 75 muestra el resultado que se obtiene para la tasa de absorción por transiciones dipolares:

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} n_{k,\lambda} |\langle e | \vec{d} | g \rangle \cdot \langle n_{k,\lambda} | \vec{E} | n_{k,\lambda} + 1 \rangle|^2 \rho(E_f) = \frac{\omega_k^3}{2\pi\hbar c^3} n_{k,\lambda} |\vec{\epsilon}_{k,\lambda} \cdot \vec{d}_{e,g}|^2 d\Omega \quad (75)$$

En 75 se ha utilizado $\langle n_{k,\lambda} | \mathbf{a}_{\mathbf{k},\lambda} | n_{k,\lambda} + 1 \rangle = \sqrt{n_{k,\lambda}}$, representando la absorción.

1.5.5.. Radiación de cuerpo negro

Considérese una cavidad con radiación electromagnética en equilibrio térmico con sus paredes. Entonces, la polarización y el vector \vec{k} de los fotones resulta ser aleatoria, y puede obtenerse la tasa de absorción total (W_{ab}) integrando la tasa de emisión como se muestra en 76:

$$W_{ab} = \int_{\Omega} d\Omega W_{ab}(\theta) = \frac{4}{3} n_k \frac{\omega_k^3}{\hbar c^3} d_{e,g}^2 \quad (76)$$

La expresión 76 aplica para una frecuencia (y una longitud del vector de onda) determinada. De modo análogo, la emisión total W_{em} se obtiene como la suma de la emisión espontánea y la emisión estimulada, como sigue:

$$W_{em} = W_{esp} + W_{est} = (n_k + 1) \frac{4}{3} \frac{\omega_k^3}{\hbar c^3} d_{g,e}^2 \quad (77)$$

En la expresión 77 n_k representa el número de fotones en el modo k . Como se ha asumido el equilibrio, n_k depende sólo de la densidad de energía en la frecuencia asociada ω_k .

La densidad de energía $u(\omega)$ se expresa por unidad de volumen, donde la energía se obtiene de la cantidad total de fotones multiplicado por la energía correspondiente: $E = n_k \rho(\omega_k) \hbar \omega_k$. Entonces:

$$u(\omega_k) = \hbar \omega_k \rho(\omega_k) \frac{n_k}{L^3} \quad (78)$$

Luego, a partir de la densidad de estados $\rho(\omega_k) = 2 \left(\frac{L}{2\pi c}\right)^3 \omega^2 \int d\Omega = \frac{L^3}{c^3 \pi^2} \omega^2$ se obtiene, combinando con 78 finalmente:

$$n_k = \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega_k^3} u(\omega_k) \quad (79)$$

A partir de los resultados en 77 a 79 para la densidad de energía y de la definición del *coeficiente de Einstein*, las tasas de emisión y absorción pueden escribirse como indica 81:

$$B_{ab} \equiv \frac{4\pi^2}{3\hbar^2} d^2 \longrightarrow W_{ab} = B_{ab} u(\omega_k) \quad (80)$$

$$B_{em} \equiv B_{ab}, A_{em} \equiv A_e = \frac{4}{3} \frac{\omega_k^3}{\hbar c^3} d_{g,e}^2 \longrightarrow W_{em} = A_{em} + B_{em} u(\omega_k)$$

En equilibrio, se impone que coincide la cantidad de fotones absorbidos y emitidos (para conservar la cantidad total), entonces: $N_{em} W_{emk} = N_g W_{abk}$.

Combinando con el coeficiente de Einstein, se tiene: $N_{em}(A + uB) = N_g Bu$, lo que implica $N_{em}A = uB(N_g - N_{em})$, lo que se conoce como el *principio del equilibrio o balance detallado*, y puede resolverse para la densidad de energía u en estas condiciones: $u = \frac{A/B}{N_g/N_e - 1}$. Ahora, considerando las definiciones, se tiene: $A/B = \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3}$, y atendiendo a la condición de equilibrio térmico, la razón de poblaciones es $\frac{N_g}{N_e} = \frac{e^{-\beta E_g}}{e^{-\beta E_e}} = e^{-\beta(E_g - E_e)} = e^{\beta \hbar \omega_k}$, ya que $\hbar \omega_k$ es la energía necesaria para la transición desde el estado estacionario fundamental o base $|g\rangle$ al estado excitado $|e\rangle$.

Finalmente, el espectro de energía emitida se obtiene como indica 81:

$$u(\omega_k, T) = \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega^3}{e^{\beta \hbar \omega_k} - 1} \quad (81)$$

1.6.. Teoría de de Wigner-Weisskopf

Considérese un sistema de dos niveles (por ejemplo, un átomo) interactuando con un único modo del campo electromagnético, como se describe en la siguiente sección 1.6.1..

1.6.1.. Interacción de un átomo con un único modo electromagnético

El Hamiltoniano del sistema ($\mathcal{H} = \mathcal{H}_I + V$) se simplifica por medio de 83:

$$\mathcal{H}_I = \hbar \nu \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \frac{\hbar \omega}{2} \sigma_z \quad (82)$$

$$V = \hbar G (\sigma_+ \mathbf{a} + \sigma_- \mathbf{a}^\dagger)$$

En 83 se ha utilizado $G \equiv \sqrt{\frac{\nu}{\hbar L^3}} d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}$ denominado *operador dipolar*.

Utilizando el marco referencial de interacción definido por el Hamiltoniano \mathcal{H}_I , $U = e^{iH_0 t}$, entonces $H_1 = U V U^\dagger$, y a partir de 83 se obtiene:

$$\mathcal{H}_1 = \hbar g e^{i\nu\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} t} e^{i\omega\sigma_z \frac{t}{2}} (\sigma_+ \mathbf{a} + \sigma_- \mathbf{a}^\dagger) e^{-i\nu\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} t} e^{-i\omega\sigma_z \frac{t}{2}} = \hbar G \left[e^{i(\omega-\nu)t} \sigma_+ \mathbf{a} + e^{-i(\omega-\nu)t} \sigma_- \mathbf{a}^\dagger \right] \quad (83)$$

A partir de 84 conviene introducir $\Delta \equiv \omega - \nu$.

La evolución temporal de los estados puros según 84 en el marco referencial de la interacción se obtiene de la ecuación de Schrödinger: $i\hbar|\dot{\psi}\rangle = \mathcal{H}_1|\psi\rangle$, para lo cual se emplea la propiedad autobase⁶ de los estados $|g\rangle$ y $|e\rangle$, pudiendo expresar al cualquier estado genérico $|\psi\rangle$ como combinación lineal de éstos, como indica 85:

$$i\hbar|\dot{\psi}\rangle = i\hbar \sum_n \left[\alpha_n \dot{\alpha}_n(t) |e, n\rangle + \beta_n \dot{\beta}_n(t) |g, n\rangle \right] = \hbar G \sum_n \left[\alpha_n \sigma_- \mathbf{a}^\dagger e^{-it\Delta} |e, n\rangle + \beta_n \sigma_+ \mathbf{a} e^{it\Delta} |g, n\rangle \right] \quad (84)$$

Ahora, considerando que se trata de un sistema de 2 niveles (*Two Levels System (TLS)*), se tiene: $\sigma_+ |e\rangle = 0$ y $\sigma_- |g\rangle = 0$, y junto con las propiedades de los operadores creación/anihilación, se obtiene:

$$i\hbar|\dot{\psi}\rangle = \hbar G \sum_n \left[\alpha_n \sigma_- \mathbf{a}^\dagger e^{-it\Delta} |e, n\rangle + \beta_n \sigma_+ \mathbf{a} e^{it\Delta} |g, n\rangle \right] = \hbar G \sum_n \left[\alpha_n e^{-it\Delta} \sqrt{n+1} |g, n+1\rangle + \beta_n e^{it\Delta} \sqrt{n} |e, n-1\rangle \right] \quad (85)$$

Proyectando el resultado de 86 en $|g, n\rangle$ y $|e, n\rangle$ se obtiene las ecuaciones para la evolución temporal de las funciones $\alpha(t)$ y $\beta(t)$, que constituyen la expansión del estado puro genérico $|\psi\rangle$:

$$i\hbar \dot{\alpha}_n(t) = \hbar G \beta_{n+1}(t) e^{it\Delta} \sqrt{n+1} \quad (86)$$

$$i\hbar \dot{\beta}_n(t) = \hbar G \alpha_{n-1}(t) e^{-it\Delta} \sqrt{n}$$

Las expresiones en 87 representan un sistema cerrado de ecuaciones diferenciales que puede resolverse iterativamente, obteniendo α_n y β_{n+1} . A modo de ejemplo, considérese el caso en que el estado inicial ($t = 0$) de TLS (átomo) sea excitado ($|e\rangle$) y decae entonces al estado fundamental o base $|g\rangle$, entonces: $\beta_n(0) = 0 \forall n$ y se obtiene:

$$\alpha_n(t) = \alpha_n(0) e^{i\Delta \frac{t}{2}} \left[\cos\left(\frac{\zeta_n t}{2}\right) - \frac{i\Delta}{\zeta_n} \sin\left(\frac{\zeta_n t}{2}\right) \right] \quad (87)$$

$$\beta_n(t) = -\alpha_n(0) e^{-i\Delta \frac{t}{2}} \left[\frac{2iG\sqrt{n+1}}{\zeta_n} \sin\left(\frac{\zeta_n t}{2}\right) \right]$$

⁶Base autonormal.

En 88 se ha introducido $\zeta_n \equiv \sqrt{\Delta^2 + 4G^2(n+1)}$.

Si inicialmente no existiese presencia de campo electromagnético, *i.e.* el campo electromagnético está en estado vacío, entonces: $\alpha_0(0) = 1$ y $\alpha_n(0) = 0 \forall n \neq 0$, resultando que en 88 existen sólo dos componentes no nulas:

$$\begin{aligned} \alpha_0(t) &= e^{i\Delta \frac{t}{2}} \left[\cos\left(\frac{\sqrt{\Delta^2 + 4G^2}t}{2}\right) - \frac{i\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + 4G^2}} \sin\left(\frac{\sqrt{\Delta^2 + 4G^2}t}{2}\right) \right] \\ \beta_1(t) &= -e^{-i\Delta \frac{t}{2}} \frac{2iG}{\sqrt{\Delta^2 + 4G^2}} \sin\left(\frac{\sqrt{\Delta^2 + 4G^2}t}{2}\right) \end{aligned} \quad (88)$$

Nótese que, por lo tanto, incluso en ausencia de campo electromagnético, es posible hacer la transición del estado fundamental o base $|g\rangle$ al estado excitado $|e\rangle$. En la aproximación semi-clásica (tratando al campo clásicamente) no es posible obtener transición de ningún tipo en ausencia de campos externos. Las oscilaciones obtenidas en el abordaje cuántico para este TLS se conocen como *oscilaciones de Rabi en el vacío*.

1.6.2.. Interacción de un átomo con varios modos electromagnéticos

Al analizar la interacción de un átomo con un único modo de radiación, descrito en la dsección 1.6.1., se obtuvo que las transiciones sólo pueden producirse si se conserva la energía. Sin embargo, en situaciones experimentales reales, existe un ancho de línea finito para cualquier transición, resultando *no ideal*. Para estimar el ancho de línea, se requiere analizar la situación de un campo no sólo bimodal sino multimodal.

Considérese el mismo Hamiltoniano utilizado en el caso de campo bimodal (sección 1.6.1.), pero ahora tratando un campo con varios modos. En este caso, el término de interacción del Hamiltoniano (V) en el marco referencial de la interacción está dado por la expresión 89:

$$V = \hbar \sum_k \left(G_k^* \mathbf{a}_k \sigma_+ e^{i(\omega - \nu_k)t} + G_k \mathbf{a}_k^\dagger \sigma_- e^{-i(\omega - \nu_k)t} \right) \quad (89)$$

De maneranáloga a ejemplo bimodal, se considera la situación en que inicialmente el campo electromagnético está en el estado de vacío (ausencia de campo electromagnético para $t = 0$) y la transición atómica crea un fotón emitido. Sin embargo, para el caso multimodal, el fotón creado puede estar en alguno de varios (no sólo dos) estados posibles, por lo que la función de estado $|\psi(t)\rangle$ es, en este caso:

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(t)|e, 0\rangle + \sum_k \beta_k |g, 1_k\rangle \quad (90)$$

el índice k en 90 denota el modo⁷ y las condiciones iniciales son: $\alpha(0) = 1$ y $\beta_k(0) = 0 \forall k$, de donde se obtiene el sistema de ecuaciones:

⁷No confundir con el número de fotón!

$$\begin{aligned}\dot{\alpha}(t) &= -i \sum_k G_k^* e^{i(\omega - \nu_k)t} \beta_k(t) \\ \dot{\beta}(t) &= -i G_k e^{-i(\omega - \nu_k)t} \alpha(t)\end{aligned}\quad (91)$$

Considerando la transición emn 92 como un proceso de decaimiento desde el estado excitado ($|e\rangle$) al estado fundamental ($|g\rangle$): $|\alpha(t)|^2$ representa entonces la probabilidad de decaimiento.

Resolviendo 92 para $\alpha(t)$ en primer lugar, se integra $\dot{\beta}$:

$$\begin{aligned}\dot{\alpha}(t) &= -i \sum_k G_k^* e^{i(\omega - \nu_k)t} \left(\int_0^t -i G_k \alpha(t') e^{-i(\omega - \nu_k)t'} dt' \right) = \\ &= - \sum_k |G_k|^2 \int_0^t dt' e^{-i(\omega - \nu_k)(t-t')} \alpha(t')\end{aligned}\quad (92)$$

En el supuesto de que los modos el campo electromagnético constituyan un continuo⁸, puede reemplazarse la suma \sum_k en 93 por $\int \rho(k) d^3k$ y utilizar la densidad de estados dada por $\nu_k = ck$, i.e.: $\rho(k) d^3k = 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2 dk d\phi \sin(\theta) d\theta$ y el operador dipolar $G_k = \frac{\nu_k}{4\hbar L^3} |d_{e,g}|^2 \sin^2(\theta)$, entonces $\dot{\alpha}(t)$ en 93 resulta:

$$\dot{\alpha}(t) = - \frac{|d_{e,g}|^2}{6\pi^2 \hbar c^3} \int_0^\infty \nu_k^3 d\nu_k \int_0^t dt' e^{-i(\omega - \nu_k)(t-t')} \quad (93)$$

A partir de 94 para que una transición tenga lugar, aún se requiere $\nu_k \approx \omega$, por lo que se propone introducir dos aproximaciones (simplificaciones): i) reemplazar $\nu_k^3 \longleftrightarrow \omega^3$ y ii) extender el límite inferior de integración en $d\nu_k$ a $-\infty$. Entonces, se tiene:

$$\begin{aligned}\dot{\alpha}(t) &= - \frac{|d_{e,g}|^2}{6\pi^2 \hbar c^3} \int_0^t dt' \alpha(t') \omega^3 \left(\frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty d\nu_k e^{-i(\omega - \nu_k)(t-t')} \right) = \\ &= - \frac{|d_{e,g}|^2}{6\pi^2 \hbar c^3} \int_0^t dt' \alpha(t') \omega^3 2\pi \delta(t-t')\end{aligned}\quad (94)$$

A partir de 95 puede verse que la evolución temporal de $\alpha(t)$ está dada por la ecuación diferencial 95:

$$\dot{\alpha}(t) = - \frac{\Gamma}{2} \alpha(t) \quad (95)$$

⁸Véase, por ejemplo, *Interactions of Photons and Neutrons with Matter* de S. Chen y M. Kotlarchyk, M., (2007).

donde $\Gamma \equiv \frac{|d_{e,g}|^2 \omega^3}{3\pi\hbar c^3}$ y puede verse que el decaimiento está vinculado a la tasa total de emisión de Einstein, ya que $\Gamma = \frac{A_e}{4\pi}$, por lo tanto es inmediato resolver la evolución temporal: $\alpha(t) = e^{-\frac{\Gamma}{2}t}$, resultando la probabilidad de decaimiento ($P \sim |\alpha(t)|^2 = e^{-\Gamma t}$)

A partir de $\alpha(t)$ pueden calcularse los $\beta_k(t)$ como indica 96:

$$\beta_k(t) = -i \int_0^t dt' G_k e^{-i(\omega - \nu_k)t'} e^{-\frac{\Gamma}{2}t'} = G_k \frac{1 - e^{-i(\omega - \nu_k)t} e^{-\frac{\Gamma}{2}t}}{(\nu_k - \omega) + i\frac{\Gamma}{2}} \quad (96)$$

Entonces, con el resultado 96, el espectro de frecuencias de la radiación emitida ($S(\nu_k)$) viene dado por 97:

$$S(\nu_k) \propto \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1 + e^{-\Gamma t} (1 - 2 \cos(\omega - \nu_k)t)}{\frac{\Gamma^2}{4} + (\omega - \nu_k)^2} \sim \frac{1}{\frac{\Gamma^2}{4} + (\omega - \nu_k)^2} \quad (97)$$

Por lo tanto, a partir de la expresión 97 se observa que el espectro es una función Lorentziana centrada en ω y con ancho de línea⁹ Γ , como indica la figura 5.

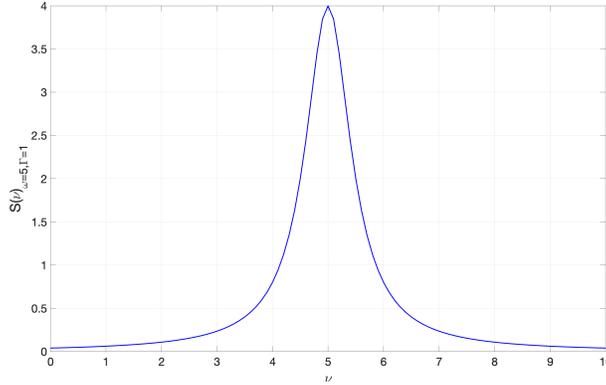


Figura 5. Espectro (Lorentziano) de ancho de banda $\Gamma = 1$ centrado en $\omega = 5$.

1.7.. Ejemplos de aplicación: Interacciones de fotones y electrones con medios materiales

Esta sección presenta ejemplos de aplicación de los formalismos desarrollados, considerando mecanismos típicos de interacción frecuentemente presentes en aplicaciones médicas de las radiaciones ionizantes.

A continuación, se presentan lineamientos generales para abordar la dispersión de fotones por electrones, ya sean electrones libres o ligados a un átomo, así como otros tipos de partículas proyectiles, para aplicaciones como se han descrito precedentemente:

⁹También denominado *ancho de banda*

- Teoría de dispersión aplicada a neutrones térmicos (sección 1.4.)
- Teoría de emisión/absorción de fotones aplicada en transiciones dipolares (sección 1.5.).

Nótese que en los procesos de emisión/absorción sólo interviene un fotón (absorbido o emitido). A continuación, se aborda la situación de la dispersión de fotones, lo que implica la consideración de un fotón *incidente* y otro *emergente*, por lo que a los fines descriptivos se trata de un proceso en el que intervienen dos fotones, como se indica en la figura 6.

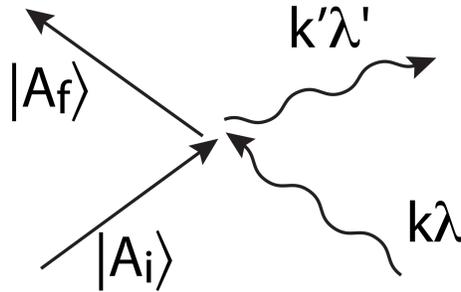


Figura 6. Esquema de dispersión de fotones.

Para el estudio de la interacción fotón-átomo se requiere plantear el campo electromagnético cuantizado, como indica la expresión 98, basada en los auto-estados del electrón con el cual se interactúa $|A\rangle$:

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2m} \left(p - \frac{q_e A}{c} \right)^2 + \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (98)$$

A partir de 98, puede separarse el Hamiltoniano de interacción como indica 99:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V = \left[\frac{p^2}{2m} + \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] + \left[-\frac{q_e}{2mc} (p \cdot A + A \cdot p) + \frac{q_e^2}{2mc^2} A(r_i)^2 \right] \quad (99)$$

donde $A(r_i)^2$ es la posición del *i*-ésimo electrón con el que se considera la interacción. Por tanto, generalizando a todos los electrones del centro dispersor, el potencial de interacción *V* resulta:

$$V = \sum_i -\frac{q_e}{2mc} [p_i \cdot A(r_i) + A(r_i) \cdot p_i] + \frac{q_e^2}{2mc^2} A(r_i)^2 \quad (100)$$

Nótese en 100 que puede identificarse un resultado que ya se ha utilizado en la descripción de los procesos de emisión que el primer término del potencial *V* en la aproximación

dipolar resulta: $\frac{q_e}{mc} p \cdot A \rightarrow d \cdot E$. En la descripción de los procesos de emisión de la sección 1.5. se obtenía un único fotón como consecuencia de aplicar la teoría de perturbaciones a *primer orden*, por lo que para abordar un tratamiento con dos fotones es necesario, o bien: i) incorporar más términos $\propto A^2$, o: ii) aplicar teoría de perturbaciones a *segundo orden*.

Como resultado general de ambas opciones, se obtienen transiciones $\propto \alpha^2 = \left(\frac{q_e}{\hbar c}\right)^2$, i.e. segundo orden en la constante de estructura hiperfina α .

Luego, para calcular tasas de transiciones por dispersión $W = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_f) |K_1^{(2)} + K_2^{(1)}|^2$, donde $K_1^{(2)}$ representa la contribución a segundo orden proveniente del término $V_1 = -\frac{q_e}{mc} \sum_i p_i \cdot A_i$; mientras que $K_2^{(1)}$ representa la contribución a primer orden proveniente del término $V_2 = \frac{q_e^2}{2mc} \sum_i A_i^2$.

Obsérvese que $K_1^{(1)}$ es nulo ya que considera estados diferentes al que específicamente tiene el fotón *incidente*, es decir, no se trata de un proceso de dispersión efectivo.

Los auto-estados del sistema se indican en las Tabla 1.7..

	Estado Inicial	Estado Final	Energía Inicial	Energía Final
e^-	$ A_i\rangle$	$ A_f\rangle$	ϵ_i	ϵ_f
γ	$ \mathbf{1}_{k,\lambda}, \mathbf{0}_{k',\lambda'}\rangle$	$ \mathbf{0}_{k,\lambda}, \mathbf{1}_{k',\lambda'}\rangle$	$\hbar\omega_k$	$\hbar\omega_{k'}$
Total	$ i\rangle$	$ f\rangle$	E_i	E_f

$K_2^{(1)}$ puede calcularse inicialmente para un único electrón utilizando la expresión del vector potencial \vec{A} como indica 101:

$$\vec{A} = \sum_{k,\lambda} \frac{2\pi\hbar c^2}{L^3 \omega_k} (a_{k,\lambda} e^{ikr} + a_{k,\lambda}^\dagger e^{-ikr}) \vec{\epsilon}_{k,\lambda} \quad (101)$$

Si bien $K_2(1)$ es proporcional a A^2 , sólo resultan no nulos los términos apropiados que conectan los estados de modos (k, k') , responsables de la aniquilación del fotón *incidente* en modo k y de la creación del fotón *emergente* en modo k' , i.e. términos $a_k^\dagger a_k$, como indica 102:

$$K_2^{(1)} = \langle f | V_2 | i \rangle = \frac{q_e^2}{2mc^2} \frac{2\pi\hbar c^2}{L^3 \sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} \vec{\epsilon}_{k,\lambda} \cdot \vec{\epsilon}_{k',\lambda'} \langle f | a_{k,\lambda} a_{k',\lambda'}^\dagger e^{i(k-k')r} + a_{k,\lambda}^\dagger a_{k',\lambda'} e^{-i(k-k')r} + a_{k,\lambda}^\dagger a_{k',\lambda'}^\dagger e^{-i(k+k')r} + a_{k,\lambda} a_{k',\lambda'} e^{i(k+k')r} | i \rangle \quad (102)$$

Ahora, con $\omega_k = ck$ y $\vec{k} - \vec{k}' = \vec{q} = \frac{\hbar}{\hbar}$ (el momento de retroceso del electrón como centro dispersor), puede simplificarse la expresión 102 para obtener 103:

$$K_2^{(1)} = \langle f | V_2 | i \rangle = \frac{q_e^2}{2mc^2} \frac{2\pi\hbar c^2}{L^3 \sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} \vec{\epsilon}_{k,\lambda} \cdot \vec{\epsilon}_{k',\lambda'} \langle A_f | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | A_i \rangle \langle \mathbf{0}_{k,\lambda}, \mathbf{1}_{k',\lambda'} | a_{k,\lambda} a_{k',\lambda'}^\dagger | \mathbf{1}_{k,\lambda}, \mathbf{0}_{k',\lambda'} \rangle \quad (103)$$

donde el producto interno en 103 $\langle \mathbf{0}_{k,\lambda}, \mathbf{1}_{k',\lambda'} | a_{k,\lambda} a_{k',\lambda'}^\dagger | \mathbf{1}_{k,\lambda}, \mathbf{0}_{k',\lambda'} \rangle = 1$, por lo que extendiendo a todos los electrones como posibles centros dispersores, se obtiene 104:

$$K_2^{(1)} = \langle f|V_2|i\rangle = \frac{q_e^2}{2mc^2} \frac{2\pi\hbar c^2}{L^3 \sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} \vec{\epsilon}_{k,\lambda} \cdot \vec{\epsilon}_{k',\lambda'} \langle A_f | \sum_i e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} |A_i\rangle \quad (104)$$

El resultado en 104 representa la primera contribución al elemento de la matriz de dispersión, de primer orden en la teoría de perturbaciones, a partir del término cuadrático en el potencial del campo V .

Por otro lado, las contribuciones a $K_1^{(2)}$ a segundo orden proveniente de la parte lineal del potencial (V_1) se obtienen según 105:

$$K_1^{(2)} = \sum_h \frac{\langle f|V_1|h\rangle \langle h|V_1|i\rangle}{E_i - E_h} \quad (105)$$

Nótese que el término $K_1^{(2)}$ describe transiciones virtuales a estados intermedios ya que a partir de transiciones de primer orden V_1 sólo puede crear o aniquilar un fotón cada vez. Por lo tanto, hay dos procesos posibles que contribuyen a $K_1^{(2)}$:

1. Una primera absorción de un fotón en el modo k, λ seguida de la creación de un fotón en el modo k', λ' : el estado intermedio es de cero¹⁰ fotones en estos dos modos.
2. Una primera creación de un fotón en el modo k', λ' seguida de la aniquilación del fotón en el modo k, λ : el estado intermedio es un fotón en cada modo.

Entonces, se tiene:

$$K_1^{(2)} = \sum_h \frac{\langle A_f | \langle \mathbf{0}_{k,\lambda}, \mathbf{1}_{k',\lambda'} | V_1 | \mathbf{0}_{k,\lambda}, \mathbf{0}_{k',\lambda'} | A_h \rangle \langle A_h | \langle \mathbf{0}_{k,\lambda}, \mathbf{0}_{k',\lambda'} | V_1 | \mathbf{1}_{k,\lambda}, \mathbf{0}_{k',\lambda'} \rangle | A_i \rangle}{\epsilon_i - \epsilon_h + \hbar\omega_k} + \sum_h \frac{\langle A_f | \langle \mathbf{0}_{k,\lambda}, \mathbf{1}_{k',\lambda'} | V_1 | \mathbf{1}_{k,\lambda}, \mathbf{1}_{k',\lambda'} | A_h \rangle \langle A_h | \langle \mathbf{1}_{k,\lambda}, \mathbf{1}_{k',\lambda'} | V_1 | \mathbf{1}_{k,\lambda}, \mathbf{0}_{k',\lambda'} \rangle | A_i \rangle}{\epsilon_i + \hbar\omega_k - (\epsilon_h + \hbar\omega_k - \hbar\omega_{k'})} \quad (106)$$

Nótese que $K_1^{(2)}$ tiene un factor extra $\propto \omega_k$ en el denominador, con respecto a $K_2^{(1)}$. Por ello, para rangos de energías más altas del fotón *incidente* (como la dispersión de rayos X) sólo sobrevive $K_1^{(2)}$, mientras que para rangos de energías más bajas (régimen óptico) $K_2^{(1)}$ es más importante.

A partir del resultado obtenido, puede realizarse la siguiente correspondencia, según el régimen energético ($\hbar\omega$) del fotón *incidente*, entre los diferentes mecanismos de interacción de los fotones vistos como proyectiles incidentes, con los electrones orbitales, cuya energía de ionización se representa por E_{Ioniz} :

- Dispersión de Rayleigh (*Proceso elástico a baja energía*): $\hbar\omega \ll E_{ioniz}, |E_h - E_{ioniz}|, E_f = E_{ioniz}$. El estado final tiene la misma energía que el inicial, $E_f = E_{ioniz}$, ya que la dispersión es elástica. La dispersión involucra los niveles virtuales intermedios, con energías E_h . Se obtiene la sección eficaz $\sigma \propto \omega^4$.

¹⁰ Ausencia de fotones.

- Dispersión de Raman (*Proceso inelástico a baja energía*): $\hbar\omega \ll E_{ioniz}$, $E_f \neq E_{ioniz}$. Normalmente, el estado final es un estado roto-vibracional diferente del centro dispersor (átomo/molécula), por lo que la diferencia de energía entre el estado inicial y el final es pequeña. Si $E_f > E_{ioniz}$ el proceso de dispersión se denomina *de Stokes*, de lo contrario si $E_f < E_{ioniz}$, el proceso de dispersión se denomina *de anti-Stokes*.
- Dispersión de Thompson (*Proceso elástico a alta energía*): $\hbar\omega \gg E_{ioniz}$, $E_f = E_{ioniz}$. Este proceso predomina, por ejemplo, en la dispersión de rayos X blandos. Este tipo de dispersión puede interpretarse de forma semi-clásica, en el límite en el que la longitud de onda λ es mayor que las dimensiones atómicas (a_0), $\lambda \gg a_0$. La sección eficaz resulta equivalente a la que se obtendría para un electrón libre, $\sigma = 8\pi r_0^2$, donde r_0 representa el radio efectivo del electrón libre.
- Dispersión de Compton (*Proceso inelástico a alta energía*): $\hbar\omega \gg E_{ioniz}$, $\lambda \ll a_0$, $E_f = E_{ioniz}$. Para energías muy altas, la longitud de onda λ es pequeña en comparación con el tamaño del átomo, y la energía es mucho mayor que la energía de enlace del electrón (E_b) o de ionización (E_{ioniz}), de modo que el estado final del electrón es un estado no ligado. Por tanto, esta dispersión es muy similar a la dispersión Compton (dispersión inelástica) por un electrón libre.

Nótese que, en el caso de la dispersión de rayos X, la clasificación es ligeramente diferente a la anterior. Existen otros dos procesos que compiten con la dispersión de Coulomb incluso a las energías de rayos X:

- Dispersión de Raman de electrones: Proceso de dispersión inelástico, en el que el estado atómico inicial es el estado fundamental o base, y el estado final un estado electrónico excitado y discreto.
- Dispersión Rayleigh para rayos X: Proceso de dispersión elástico, en el que el estado atómico final es el mismo que el inicial, ya que no hay excitación del átomo.

Además de los procesos de dispersión, son posibles otros procesos que implican la interacción del fotón *incidente* con electrones atómicos (más allá de la absorción y emisión de campo electromagnético, ya estudiado). En orden creciente de energía del fotón *incidente*, la interacción de la materia con la radiación electromagnética puede clasificarse según establece la Tabla 1.7..

Rayleigh/Raman	Fotoeléctrico	Thomson	Compton	Produc. Pares
$\hbar\omega < E_{ioniz}$	$\hbar\omega \geq E_{ioniz}$	$\hbar\omega \gg E_{ioniz}$	$\hbar\omega \sim m_e c^2$	$\hbar\omega > 2m_e c^2$
$\sim \text{eV}$	$\sim \text{keV}$	$\sim \text{keV}$	$\sim \text{MeV}$	$\geq \text{MeV}$
Luz visible	Rayos X	Rayos X	Rayos X duros	Rayos X duros

Descripción semi-clásica de la dispersión

Un abordaje clásico resulta ser suficiente para proveer una primera aproximación (orden de magnitud) de la sección eficaz de dispersión. Considérense los efectos de la interacción

de la onda electromagnética con un dipolo oscilante (como el creado por un electrón atómico, que es el centro dispersor).

Es posible considerar que el electrón centro dispersor está unido al átomo por un resorte, y que oscila alrededor de su posición de reposo con frecuencia ω_0 . Cuando la onda electromagnética incide sobre el electrón, ejerce una fuerza adicional. La fuerza que actúa sobre el electrón es: $|F| = -q_e|E(t)|$, siendo $E(t) = E_0 \sin(\omega t)$ el campo eléctrico oscilante. Esta fuerza impulsora oscilante se suma a la atracción del electrón hacia el átomo $\sim -kx_e$, donde k (dada por la fuerza de interacción de Coulomb y relacionada con la energía de ionización E_{Ioniz}) se vincula a la frecuencia oscilante del electrón por medio de: $\omega_0^2 = \frac{k}{m_e}$. Entonces, la ecuación clásica de movimiento del electrón resulta 107:

$$m_e \ddot{x}_e = -kx_e - q_e E(t) \longrightarrow \ddot{x}_e + \omega_0^2 x_e = -\frac{q_e}{m_e} E(t) \quad (107)$$

Proponiendo solución a 107 del tipo $x_e(t) = C \sin(\omega t)$, se obtiene:

$$(-\omega^2 + \omega_0^2) C = -\frac{q_e}{m_e} E_0 \longrightarrow C = \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2} \frac{q_e}{m_e} E_0 \quad (108)$$

Una partícula cargada (o un dipolo oscilante) cargada irradia, con una potencia P dada por 109:

$$P = \frac{2}{3} \frac{q_e^2}{c^3} (\ddot{x}_e)^2 \quad (109)$$

donde la aceleración (\ddot{x}_e) es: $\ddot{x}_e = -\omega^2 C \sin(\omega t)$. Por lo tanto, el valor de expectación del cuadrado de la aceleración resulta:

$$\langle \ddot{x}_e^2 \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{\omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \frac{q_e}{m_e} E_0 \right)^2 \quad (110)$$

A partir de las expresiones 109 y 110 se obtiene la potencia radiada P :

$$P = \frac{1}{3} \left(\frac{q_e^2}{m_e c^3} \right)^2 \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2} c E_0 \quad (111)$$

La intensidad radiada¹¹ es $I_0 = \frac{cE_0}{8\pi}$. Es posible expresar la potencia radiada P como la "sección eficaz" por la intensidad, *i.e.*: $P = \sigma I_0$, de donde puede obtenerse la sección eficaz para la interacción electromagnética σ dada por 112:

¹¹Nótese que la densidad de energía electromagnética es: $u \sim \frac{1}{2} E^2$ y la intensidad por unidad de área I es: $I \sim cu$.

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{q_e^2}{m_e c^3} \right)^2 \left(\frac{\omega^2}{(\omega^2 - \omega_0^2)} \right)^2 \quad (112)$$

En unidades del Sistema Internacional, la expresión 112 resulta:

$$\sigma = 4\pi r_e^2 \frac{2}{3} \left(\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} \right)^2 \left(\frac{\omega^2}{(\omega^2 - \omega_0^2)} \right)^2 \quad (113)$$

En la expresión 113 se utilizó el radio clásico del eelctrón $r_e \equiv \frac{q_e^2}{m_e c^2} \approx 2.8 \cdot 10^{-15} \text{ m} = 2.8 \text{ fm}$.

1.7.1.. **Dispersión Rayleigh de rayos X**

La dispersión Rayleigh suele describir la dispersión elástica por radiaciones de baja energía. Describe, por ejemplo, la dispersión de la luz visible por parte de los átomos: en ese caso, la contribución predominante procede del término $K_1^{(2)}$. La dispersión de Rayleigh también describe la dispersión coherente y elástica de los rayos X en los átomos (por ejemplo, en un cristal) lo que representa un proceso importante, por ejemplo, en la difracción de rayos X.

En el caso de la dispersión de rayos X, la energía del fotón *incidente* es mayor que la energía de excitación electrónica (E_b): $\hbar\omega \gg E_b$. Por lo tanto, se tiene - tal como se describió en 1.7.- que $K_1^{(2)} \ll K_2^{(1)}$, por lo que se desprecia -en primera aproximación la contribución de $K_1^{(2)}$. Tratándose de electrones ligados¹², el retroceso es nulo y $\frac{dE_f}{dk'} = \hbar c$, por lo que la densidad de estados resulta $\rho(E_f) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{k'^2}{\hbar c} d\Omega$.

Entonces, la sección eficaz σ_{Ra} resulta:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{Ra}}{d\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|K_2^{(1)}|^2}{c/L^3} \frac{\rho(E_f)}{d\Omega} = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{c^2 r_e^2}{c/L^3} \left(\frac{2\pi\hbar}{L^3} \right)^2 \frac{1}{kk'} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{k'^2}{\hbar c} |\epsilon_{k,\lambda} \cdot \epsilon_{k',\lambda'}|^2 |\langle A_f | \sum_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} | A_i \rangle|^2 = \\ &= r_e^2 \left(\frac{\omega_{k'}}{\omega} \right) |\epsilon_{k,\lambda} \cdot \epsilon_{k',\lambda'}|^2 |\langle A_f | \sum_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} | A_i \rangle|^2 \end{aligned} \quad (114)$$

Considerando procesos de dispersión elástica (la dispersión inelástica es el caso de dispersión de Raman para los rayos X). Si el rayo X *incidente* no está polarizado, se tiene:

$$\frac{d\sigma_{Ra}}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} (1 + \cos^2(\theta)) |\langle g | \sum_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} | g \rangle|^2 \quad (115)$$

Y debe notarse en 115 que $f(p) = \langle g | \sum_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} | g \rangle$ es lo que se definió como *Factor atómico de Forma*. Cabe analizar los siguientes comportamiento asintóticos:

¹²A diferencia del caso de electrones libres.

- Nótese que para $p \rightarrow 0$: $\langle g | \sum_i \mathbf{1} | g \rangle = Z^2$ (el cuadrado del número atómico). Por lo tanto, en general, se obtiene que la dispersión Rayleigh resulta más débil para los elementos más liviano.
- ERn términos generales, siempre puede escribirse la sumatoria del factor atómico de forma como una integral: $f(p) = \langle g | \sum_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} | g \rangle \rightarrow \langle g | \int e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \hat{\rho}(r) d^3r | g \rangle$, usando la densidad de carga $\bar{\rho}(r) = \sum_i \delta(r - r_i)$, donde ha introducido: $\bar{\rho}(r) \equiv \langle g | \hat{\rho}(r) | g \rangle$.

Dispersión de Rayleigh en un cristal

Para abordar el caso de un cristal, pueden re-escribirse las posiciones de los electrones con la sustitución $r_i \rightarrow R_l + r_{l,i}$, donde R_l denota la posición del átomo¹³. A continuación, se realiza la sumatoria sobre todos los átomos y todos los electrones del átomo, obteniendo el *factor atómico de estructura* G_{crist} :

$$G_{crist} = \langle g | \sum_{l,i} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_l} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_{l,i}} | g \rangle = \sum_l f_l(p) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_l} \quad (116)$$

En 116 se ha introducido $f_l(p) \equiv \langle g | \sum_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_{l,i}} | g \rangle$.

Aprovechando la periodicidad del cristal, la posición de cada átomo es: $R_{l,j} = l_1 a_1 + l_2 a_2 + l_3 a_3 + r_j$, donde l_x , $x = 1, 2, 3$ indica la posición en la celda unidad de lados a_x , $x = 1, 2, 3$ y r_j especifica la posición del átomo en el interior de la celda específica. Entonces:

$$G_{crist}(q) = \sum_{l,j} f_j(q) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_{l,i}} e^{iq(l_1 a_1 + l_2 a_2 + l_3 a_3)} = \sum_{l_1, l_2, l_3} F(q) e^{iq(l_1 a_1 + l_2 a_2 + l_3 a_3)} \quad (117)$$

En la expresión 117 se ha utilizado el *Factor de forma de la celda unidad* $F(q) \equiv \sum_{l,j} f_j(q) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j}$, cantidad que se conoce por datos tabulados para diferentes materiales cristalinos.

En consecuencia, la sección eficaz de dispersión Rayleigh para un cristal resulta:

$$\frac{d\sigma_{Ra}^{(crist.)}}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} (1 + \cos^2(\theta)) |F(q)|^2 \frac{\sin^2(N_1 q a_1 / 2)}{\sin^2(q a_1 / 2)} \frac{\sin^2(N_2 q a_2 / 2)}{\sin^2(q a_2 / 2)} \frac{\sin^2(N_3 q a_3 / 2)}{\sin^2(q a_3 / 2)} \quad (118)$$

Puede verse en 118 que sólo cuando $q a_x = 2\pi h$ se tiene términos de interferencia no nulos, es decir, se ha obtenido el efecto que se conoce como la *difracción de Bragg*.

1.7.2.. Dispersión de luz visible

Si se considera el caso de la luz visible, la longitud de onda es grande en comparación con el tamaño atómico. Entonces, en lugar de utilizar la interacción completa $V = V_1 + V_2$, puede aproximarse de forma aceptable por el Hamiltoniano del dipolo eléctrico, $V = \vec{d} \cdot \vec{E}$. Este Hamiltoniano no produce ningún proceso de dos fotones de primer orden, por lo que

¹³La posición del núcleo o la posición del centro de masa atómico.

en este caso se necesita considerar el término $K_1^{(2)}$, y este término implica transiciones virtuales. Dado que la duración temporal ($\Delta t \rightarrow \delta t \rightarrow dt$) de estas transiciones es muy pequeña, no es necesario atender a la conservación de la energía. Se tiene, entonces $K_1^{(2)}$ dado por 105:

$$V = V_1 + V_2, \quad K_1^{(2)} = \sum_h \frac{\langle f|V_1|h\rangle \langle h|V_1|i\rangle}{E_i - E_h}, \quad |h\rangle = |A_h\rangle |\mathbf{0}_{k,\lambda}, \mathbf{0}_{k',\lambda'}\rangle \vee |h\rangle = |A_h\rangle |\mathbf{1}_{k,\lambda}, \mathbf{1}_{k',\lambda'}\rangle \quad (119)$$

Por supuesto, sería posible derivar la sección eficaz de dispersión de luz visible a partir del Hamiltoniano potencial vector del momentum, y en ese caso deberían incluirse ambos términos $K_2^{(1)}$ y $K_1^{(2)}$.

El campo eléctrico en el *gauge* de Lorentz es:

$$E = \sum_{\ell, \zeta} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_\ell}{L^3}} (a_{\ell, \zeta} e^{i\ell R} + a_{\ell, \zeta}^\dagger e^{-i\ell R}) \quad (120)$$

A partir de 120 se obtienen $\langle h|V_1|i\rangle$ y $\langle f|V_1|h\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{0}_{k,\lambda}, \mathbf{1}_{k',\lambda'} | (a_{\ell, \zeta} e^{i\ell R} + a_{\ell, \zeta}^\dagger e^{-i\ell R}) | \mathbf{0}_{k,\lambda}, \mathbf{0}_{k',\lambda'} \rangle &= e^{-ik'R} \delta_{\ell, k'} \\ \langle \mathbf{0}_{k,\lambda}, \mathbf{0}_{k',\lambda'} | (a_{\ell, \zeta} e^{i\ell R} + a_{\ell, \zeta}^\dagger e^{-i\ell R}) | \mathbf{1}_{k,\lambda}, \mathbf{0}_{k',\lambda'} \rangle &= e^{ikR} \delta_{\ell, k} \\ \langle \mathbf{0}_{k,\lambda}, \mathbf{1}_{k',\lambda'} | (a_{\ell, \zeta} e^{i\ell R} + a_{\ell, \zeta}^\dagger e^{-i\ell R}) | \mathbf{1}_{k,\lambda}, \mathbf{1}_{k',\lambda'} \rangle &= e^{ikR} \delta_{\ell, k} \\ \langle \mathbf{1}_{k,\lambda}, \mathbf{1}_{k',\lambda'} | (a_{\ell, \zeta} e^{i\ell R} + a_{\ell, \zeta}^\dagger e^{-i\ell R}) | \mathbf{1}_{k,\lambda}, \mathbf{0}_{k',\lambda'} \rangle &= e^{-ik'R} \delta_{\ell, k'} \end{aligned} \quad (121)$$

Entonces, se obtiene:

$$K_1^{(2)} = (122) \quad \frac{2\pi\hbar}{L^3} \sqrt{\omega_k \omega_{k'}} e^{i(k-k')R} \left[\sum_h \frac{\langle A_f | d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{k'} | A_h \rangle \langle A_h | d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_k | A_i \rangle}{\varepsilon_i - \varepsilon_h + \hbar\omega_k} + \sum_h \frac{\langle A_f | d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_k | A_h \rangle \langle A_h | d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{k'} | A_i \rangle}{\varepsilon_i + \hbar\omega_k - (\varepsilon_h + \hbar\omega_k + \hbar\omega_{k'})} \right]$$

Y, la sección eficaz se calcula como $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{W}{c/L^3}$ y considerando la densidad de estados finales (sin retroceso): $\rho(E_f) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{k'^2}{\hbar c} d\Omega$, obteniendo:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{vis}}{d\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{2\pi\hbar}{L^3}\right)^2 \omega_k \omega_{k'} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{k'^2}{\hbar c} \frac{L^3}{c} \left| \sum_h \left(\frac{(d_{f,h} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{k'}) (d_{h,i} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_k)}{\varepsilon_i - \varepsilon_h + \hbar\omega_k} + \frac{(d_{f,h} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_k) (d_{h,i} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{k'})}{\varepsilon_i - \varepsilon_h - \hbar\omega_{k'}} \right) \right|^2 = \\ &= k k'^3 \left| \sum_h \left(\frac{(d_{f,h} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{k'}) (d_{h,i} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_k)}{\varepsilon_i - \varepsilon_h + \hbar\omega_k} + \frac{(d_{f,h} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_k) (d_{h,i} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{k'})}{\varepsilon_i - \varepsilon_h - \hbar\omega_{k'}} \right) \right|^2 \quad (123) \end{aligned}$$

1.7.3.. Efecto fotoeléctrico

En esta sección se presenta la aplicación de los formalismos para obtener la sección eficaz del efecto fotoeléctrico, para describir la dispersión de un fotón *incidente* por parte de uno o varios electrones del átomo/molécula.

Resulta didáctico y útil iniciar la exposición considerando el caso de un átomo similar al hidrógeno¹⁴ (con número atómico Z y se calcula la sección eficaz diferencial como indica 124:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{W_{f,i}}{\Phi_{inc}} \quad (124)$$

donde $W_{f,i}$ representa la tasa de transición del evento de dispersión y Φ_{inc} es el flujo incidente de fotones. El flujo de fotones incidente Φ_{inc} puede calcularse suponiendo (por comodidad) que el sistema está encerrado en una cavidad de volumen $V = L^3$ (de modo que sólo hay un fotón en ese volumen). El flujo entrante de fotones en la cavidad viene dado por el número de fotones por unidad de área (A) y tiempo (t), como indica 125:

$$\Phi = \frac{\#fot.}{tA} = \frac{1}{(L/c)(L^2)} = \frac{c}{L^3} \quad (125)$$

La transición del evento de dispersión $W_{f,i}$ se calcula con la *Regla de Oro de Fermi* asumiendo una interacción fotón-átomo V y densidad de estados finales $\rho(E_f)$:

$$W_{i,f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|V|i\rangle|^2 \rho(E_f) \quad (126)$$

La densidad de estados finales $\rho(E_f)$ se expresa en términos del momento p del electrón disperso y del ángulo sólido de dispersión $d\Omega$.

En efecto, al ser absorbido el fotón, la densidad de estados finales depende solamente del electrón libre, el que se ha supuesto encerrado en el volumen V . La densidad de estados para el electrón viene dada por la densidad de estados de momento en la cavidad L^3 suponiendo que el electrón se propaga como una onda plana:

$$\rho(E_f) dE_f = \rho(\vec{p}) d^3\vec{p} = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 p^2 dp d\Omega \quad (127)$$

Finalmente, para expresar el resultado 126 en términos de la energía E , se requiere vincular el momentum $p = |\vec{p}|$ con E , que para el régimen no relativista resulta: $E_f = p^2/2m_e$, de donde: $dE_f = p dp/m$, por lo tanto:

$$\rho(E_f) = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 mp d\Omega \quad (128)$$

¹⁴Átomo hidrogenoide.

Se requiere calcular también el elemento de la matriz de transición $\langle f|V|i\rangle$, para $V = -\frac{q_e}{m_e c} \vec{A} \cdot \vec{p}$, considerando que los estados relevantes son: $|\mathbf{1}_{\vec{k},\lambda}\rangle$ y $|\mathbf{0}_{\vec{k},\lambda}\rangle$ y los auto-estados del momento del electrón, los que en la representación (Espacio) de coordenadas son: $\psi_i(\vec{r}) = \langle \vec{r}|i_e\rangle$ y $\psi_f(\vec{r}) = \langle \vec{r}|f_e\rangle$ Entonces, los elementos de matriz para las transiciones entre los estados relevantes son:

$$V_{i,f} = -\frac{q_e}{m_e c} \langle \mathbf{0}_{\vec{k},\lambda} | \sum_{\vec{h},\zeta} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3 \omega_h}} \left(a_{\vec{h},\zeta} e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}} + a_{\vec{h},\zeta}^\dagger e^{-i\vec{h}\cdot\vec{r}} \right) \boldsymbol{\varepsilon}_{\vec{h},\zeta} \cdot \vec{p} | \mathbf{1}_{\vec{k},\lambda} \rangle | i_e \rangle =$$

$$-\sum_{\vec{h},\zeta} \frac{q_e}{m_e} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3 \omega_h}} \langle f_e | \left(\langle \mathbf{0}_{\vec{k},\lambda} | a_{\vec{h},\zeta} | \mathbf{1}_{\vec{k},\lambda} \rangle \langle \mathbf{0}_{\vec{k},\lambda} | a_{\vec{h},\zeta}^\dagger | \mathbf{1}_{\vec{k},\lambda} \rangle e^{-i\vec{h}\cdot\vec{r}} \right) \boldsymbol{\varepsilon}_{\vec{h},\zeta} \cdot \vec{p} | i_e \rangle \quad (129)$$

En 129 el único término no nulo es:

$$V_{i,f} = -\frac{q_e}{m_e} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3 \omega_h}} \langle f_e | \left(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right) \boldsymbol{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda} \cdot \vec{p} | i_e \rangle \quad (130)$$

Luego, retornando a la representación en el Espacio de las coordenadas de $|i_e\rangle$ y $|f_e\rangle$ y del operador momentum, se obtiene la expresión 131:

$$\langle f_e | \left(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right) \boldsymbol{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda} \cdot \vec{p} | i_e \rangle = \int_V d^3\vec{r} \psi_f^*(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda} \cdot \left(-i\hbar \vec{\nabla} \psi_i(\vec{r}) \right) \quad (131)$$

Finalmente, el elemento de matriz es:

$$\langle f|V|i\rangle = -\frac{q_e}{m_e} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3 \omega_h}} \int_V d^3\vec{r} \psi_f^*(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda} \cdot \left(-i\hbar \vec{\nabla} \psi_i(\vec{r}) \right) \quad (132)$$

La función de onda final ψ_f es una onda plana¹⁵ con momentum $\vec{q} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ (en el volumen $V = L^3$). Por otro lado, la función de onda inicial ψ_i representa un estado ligado.

Téngase presente que la función de onda de un átomo hidrogenoide está dada por $\psi_i(\vec{r}) = \frac{e^{-|\vec{r}|/a}}{\sqrt{\pi a^3}}$, donde a es el *radio de Bohr* escaleado por el número atómico ($a = \frac{\hbar^2}{m_e q_e^2 Z}$).

Reemplazando las expresiones para las funciones de onda inicial y final, se obtiene:

$$\langle f|V|i\rangle = -\frac{q_e}{m_e} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3 \omega_h}} \frac{1}{\sqrt{L^3}} \int_V d^3\vec{r} e^{i(\vec{k}-\vec{q})\cdot\vec{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda} \cdot \left[-i\hbar \vec{\nabla} \left(\frac{e^{-|\vec{r}|/a}}{\sqrt{\pi a^3}} \right) \right] \quad (133)$$

Introduciendo $\Delta\vec{k} \equiv \vec{k} - \vec{q}$ y evaluando la integral $\int_V d^3\vec{r} e^{i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda} \cdot \vec{\nabla}(\psi_i)$ por partes, se tiene:

¹⁵Estado libre.

$$\int_V d^3\vec{r} e^{i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} \cdot \vec{\nabla}(\Psi_i) = e^{i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} \Psi_i|_{L^3} - i\Delta\vec{k} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} \int_V d^3\vec{r} e^{i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} \Psi_i(\vec{r}) \quad (134)$$

Nótese que la función de onda se desvanece en los límites, por lo que el primer término es cero. Además, en términos del ángulo θ entre $\Delta\vec{k}$ y \vec{r} puede re-escribirse la integral como indica 135:

$$\begin{aligned} -2\pi i \Delta\vec{k} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} \int dr r^2 \Psi_i(r) \int_0^\pi e^{i\Delta k r \cos(\theta)} \sin(\theta) d\theta = \\ -i \frac{\Delta\vec{k} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}}{|\Delta\vec{k}|} \int dr \Psi_i(r) r \sin(\Delta k r) \end{aligned} \quad (135)$$

Para evaluar esta última integral en 135, se puede extender el intervalo de integración hasta el infinito, bajo el supuesto de que $L \gg a$, obteniendo:

$$\langle f|V|i \rangle = -\frac{q_e}{m_e L^3} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k}} (-i\hbar) \left(-i \frac{\Delta\vec{k} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}}{|\Delta\vec{k}|}\right) \sqrt{\pi a^3} \int_0^\infty e^{-r/a} r \sin(\Delta k r) dr \quad (136)$$

Y, en 136 puede utilizarse $\int_0^\infty dr e^{-r/a} \sin(br) = \frac{2a^3 b}{(1+a^2 b^2)^2}$, para obtener finalmente:

$$\langle f|V|i \rangle = -\frac{2\pi\hbar q_e^2}{m_e L^3} \sqrt{\frac{2\hbar a^3}{\omega_k}} \frac{\Delta\vec{k} \cdot \vec{\epsilon} a^3}{(1+a^2(\Delta k)^2)^2} \quad (137)$$

Debe notarse que: $\Delta\vec{k} \cdot \vec{\epsilon}_k = \vec{k} \cdot \vec{\epsilon}_k - \vec{q} \cdot \vec{\epsilon}_k = -\vec{q} \cdot \vec{\epsilon}_k$ ya que el vector \vec{k} , y la polarización $\vec{\epsilon}$ son siempre perpendiculares. Considerando ahora la densidad de estados y el flujo *incidente* de fotones $\Phi_{inc} = c/L^3$, se obtiene la sección eficaz de dispersión fotoeléctrica σ_{fotoel} :

$$\frac{d\sigma_{fotoel}}{d\Omega} = \frac{32q_e^2 a^3 q (\vec{q} \cdot \vec{\epsilon}_k)^2}{m_e c \omega_k (1+a^2(\Delta k)^2)^4} \quad (138)$$

Cuando la energía del fotón *incidente* es mucho mayor que la energía de ligadura del electrón (E_b), se tiene $a\Delta k \gg 1$. En este límite, puede re-escribirse la sección eficaz de dispersión fotoeléctrica como muestra 139:

$$\frac{d\sigma_{fotoel}}{d\Omega} = \frac{32q_e^2 a^3 q (\vec{q} \cdot \vec{\epsilon}_k)^2}{m_e c \omega_k (a^2(\Delta k)^2)^4} \propto \frac{a^3}{a^8} = a^{-5} \quad (139)$$

Y, al incorporar la definición de $a \equiv \frac{\hbar^2}{m_e q_e^2 Z}$, se llega a la conocida dependencia de $\frac{d\sigma_{fotoel}}{d\Omega} \propto Z^5$

1.7.4.. Dispersión Thomson de electrones libres

Se considera la dispersión Thomson, la que está bien descrita por la dispersión por electrones libres. En este caso consideramos un sólo electrón.

También, en general, el fotón *incidente* debe tener una energía lo suficientemente alta como para que el electrón se vea como libre aunque en realidad forme parte de un átomo (así la energía del fotón *incidente* debe ser mayor que la energía de ionización E_{Ioniz} del átomo, $\hbar\omega \gg E_{Ioniz}$, o en otros términos: $\lambda \gg$ dimensiones del átomo). par Obsérvese que en la dispersión Thomson el electrón final sigue siendo un electrón ligado (dispersión elástica), mientras que en la dispersión Compton el electrón no está ligado (dispersión inelástica). Sin embargo, dado que la energía de ligadura es pequeña en comparación con el resto de energías en juego, el electrón puede considerarse como un electrón libre, y muchas de las características de la dispersión Compton siguen siendo válidas.

Los estados inicial y final, así como las energías y el momentum, sae muestran en la Tabla 1.7.4., las que resultan de la conservación de la energía y del momentum para un electrón relativista que inicialmente está en reposo.

	Inicial	Final
e^-	$ A_i\rangle$	$ A_f\rangle$
γ	$ \mathbf{1}_{k,\lambda}, \mathbf{0}_{k',\lambda'}\rangle$	$ \mathbf{0}_{k,\lambda}, \mathbf{1}_{k',\lambda'}\rangle$
Tot:	$ i\rangle$	$ f\rangle$
En:	$m_e c^2 + \hbar c k$	$\hbar c k' + \sqrt{p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4}$
p_x :	$\hbar k$	$\hbar k' \cos(\theta) + p_e \cos(\phi)$
p_y :	0	$\hbar k' \sin(\theta) - p_e \sin(\phi)$

Calculando el cociente k/k' y la diferencia $\Delta\lambda = \lambda - \lambda'$ puede obtenerse la *fórmula de Compton* en base a la figura 7 como sigue:

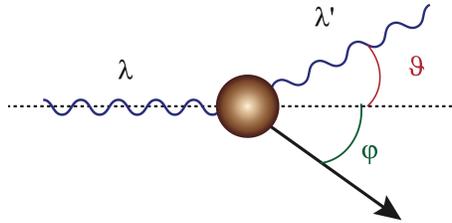


Figura 7. Esquema de colisión fotón/electrón para la dispersión Compton y Thompson.

$$\begin{aligned}
 E_\gamma + E_e &= E'_\gamma + E'_e \longrightarrow \hbar\omega' + \sqrt{|p_e|^2 c^2 + m_e^2 c^4} \\
 \hbar\vec{k} &= \hbar\vec{k}' + \vec{p}_e \longrightarrow \begin{aligned} \hbar k &= \hbar k' \cos(\theta) + p_e \cos(\phi) \\ \hbar k' \sin(\theta) &= p_e \sin(\phi) \end{aligned}
 \end{aligned} \tag{140}$$

De 140 se obtiene: $p^2 = \frac{\hbar(\omega - \omega')}{c^2} [\hbar(\omega - \omega') - 2m_e c^2]$ y $\cos(\theta) = \sqrt{1 - \hbar^2 k'^2 \sin^2(\theta) / p^2}$, de donde puede resolverse para la variación de la longitud de onda ($\lambda = \frac{2\pi}{k}$) considerando $\omega = kc$:

$$\Delta\lambda = \frac{2\pi\hbar}{m_e c} (1 - \cos(\theta)) \quad (141)$$

O, equivalentemente, para la frecuencia:

$$\hbar\omega' = \hbar\omega \left[1 + \frac{\hbar\omega}{m_e c^2} (1 - \cos(\theta)) \right]^{-1} \quad (142)$$

Para este régimen de altas energías, $K_1^{(2)} \ll K_2^{(1)}$, por lo que alcanza con considerar la contribución de $K_2^{(1)}$, que ya se calculó en secciones precedentes.

La tasa de dispersión W y la sección eficaz pueden calcularse por medio de la *densidad de estados (finales)*:

$$\rho(E_f) dE_f = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 k'^2 dk' d\Omega \quad (143)$$

En 143, la energía final $E_f = \hbar ck' + \sqrt{p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4} \approx \hbar ck' + \frac{p_e^2}{2m_e}$ (aproximación no relativista). Entonces, se calcula $\frac{dE_f}{dk'}$, notando que: $p^2 / \hbar^2 = |k - k'|^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos(\theta)$:

$$\frac{dE_f}{dk'} = \hbar c + \frac{\hbar}{2m_e} (2k' - 2k \cos(\theta)) = \hbar c \left[1 + \frac{\hbar k}{m_e c} \left(\frac{k'}{k} - \cos(\theta) \right) \right] \quad (144)$$

Resolviendo las ecuaciones de conservación de la energía y del momentum, se obtiene:

$$\frac{k'}{k} = \frac{1}{\left[1 + \frac{\hbar k}{m_e c} (1 - \cos(\theta)) \right]} \quad (145)$$

Como $\hbar k \ll m_e c$, se puede tomar en cuenta, como primera aproximación, sólo el término de primer orden en $1 + \frac{\hbar k}{m_e c} \left(\frac{k'}{k} - \cos(\theta) \right)$, dado por: $1 + \frac{\hbar k}{m_e c} (1 - \cos(\theta))$, lo que coincide con el cociente k'/k . Entonces:

$$\frac{dE_f}{dk'} = \hbar c \frac{k}{k'} \longrightarrow \rho(E_f) = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{k'^3}{\hbar c k} d\Omega \quad (146)$$

Por último, se calcula la sección eficaz utilizando el flujo incidente $\Phi_{inc} = \frac{c}{L^3}$:

$$\frac{d\sigma_{Th}}{d\Omega} = \frac{W_{i,f}^{Th}/d\Omega}{c/L^3} = \frac{2\pi}{\hbar} |K_2^{(1)}|^2 \frac{\rho(E_f) L^3}{d\Omega} \frac{1}{c} = \left(\frac{q_e^2}{m_e c^2} \right)^2 \left(\frac{k'}{k} \right)^2 |\epsilon_{k,\lambda} \cdot \epsilon_{k',\lambda'}|^2 \quad (147)$$

Para resolver 147 se emplea la Figura 8, y se obtiene:

$$\frac{d\sigma_{Th}}{d\Omega} = r_e^2 \left(\frac{\omega'_k}{\omega_k} \right)^2 \sin^2(\gamma) \quad (148)$$

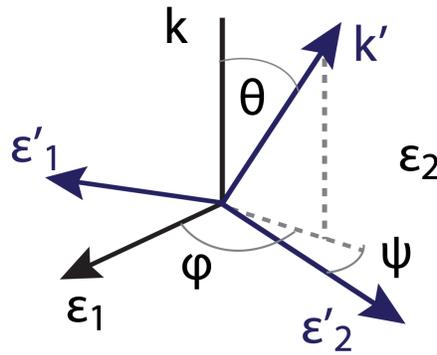


Figura 8. Esquema de vectores de onda y polarizaciones de fotones dispersos. $\cos(\gamma) = \sin(\theta) \sin(\psi)$

donde $\sin^2(\gamma) = 1 - \sin^2(\theta) \cos^2(\gamma - \psi)$. La sección eficaz diferencial media (promediada en la dirección de polarización ψ) viene dada entonces por:

$$\left\langle \frac{d\sigma_{Th}}{d\Omega} \right\rangle = r_e^2 \left(\frac{\omega'_k}{\omega_k} \right)^2 \langle \sin^2(\gamma) \rangle = r_e^2 \left(\frac{\omega'_k}{\omega_k} \right)^2 (1 - \sin^2(\theta)/2) = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{\omega'_k}{\omega_k} \right)^2 (1 + \cos^2(\theta)) \quad (149)$$

MÓDULO II

Radiofísica

2.. Módulo II: Radiofísica

El *Capítulo 2.* presenta consecuencias empíricamente verificables de los procesos de interacción de la radiación ionizante con los medios materiales. Se describen los efectos en los materiales a partir de las excitaciones y, principalmente, ionizaciones generadas por la radiación incidente. Asimismo, se presentan argumentos relativos a la estimación del lapso de duración de los procesos primordiales, y las escalas temporales involucradas, para finalizar introduciendo el concepto de *generación de especies químicas* por acción de la radiación ionizante, temática central para capítulos posteriores.

2.1.. Efectos de la radiación ionizante sobre medios materiales

De acuerdo con los procesos de interacción entre la radiación ionizante incidente y los medios materiales (véase Capítulo 1.) cuando la partículas proyectiles interactúan, se *frenan y/(o desvían* al intercambiar energía/momentum con los centros dispersores (átomos/moléculas del medio material), y como resultado eventualmente, se emiten ondas electromagnéticas, u otro tipo de radiación en las transiciones de des-excitación. El proceso de emisión de radiación electromagnética, para el caso de partículas cargadas como proyectiles, a nivel de escala atómica (elemental) se produce con mayor probabilidad en las proximidades del núcleo como consecuencia de pequeñas "desviaciones" de la partícula cargada incidente.

Por supuesto, las partículas proyectiles pueden también sufrir colisiones con los núcleos atómicos, produciendo reacciones nucleares, pero estos procesos son, comparativamente, menos improbables en el rango de energías de las aplicaciones típicas en biomedicina.

2.1.1.. Proceso de ionización

Si en los choques de la partícula proyectil con los electrones atómicos, la energía transferida es superior a la energía de ligadura/enlace del electrón que interviene en la colisión (E_b), el electrón emerge del centro dispersor (átomo/molécula) y en consecuencia se crea un ión positivo. De este modo, se producen cantidades de *pares ión-electrón* principalmente a lo largo de la trayectoria de la partícula proyectil. Cabe destacar que, en condiciones normales (sin intervención externa), estos pares tienden a la *recombinación*, hasta alcanzar alcanzando asintótica y paulatinamente la neutralidad eléctrica del medio absorbente/dispersante.

Este tipo de ionizaciones originado por la transferencia de la energía de las partículas proyectiles a los electrones atómicos se denomina *ionización primaria*. Existe también otro tipo de ionización, generada por las partículas secundarias (principalmente electrones) que se han producido en la ionización primaria. Estas partículas secundarias deben contar con energía cinética suficiente para poder producir por si mismas nuevas ionizaciones en el medio, dando lugar al fenómeno denominado ionización secundaria. La ionización total del medio material $I_{ionzTot}$, producida por una partícula proyectil¹⁶ durante su paso a través del medio material, se obtiene como la cantidad de pares iónicos (ión-electrón) producida, tanto

¹⁶Cantidad típicamente empleada para partículas cargadas, aunque puede extenderse a no cargadas.

por por ionización primaria como secundaria a lo largo de toda la trayectoria del *shower* (cascada). Por lo tanto, la expresión 150 permite estimar $Ioniz_{Tot}$ en términos de la energía cinética inicial de la partícula E_i y de la energía (trabajo) medio necesaria para producir un par iónico en el medio material W_{ion} :

$$Ioniz_{Tot} = \frac{E_i}{W_{Ion}} \quad (150)$$

En la expresión 150 se presupone la conservación de energía y que el total de energía disponible inicialmente es preservado al interior del medio material en el estado final¹⁷

A modo de ejemplo, para el caso del aire se tiene $W_{Ion}^{Air} = 33,97$ eV/par en condiciones termodinámicas normales. La *ionización específica* $Ioniz_{esp}$ se refiere al número de pares iónicos producidos por la partícula incidente, por unidad de recorrido en el medio material s . Por lo tanto, la ionización específica varía a lo largo del recorrido de la partícula proyectil.

2.1.2.. Proceso de excitación

Existen fenómenos de interacción en los que durante en la colisión de la partícula incidente con un electrón orbital (atómico), la energía transferida (ΔE) resulta insuficiente para producir ionización ($\Delta E < E_b$), el electrón orbital con el que se interactuó no finaliza en un estado libre, sino que continúa estando ligado al centro dispersor (átomo/molécula), pero sí resulta suficiente la energía transferida ΔE para que el electrón interviniente en la interacción sea *promovido* a un estado excitado (a veces representado esquemáticamente como una transición a una órbita de mayor energía).

De acuerdo con los procesos de des-excitación, se induce una transición en la que el electrón excitado retorna¹⁸ al nivel de partida, involucrando la emisión de radiación electromagnética para la conservación de la energía. Este tipo de transiciones se denominan *transiciones radiativas*. Cabe indicar que existen otros mecanismos de des-excitación, por ejemplo, por degradaciones transfiriendo energía térmica (calor) al medio material circundante.

2.1.3.. Proceso de disociación

Cuando la energía cedida a una molécula por parte de una partícula proyectil alcanza cierto valor crítico, puede producirse el fenómeno de *disociación o radiólisis*. Este proceso consiste en la ruptura de enlaces químicos moleculares produciendo transformaciones químicas en el medio material irradiado.

Los efectos más relevantes e intensos de la radiólisis se presentan para moléculas con uniones covalentes, debido a que su disociación origina la formación de radicales libres. El proceso puede ser esquematizado por medio del ejemplo canónico del agua, como muestra la Figura 9.

¹⁷Dicho supuesto aproxima muy bien cuando se trata de partículas cargadas como proyectiles.

¹⁸En un tiempo muy corto.



Figura 9. Esquema representando los electrones más externos por puntos de la radiólisis de la molécula.

Durante la radiólisis se forman restos moleculares y atómicos caracterizados por la presencia de un electrón desapareado, los que son precisamente los *radicales libres*, y que poseen una gran reactividad química. Los radicales libres formados pueden reaccionar entre sí o con otras moléculas. Un ejemplo típico para el agua se muestra en la expresión 151.



La expresión 151 muestra que en este caso, debido a la irradiación, se induce la formación de hidrógeno gaseoso (H_2) y de agua oxigenada H_2O_2 .

A modo general, los procesos químicos inducidos por la radiólisis de la materia, conducen a reacciones de descomposición, procesos de oxidación, como los que se presentan para las sales ferrosas disueltas en agua¹⁹, reducciones como las que ocurren en haluros de plata²⁰, o polimerizaciones²¹ como las experimentadas por el etileno o el acetileno.

2.2.. Procesos radiofísicos y escala temporal

2.3.. Producción de especies por parte de la radiación ionizante

¹⁹Soluciones de Fricke, por ejemplo.

²⁰Dosímetros de film, por ejemplo.

²¹Dosímetros de gel polimérico, por ejemplo.

TRABAJO PRÁCTICO I

Aplicaciones de Radiofísica

3.. Estimación del stopping power

El *Capítulo 3*. propone el Práctico I, dedicado a abordar actividades prácticas empleando los conceptos teóricos y fundamentos desarrollados en el primer bloque del curso, constituido por los *Capítulos 1. y 2.*.

A modo de ejemplo de aplicación práctica, se propone estudiar el comportamiento del *stopping power* para diferentes energías de haces de electrones y de protones dentro de rangos de aplicaciones terapéuticas²², para lo cual se propone un abordaje teórico-práctico integrando fundamentos analíticos y métodos de modelamiento.

3.1.. Stopping power de dosímetros poliméricos con nanopartículas de alto número atómico

Uno de los sistemas de dosimetría con geles más relevantes es el grupo basado en polímeros (*Polymer Gel Dosimeter - PGD*), de los cuales se dispone de extensa literatura, como por ejemplo [1] para una revisión compacta. Trabajos recientes, como [2–4] demuestran que la infusión de agentes como nanopartículas de alto número atómico en los PGD permite capacidades teranósticas, a la vez que modifica la respuesta radiosensible.

3.2.. Objetivos del Trabajo Práctico I

El objetivo general es aplicar los fundamentos teóricos desarrollados en los *Capítulos 1. y 2.*, junto a herramientas computacionales para describir el comportamiento del *Stopping Power* de un sistema de dosimetría por gel polimérico (PGD) infundido con nanopartículas de alto número atómico²³ tanto para electrones como protones de rango energético de aplicaciones radioterapéuticas.

Los objetivos específicos son:

1. Estimar el *Stopping Power* de un sistema de PGD infundido al 1% en masa con nanopartículas de oro, para electrones de: 0.1, 1 y 10 MeV y protones de: 1, 10 y 100 MeV/n utilizando herramientas computacionales: PENELOPE para electrones y FLUKA para protones.
2. Para el caso de electrones, estimar el *Stopping power* a las diferentes energías empleando un abordaje teórico. A modo de ejemplo, el trabajo de H. Osman / H. Gümüs titulado *Stopping power and CSDA range calculations of electrons and positrons over the 20 eV-1 GeV energy range in some water equivalent polymer gel dosimeters* en *Appl. Rad. Isot.* (2022) representa una potencial opción.
3. Para el caso de electrones, realizar adaptaciones en PENELOPE para estimar el trayecto efectivamente recorrido por las partículas primarias en la muestra y la energía perdida para obtener las estimaciones correspondientes del *Stopping power*.

²²0.1-25 MeV para electrones y 1-250 MeV/n para protones, aproximadamente.

²³Sistema que presenta promisorias características y capacidades para aplicaciones teranósticas.

Referencias

- [1] M. Macchione, L. S. Lechón Páez, M.C., Strumia, M. Valente, F. Mattea. Chemical Overview of Gel Dosimetry Systems: A Comprehensive Review. *Gels* 0, 663, 2022.
- [2] A. Gayol, F. Malano, C. Ribo MOPntenovo, P. Pérez, M. Valente. Dosimetry Effects Due to the Presence of Fe Nanoparticles for Potential Combination of Hyperthermic Cancer Treatment with MRI-Based Image-Guided Radiotherapy. *International Journal of Molecular Science* 24(1), 514, 2023.
- [3] M. Macchione, L. S. Lechón Páez, M.C., Strumia, M. Valente, F. Mattea. Chemical Overview of Gel Dosimetry Systems: A Comprehensive Review. *Gels* 0, 663, 2022.
- [4] M. Santibáñez, R. Saavedra, J. Vedelago, F. Malano, M. Valente, M. Optimized EDXRF system for simultaneous detection of gold and silver nanoparticles in tumor phantom. *Radiation Physics and Chemistry* 165, 108415, 2019.
- [5] I. Bankman. *Handbook of medical image processing and analysis*. Elsevier Academic Press, California, 2009.
- [6] Seibert A. Leidholt E. Boone J. Bushberg, J. *The essential physics of medical imaging*. Lippincot Williams and Wilkins, 2001.
- [7] T. Buzug. *Computed Tomography*. Springer-Verlag, 2008.
- [8] P. Suetens. *Fundamentals of Medical Imaging*. Cambridge University Press, second edition, 2009.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] R. Figueroa and M. Valente. physical characterization of single convergent beam device for teletherapy: Theoretical and Monte Carlo approach. *Physics in Medicine and Biology* 60:7191–7206, 2015.
- [12] G. Tiraio, C. Quintana, and M. Valente. Mammography image quality optimisation: a monte carlo study. *Int. J. Low Radiation*, 7(4):276–297, 2010.
- [13] C. Epstein. *Introduction to the mathematics of medical imaging*. Siam, Philadelphia, 2003.
- [14] G. Saha. *Physics and radiobiology of nuclear medicine*. Springer-Verlag, 2006.
- [15] 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.

- [16] F.H. Attix. *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*. Wiley-VCH, 1987.
- [17] S Dupree and S. Fraley. *A Monte Carlo premier*. Kluwer-Plenum, New York., 2002.
- [18] P. Bevington and D. Keith Robinson. *Data reduction and error analysis*. McGraw Hill, 2003.
- [19] H. Tijms. *Understanding Probability: Chance Rules in Everyday Life*. Cambridge University Press, 2004.
- [20] M. Ljungberg, S. Strand, and M. King, editors. *Monte Carlo calculations in nuclear medicine: Applications in diagnostic imaging*. Institute of Physics Publishing, 1998.
- [21] 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.
- [22] 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.
- [23] A. Kak and M. Slaney. *Principles of Computerized Tomographic Imaging*. IEEE Press, New York, 2001.
- [24] S. Bushong. *Computed Tomography*. McGraw-Hill, 2000.
- [25] M. Stabin. *Fundamentals of nuclear medicine dosimetry*. Springer Science+Business Media, Spring Street, New York, NY 10013, USA, 2008.
- [26] A. Ferrari et al. *Fluka: a multi-particle transport code v. 2011.1.2* ORGANISATION EUROPÉENNE POUR LA RECHERCHE NUCLÉAIRE CERN, 2012.