

---

# EL MÉTODO MONTE CARLO EN LA FÍSICA MÉDICA

## Un curso introductorio

---

**Prof. Mauro Valente, PhD.**

IFEG-CONICET, FaMAF-UNC, CFIM-UFRO, Dpto. Cs. Físicas UFRO



**UNIVERSIDAD  
DE LA FRONTERA**

**Departamento de Ciencias Físicas, Universidad de la Frontera**

Copyright ©2018 texto no publicado, derechos reservados al autor.

Publicado por XXX, Temuco, Chile.

Cualquier parte de esta publicación puede ser reproducida o transmitida en cualquier forma.  
Se aceptan modificaciones y sugerencias de todo tipo

Para contactarse con los autores escribir a: [mauro.valente@gmail.com](mailto:mauro.valente@gmail.com)

Se puede encontrar más información en: [www.liifamirx.famaf.unc.edu.ar](http://www.liifamirx.famaf.unc.edu.ar)

***Libro base y Apuntes para curso de pre-grado y post-grado:***

El método Monte Carlo en la Física Médica / M. Valente 2018

Incluye referencias bibliográficas e índice.

ISBN (no publicado)

Departamento de Ciencias Físicas.

Universidad de la Frontera.

10 9 8 7 6 5 4 3 2 1

*El presente libro es material de estudio para los alumnos de pre- y post- grado de la Universidad de la Frontera que toman el curso “El Método Monte Carlo en la Física Médica”. Está dedicado a ellos, a fin de facilitarles el acceso a herramientas de estudio y profundización de conceptos.*



# Índice general

---

<b>1</b>	<b>Introducción al transporte de radiación</b>	<b>1</b>
1.1.	Transporte de radiación e interacciones	1
1.2.	Estado de fase en transporte de radiación	3
1.3.	Bases para el cálculo de observables a partir de la ecuación de transporte de radiación	4
1.3.1.	Densidad de fluencia energética	4
1.4.	Modelos de interacción de partículas con la materia a partir de la ecuación de transporte de Boltzmann	5
1.4.1.	Pérdidas energéticas en interacciones de partículas cargadas	5
1.4.2.	Efectos angulares por interacciones de partículas cargadas	6
1.4.3.	Determinación de distancias de interacción	6
1.5.	Aproximaciones para el transporte de fotones en medios materiales	7
<b>2</b>	<b>Interacción de la radiación ionizante con medios materiales</b>	<b>9</b>
2.1.	Introducción a la estructura atómica	9
2.1.1.	Clasificación de las radiaciones ionizantes	10
2.1.2.	Estructura atómica	10
2.1.3.	Descripción de la interacción entre radiación incidente y un átomo en reposo	12
2.2.	Sección eficaz: Introducción	15
		v

2.3.	Conceptos básicos sobre interacción de fotones con la materia	16
2.3.1.	Efecto Fotoeléctrico	16
2.3.2.	Scattering coherente o Rayleigh	18
2.3.3.	Scattering incoherente o Compton	21
2.3.4.	Producción de pares electrón-positrón	25
2.3.5.	Reacciones fotonucleares	26
2.3.6.	Coefficiente de atenuación: Introducción	26
2.3.7.	Coefficiente de atenuación másico para compuestos	27
2.4.	Introducción a la interacción de las partículas cargadas con la materia	28
2.4.1.	Scattering elástico de electrones y positrones	28
2.4.2.	Scattering inelástico de electrones y positrones	29
2.4.3.	Scattering inelástico de iones positivos “vestidos”	32
2.4.4.	Aniquilación $e^+e^-$	35
2.4.5.	Scattering elástico múltiple de electrones y positrones	35
2.4.6.	Scattering inelástico múltiple de electrones y positrones	37
2.5.	Radiación fluorescente: rayos X característicos y electrones Auger	46
2.5.1.	Electrones Auger	47
2.6.	Interacción de los neutrones con la materia: Conceptos básicos	49
2.6.1.	Scattering elástico de $n^0$	49
2.6.2.	Scattering inelástico, reacciones nucleares y captura radiativa de $n^0$	51

# CAPÍTULO 1

---

## INTRODUCCIÓN AL TRANSPORTE DE RADIACIÓN

---

En este primer capítulo se desarrollará un breve resumen dedicado a presentar los fundamentos básicos y el formalismo necesario para contar con un primer acercamiento a las teorías del transporte de radiación. Los modelos que describen los procesos de transporte y colisión de partículas se encuentran fundamentados en las llamadas *teorías del transporte*, entre las cuales el formalismo de Boltzmann es el más aceptado y utilizado para explicar y entender los diferentes fenómenos. No es objetivo de este texto desarrollar en detalle el formalismo utilizado en la física de partículas e especializada, sino sólo presentar el modelado matemático necesario para la comprensión de los procesos físicos involucrados en las aplicaciones más sencillas de la física médica. Se presenta así, una introducción al transporte de radiación y sus diferentes tipos de interacción con la materia, se introduce la ecuación de transporte de Boltzmann y los modelos de interacción de diferentes tipos de partículas. Finalmente, se expone una aproximación al caso de los fotones, los que concentran mayor atención en aplicaciones prácticas.

### 1.1. Transporte de radiación e interacciones

En términos generales, la ecuación de transporte de Boltzmann es la representación de la distribución estadística de partículas en un entorno fuera del equilibrio. Se aplica al estudiar de varios fenómenos físicos como flujo de calor o carga eléctrica en medios materiales pudiendo determinar cantidades como conductividades térmica y eléctrica.

Como primer paso se hace referencia al transporte de fotones, lo que luego puede generalizarse por medio de desarrollos análogos que incluyan propiedades específicas del tipo de radiación de interés.

La transferencia, absorción y dispersión de energía por parte de la radiación hacia un medio material se determinan por medio de la ecuación de transporte de Boltzmann y modelos específicos de interacción. Existen diferentes expresiones y aproximaciones para la ecuación de transporte de Boltzmann, pudiendo describirse análogamente tanto en forma diferencial como integral.

El objetivo es determinar el flujo total de radiación  $\Phi_T$  o bien la radiancia  $R$  de partículas emitida por una fuente y transportada en un determinado medio material. Bajo ciertas aproximaciones, las cantidades escalares  $\Phi_T$  y  $R$  satisfacen:

$$R(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{d^2\Phi_T}{dA d\Omega \cos\theta} \approx \frac{\Phi_T}{A \Omega \cos\theta} \quad (1.1)$$

donde  $\vec{r}$  y  $\vec{\Omega}$  son los vectores posición y dirección de movimiento de la partícula que atraviesa el área  $A$  formando un ángulo  $\theta$  con el versor normal a la superficie de  $A$ .

Desde un punto de vista matemático, la ecuación de transporte de radiación de Boltzmann es expresada como una ecuación difusiva integro-diferencial, cuya formulación clásica para observables caracterizados por función de distribución  $\Theta$  dependientes de la posición  $\vec{r}$  es:

$$\frac{\partial\Theta}{\partial t}\Big|_{\text{int}} - \frac{\partial\Theta}{\partial t} = \frac{\partial\Theta}{\partial r} \frac{\vec{p}}{m} + \frac{\partial\Theta}{\partial \vec{p}} \cdot \vec{V} \quad (1.2)$$

donde  $\vec{p}$  y  $m$  son momento y la masa de la partícula,  $t$  indica el tiempo,  $\vec{V}$  es el campo de fuerzas y el subíndice int hace referencia al modelo específico de interacción/colisión entre las partículas del sistema.

En este sentido, hay diferentes modos de interacción entre el flujo de partículas y el medio material. A este propósito, es útil introducir la probabilidad de ocurrencia de una cierta interacción  $i$ , definida físicamente por la sección eficaz  $\sigma_i$ , referida al  $i$ -ésimo mecanismo de interacción. Por tanto, la probabilidad total  $\sigma_T$  de ocurrencia de una interacción, de cualquier tipo, se obtiene por medio de la suma de todas las contribuciones por parte de cada uno de los procesos de interacción. A nivel macroscópico, la sección eficaz total macroscópica  $\Sigma_T$  se define mediante:

$$\Sigma_T \equiv N\sigma_T \quad (1.3)$$

donde  $N$  es la densidad de centros dispersores por unidad de volumen, por lo que la unidad de  $N$  resulta de la forma  $cm^{-3}$ .

Los procesos de interacción incluyen absorción y dispersión (o *scattering*), por lo que:

$$\Sigma_T = \Sigma_{abs} + \Sigma_{sca} \quad (1.4)$$

donde  $\Sigma_{abs}$  y  $\Sigma_{sca}$  representan las componentes de absorción y *scattering* respectivamente.

La distribución de la cantidad de colisiones  $n$  a lo largo de la trayectoria recorrida (*path*) así como la distanciamedia entre colisiones sucesivas  $\lambda$  se obtienen de:

$$\frac{dn}{ds} = -\Sigma n \Rightarrow n(s) = n(0)e^{-\Sigma s} \Rightarrow \lambda \equiv \frac{\int_0^\infty s e^{-\Sigma s} ds}{\int_0^\infty e^{-\Sigma s} ds} = \frac{1}{\Sigma_T} \quad (1.5)$$

La distancia media entre colisiones sucesivas obtenida a partir de esta distribución  $\lambda$  es el camino libre medio o *mean free path* (mpf) y queda determinado por medio de la sección eficaz total.

## 1.2. Estado de fase en transporte de radiación

Una partícula de momento  $p$  con longitud de onda  $\hbar/p$  transportada en un medio material de espesor  $x$  tal que  $x \ll \hbar/p$  estará completamente determinada (en su espacio de fase) por la posición  $\vec{r}$ , la dirección de movimiento  $\vec{\Omega}$ , la energía  $E$  y el tiempo  $t$ .

Sea  $N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$  la densidad angular de partículas en estados de fase  $[(x, y, z); (\theta, \phi); E; t]$ , que representa la densidad de partículas en el volumen  $d\vec{r}$  alrededor de  $\vec{r}$ , viajando en direcciones  $d\vec{\Omega}$  entorno a  $\vec{\Omega}$  con energía  $E$  a tiempo  $t$ .

El flujo vectorial angular de partículas  $\vec{\Psi}$  puede obtenerse a partir de la densidad angular y la velocidad  $\vec{v}$  de las partículas:

$$\vec{\Psi} = \vec{v}N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \quad (1.6)$$

El flujo angular escalar (o simplemente flujo angular)  $\Psi$  se obtiene a partir de la expresión 1.6, y sus unidades son  $cm^{-2} s^{-1} str^{-1}$ . Integrando el flujo angular  $\Psi$  en todas direcciones para valores dados de  $E$ ,  $\vec{r}$  y  $t$  se obtiene una cantidad proporcional a la tasa de población-ocupación del estado  $(\vec{r}, R, t)$ , a veces denominado tasa de “reacción” o “creación”. A partir de esto, puede determinarse el flujo escalar (o simplemente flujo)  $\Phi_T$  dado por:

$$\Phi_T \equiv \int_{4\pi} \Psi d\Omega \quad (1.7)$$

La tasa de ocurrencia de eventos (por unidad de volumen), en términos de la probabilidad de cada  $j$ -ésimo tipo de interacción  $\Lambda$  queda determinada por:

$$\Lambda \equiv \sum_j \Phi_T \quad (1.8)$$

La fluencia angular se obtiene a partir de la integral en el tiempo del flujo, y representa el número total de partículas por unidad de área por unidad de energía atravesando el punto  $\vec{r}$  con dirección  $d\Omega$  entorno a  $\Omega$ .

Así mismo, puede calcularse la fluencia escalar (o fluencia total)  $J(\vec{r}, E, t)$  que resulta de integrar la fluencia angular para todas las direcciones posibles:

$$J = |J(\vec{r}, E, t)| = \int_{4\pi} \vec{v}N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)d\vec{\Omega} \cdot \hat{n} \quad (1.9)$$

donde  $|\vec{J}|$  es la corriente de partículas y  $\hat{n}$  representa un versor en dirección arbitraria para el cálculo de la fluencia escalar  $J$ .

A partir de esto, puede plantearse la ecuación de transporte de radiación de Boltzmann, dada por:

$$\frac{1}{\vec{v}} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Psi - S = \int \int_{4\pi} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) K(\vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) dE' d\vec{\Omega}' \quad (1.10)$$

donde  $S$  es la fuente de radiación y  $K(\vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E)$  es el operador del kernel que cambia el estado de fase de las “coordenadas” primadas  $(\vec{\Omega}', E')$  a las sin primar  $(\vec{\Omega}, E)$  debido a los procesos de *scattering* en la posición  $\vec{r}$ .

### 1.3. Bases para el cálculo de observables a partir de la ecuación de transporte de radiación

Para un sistema estacionario *steady state* puede aplicarse el teorema de Liouville<sup>1</sup> en una aproximación clásica<sup>2</sup> para mostrar que un sistema de partículas evoluciona según la mecánica clásica cuya densidad de estados se representa en un espacio de las fases constante  $\mathcal{R}^3\wp^3$ , donde  $\mathcal{R}$  y  $\wp$  refieren a los espacios de posición  $\vec{r}$  y de momento  $\vec{p}$ , respectivamente.

En estado de equilibrio térmico la probabilidad de ocurrencia de un estado se determina por medio de la estadística de Fermi-Dirac para la cual la función de distribución del sistema homogéneo depende únicamente de la energía  $E$ .

La expresión 1.2 de la ecuación de Boltzmann puede simplificarse para situaciones en que el término de interacciones  $\frac{\partial\Theta}{\partial t}|_{\text{int}}$  sea proporcional a la diferencia entre la función de distribución  $\Theta$  en presencia de efectos externos  $\vec{V}$  y la función de distribución en equilibrio térmico. Esta condición es equivalente a asumir que una vez cesen los efectos externos, el sistema retorna al equilibrio, debido a las interacciones, con velocidad determinada (proporcional específicamente) por la desviación inicial respecto de la condición de equilibrio. Como se mencionó, a partir de estas consideraciones puede calcularse cantidades como tiempo de relajación (inclusive pesado por energía de sistema), conductividad térmica/eléctrica y difusividad, entre otros.

#### 1.3.1. Densidad de fluencia energética

Como ejemplo de la aplicación del formalismo para el estudio de observables, se considera el caso de la energía  $E$ , que es típicamente la cantidad más importante a fines dosimétricos ya que determina la dosis absorbida.

Sea  $\bar{E}$  el valor de expectación de la energía  $E$ , sin considerar la componente de energía en reposo, portada por todos los quanta que constituyen el haz  $N_q$ . La fluencia energética  $\Psi$  se define por:

$$\Psi \equiv \frac{d\bar{E}}{dA} \quad (1.11)$$

Entonces, para un haz monocromático se tiene  $\bar{E} = E_0 N_q$ , como se espera. Y, por tanto,  $\Psi = E_0 \Phi$ .

Para el estudio de la evolución de sistemas debido a perturbaciones externas, es conveniente considerar el tiempo  $t_0$  en ausencia de fluencia energética  $\Psi(t_0) = 0$  y el tiempo  $t_{max}$  que se corresponde con el máximo de fluencia energética  $\Psi(t_{max}) = \Psi_{max}$ .

La tasa de fluencia energética  $\Upsilon$  puede calcularse para cualquier tiempo  $t$  en el intervalo  $(t_0, t_{max})$ , y se calcula a partir de:

$$\Upsilon = \frac{d\Psi}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{d\bar{E}}{dA} \right) \implies \Psi(t_0, t) = \int_{t_0}^t \Upsilon(t') dt' \quad (1.12)$$

Por tanto, manteniendo constante la tasa de fluencia energética  $\Psi(t_0, t) = \Upsilon(t - t_0)$  resulta que la tasa de fluencia energética, también denominada densidad de flujo energético,  $\Upsilon$  es proporcional a la densidad de flujo  $\Phi$  si el haz es monocromático  $\Upsilon = E_0 \Phi$ .

De modo que para determinar observables, experimentalmente, por medio de mediciones a tiempo  $t$  en la posición  $\vec{r}$ , en términos de la energía  $E$  dirección de movimiento  $\Omega$  dado por los ángulos polar

<sup>1</sup>Aplicado a sistemas conservativos.

<sup>2</sup>Válido también para mecánica Hamiltoniana.

y azimutal  $(\theta, \phi)$ , resulta que la densidad de flujo diferencial es  $\Upsilon(E, \theta, \phi)$  y la densidad de flujo se obtiene de:

$$\Upsilon = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^E \Upsilon(E', \theta', \phi') \sin \theta' d\theta' d\phi' dE' \quad (1.13)$$

En unidades de inversa de área y tiempo,  $cm^{-2} s^{-1}$ , típicamente.

#### 1.4. Modelos de interacción de partículas con la materia a partir de la ecuación de transporte de Boltzmann

Esta sección presenta, de modo extremadamente escueto, los resultados principales para los fenómenos de interacción debido al paso de partículas por un medio material.

Cada uno de los modelos se obtiene de la aplicación de la ecuación de transporte, sujeto a las consideraciones necesarias en cada caso<sup>3</sup>. En particular, para cada tipo de radiación y material con el que se interactúa, el problema consiste en describir las propiedades de la fuente de radiación (el término  $S$  en la expresión 1.10) e introducir los modelos físicos que determinan el operador *kernel*  $K(\vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E)$  a partir de las funciones de distribución de probabilidades asociadas a cada tipo de proceso de interacción posible. Para el caso de radiación primaria, el término  $S$  representa completamente la fuente, mientras que para la radiación secundaria, scattering en general, la producción misma de partículas debido a las interacciones de radiación primaria.

Como resultado de las interacciones de partículas cargadas de velocidad  $v = \beta c$  se producen pérdidas energéticas en cada colisión  $\Delta E$ , y correspondiente pérdida de energía por unidad de camino  $\frac{dE}{ds}$  recorrido, donde  $s$  es la dirección a lo largo del track.

Una vez se establecen los modelos de interacción, se determinan las funciones de distribución de probabilidades que dan cuenta de las características estadísticas de los procesos físicos, que quedan determinados por las secciones eficaces  $\sigma$ .

A partir de las expresiones 1.5 y 1.10 puede calcularse el número medio de colisiones con pérdida energética entre  $E_{loss}$  y  $E_{loss} + \Delta E_{loss}$  al recorrer la distancia  $\delta s$ :

$$\frac{dE}{ds} = \rho_e \delta s \frac{d\sigma}{dE} dE \quad (1.14)$$

donde  $\rho_e$  es la densidad electrónica.

La determinación del operador *kernel*  $K(\vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E)$  requiere del conocimiento de los mecanismos por los cuales se produce en cambio de energía y las deflexiones angulares.

##### 1.4.1. Pérdidas energéticas en interacciones de partículas cargadas

Cuando las interacciones ocurren con los electrones orbitales de los átomos blanco, se producen en general ionizaciones, excitación atómica o bien excitación colectiva. En medios absorbentes delgados las colisiones que se producen presentan varianzas grandes.

Para partículas cargadas pesadas (de carga  $Z_p$  y masa molar  $M_p$ ) interactuando con un material homogéneo constituido por átomos de número atómico  $Z_A$  y masa molar  $M_A$ , la pérdida de energía

<sup>3</sup>Las derivaciones específicas respecto de la ecuación de transporte no se presentan por encontrarse fuera del alcance de este texto.

por colisiones pueden obtenerse a partir de la teoría de Bethe-Bloch, que permite determinar el *stopping power* a lo largo del *track* ( $\frac{dE}{dy}$ ):

$$\frac{dE}{dy} = 4r_e^2 \rho m_e c^2 \frac{Z_A}{M_A} \frac{Z_p^2}{\beta^2} \times \left[ \frac{1}{2} \ln (2m_e c^2 \beta^2 W_{max} \gamma^2) - \beta^2 - \ln I - \frac{C}{Z_A} - \frac{\delta}{2} \right] \quad (1.15)$$

donde  $r_e$  y  $m_e$  son el radio clásico y masa de electrón en reposo, respectivamente.

Los últimos tres términos entre corchetes representan los efectos de potencial medio de ionización  $I$ , coeficiente de apantallamiento nuclear  $C$  y efecto de densidad  $\delta$ .

#### 1.4.2. Efectos angulares por interacciones de partículas cargadas

Las partículas cargadas sufren deflexiones angulares al atravesar e interactuar con un medio material. Existen desviaciones pequeñas debidas a interacciones de tipo Coulombianas en el *scattering* con el campo nuclear<sup>4</sup>.

El efecto de dispersión angular por efecto Coulombiano es representado por la teoría de Molière, produciendo distribuciones de deflexiones prácticamente Gaussianas  $P(\theta)$ , de acuerdo con:

$$\begin{aligned} P(\theta) &= \frac{1}{2\pi\theta^{*2}} e^{-\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\theta}{\theta^*}\right)^2\right]} d\Omega \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\theta^*} e^{-\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\theta_{plano}}{\theta^*}\right)^2\right]} d\theta_{plano} \end{aligned} \quad (1.16)$$

donde  $\theta^*$  es la media de la distribución Gaussianiana y  $\theta_{plano}$  representa la proyección planar del ángulo polar que forma el ángulo sólido  $d\Omega$  y se trabaja en la aproximación a bajo ángulo, de modo que  $\theta^2 \approx \theta_x^2 + \theta_y^2$ , para las proyecciones planares en los ejes  $x$  e  $y$ , siendo  $\theta_x^2$  y  $\theta_y^2$  independientes pero respetando la misma distribución.

#### 1.4.3. Determinación de distancias de interacción

La distancia atravesada dentro del medio material se denomina *radiation length*  $X$ , típicamente medida en  $g \cdot cm^{-2}$ .

A modo de ejemplo, para el caso particular de electrones de energías altas, la pérdida de energía dominante es por medio de radiación de *Bremsstrahlung* y producción de pares. En este caso, la *radiation length* para estos dos procesos se denomina  $X_0$  y se calcula a partir de la teoría de Tsai:

$$X_0 = \frac{B}{4\alpha r_e^2 N_A} \frac{1}{Z^2 [L_{rad} - f(Z)] + Z L'_{rad}} \quad (1.17)$$

Los parámetros  $L_{rad}$  y  $L'_{rad}$  son coeficientes que pueden determinarse para cada tipo de átomo. Por otro lado, la función parametrizada  $f(Z)$  se obtiene de:

$$f(Z) = (\alpha Z)^2 \left\{ [1 + (\alpha Z)^2]^{-1} + 0,202 - 0,0369(\alpha Z)^2 + 0,008(\alpha Z)^4 - 0,002(\alpha Z)^6 \right\} \quad (1.18)$$

<sup>4</sup>Para el caso particular de haces de hadrones, las interacciones fuertes contribuyen también a los efectos de dispersión múltiple (*multiple scattering*).

Para el caso de moléculas, se utilizan modelos de composición efectiva, y la *radiation length*  $X_{0,mol}$  de compuestos formados por componentes con pesos relativos  $q_k$ , puede calcularse de modo aproximado utilizando:

$$\frac{1}{X_{0,mol}} = \sum_k \frac{q_k}{X_k} \quad (1.19)$$

### 1.5. Aproximaciones para el transporte de fotones en medios materiales

En el caso particular de fotones, los que concentran mayor interés en aplicaciones prácticas como radioterapia convencional y radiodiagnóstico; entre otros, el interés está en los procesos físicos involucrados en la interacción de éstos con medios materiales de interés biológico.

Si se consideran las configuraciones típicas, y los procesos más probables en las geometrías usuales en prácticas médicas, resulta que la radiación primaria proviene de la fuente  $S$  que en este caso se trata del haz de rayos  $X$  utilizado.

Los procesos de interacción suceden dentro del paciente y el haz emergente, determinado por la ecuación de transporte de Boltzmann, formado tanto por radiación primaria (proveniente de la fuente  $S$ ) y radiación de *scattering* generada por interacciones dentro del paciente, llega en definitiva al sistema de detección para formar la imagen radiológica, por ejemplo. O bien, en forma análoga se describe el haz radioterapéutico dentro del paciente.

Según la energía del haz de la fuente  $S$ , y las propiedades de absorción/dispersión, así como de las dimensiones físicas del paciente, resultará que la mayor parte del flujo emergente se corresponderá con la componente primaria o de *scattering*.

Por tanto, para este caso, incorporando los modelos de interacción radiación-materia que corresponden a fotones con energías de kilovoltaje, típicas de radiodiagnóstico, tejidos biológicos y para dimensiones típicas de pacientes, resulta que en el flujo emergente la componente de radiación primaria es prácticamente todo el flujo, existiendo contribuciones del orden del 2% por parte del *scattering*.

Por tanto, la descripción del transporte de la componente primaria del flujo emergente proporciona una buena aproximación del flujo de radiación que alcanzará el detector para dar lugar a la formación de la imagen.

Para modelar el transporte de radiación primaria, utilizando la ecuación de transporte de Boltzmann en la expresión 1.10, se introducen algunas aproximaciones a fin de facilitar la resolución del problema aplicable a las condiciones propias del proceso radiológico típico. La primera condición es considerar el problema en estado estacionario, ya que se admite el equilibrio del flujo incidente, interactuante, emergente. De este modo, se tiene que se anula el primer término de la expresión 1.10, ya que  $\frac{\partial}{\partial t} \Psi = 0$ . Suponiendo que el transporte se realiza, principalmente, en una dirección, denominada  $z$ , el segundo término en la expresión 1.10 resulta  $\Omega \cdot \vec{\nabla} = \frac{d}{dz}$ .

El problema así planteado presenta simetría azimutal, por lo que resulta:  $\int \int_{4\pi} dE' d\Omega' = \int dE' 2\pi \int \sin \theta d\theta$ . Si el haz emergente está compuesto, casi exclusivamente por radiación primaria, ésta debe haber atravesado el material (paciente) prácticamente sin colisiones, es decir, que la integral aplicada al operador del *kernel*  $\int dE' 2\pi \int \sin \theta d\theta K(\vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) = 0$  (operador nulidad).

Por lo tanto, la ecuación de transporte de Boltzmann se reduce a:

$$\frac{d}{dz} \Psi^* - S = 0 \quad (1.20)$$

Para  $\Psi^*$  a lo largo del eje  $z$ .

Además, la fuente de radiación  $S$  es el flujo emitido por una fuente de modo tal que emergen rayos casi paralelos con distribución casi uniforme del frente onda, considerado plano y homogéneo. Es decir,  $S = \Psi_{source}(z) = \Psi^*$ .

A partir de la expresión 20 es inmediato que  $\Psi^*(z) = \Psi(z=0)e^{-cz}$ , conocida como ecuación de Lambert-Beer y describe la conocida relación de atenuación exponencial por parte de la radiación al atravesar un medio material. El análogo de este proceso a nivel microscópico es la penetración cuántica de la barrera de potencial, cuya solución coincide, como es de esperar.

De este modo, se obtiene a partir de la ecuación de transporte de Boltzmann una expresión significativamente útil para describir, de modo aproximado, el comportamiento de los procesos de interacción en el ámbito de radiología. Bajo estas aproximaciones, se asume que las contribuciones de *scattering* son despreciables, que el haz de radiación proviene de una fuente que emite luz en un frente de onda plano paralelo uniforme y en fase, así como que el medio irradiado es homogéneo e isotrópico.

En definitiva, la relación encontrada, gracias a las relaciones unívocas descritas al inicio del capítulo, permite cuantificar flujo, fluencia (si se conocen las características energéticas del haz) y demás cantidades vinculadas. Por ejemplo, la intensidad del haz transmitido  $I$  satisface:

$$I(z) = I(z=0)e^{-\int dE dz \mu} = I(0)e^{-\int dE \mu(E) \Delta z} = I(0)e^{-\mu(E_0) \Delta z} \quad (1.21)$$

donde la última igualdad es válida para haces monocromáticos y  $\mu$  se denomina coeficiente de absorción lineal.

Tratamiento análogo aplica a la componente primaria (y dominante) de un haz de fotones terapéutico interactuando con material de tejidos biológicos (relativo bajo número atómico efectivo).

## CAPÍTULO 2

---

# INTERACCIÓN DE LA RADIACIÓN IONIZANTE CON MEDIOS MATERIALES

---

El *Capítulo 2* está destinado a presentar un breve resumen sobre las interacciones que las radiaciones ionizantes experimentan al atravesar medios materiales. Se repasa brevemente la estructura atómica y el concepto de sección eficaz. También se expone un tratamiento para la interacción de fotones, partículas cargadas y neutrones con la materia. En el caso de las partículas cargadas, se consideran tanto una descripción microscópica de los procesos de colisión como otra basada en teorías de dispersión múltiple.

### 2.1. Introducción a la estructura atómica

Se busca describir las interacciones que las radiaciones ionizantes experimentan al atravesar medios materiales. Se presenta un breve repaso de la estructura atómica y del concepto de sección eficaz. Luego, se estudian los mecanismos de interacción de fotones, partículas cargadas y neutrones con la materia. En el caso de las partículas cargadas, se presentan descripciones microscópicas de los procesos de colisión así como teorías de *scattering* (dispersión) múltiple.

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

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

$$N = \frac{N_{Av}\rho}{A_w} \quad (2.1)$$

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

### 2.1.1. Clasificación de las radiaciones ionizantes

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

partículas neutras	{	fotones $x, \gamma$ neutrones						
partículas cargadas	{	<table style="border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="padding-right: 10px;">ligeras (<math>M = m_e</math>)</td> <td style="font-size: 2em; vertical-align: middle;">{</td> <td style="padding-left: 10px;"><math>e^-, e^+</math></td> </tr> <tr> <td style="padding-right: 10px;">pesadas (<math>M \gg m_e</math>)</td> <td style="font-size: 2em; vertical-align: middle;">{</td> <td style="padding-left: 10px;">                     iones ligeros H, ..., Ne                      iones pesados Na, ..., fragmentos de fisión                      "exóticas" <math>\mu^\pm, \pi^\pm, \bar{p}, \dots</math> </td> </tr> </table>	ligeras ( $M = m_e$ )	{	$e^-, e^+$	pesadas ( $M \gg m_e$ )	{	iones ligeros H, ..., Ne iones pesados Na, ..., fragmentos de fisión "exóticas" $\mu^\pm, \pi^\pm, \bar{p}, \dots$
ligeras ( $M = m_e$ )	{	$e^-, e^+$						
pesadas ( $M \gg m_e$ )	{	iones ligeros H, ..., Ne iones pesados Na, ..., fragmentos de fisión "exóticas" $\mu^\pm, \pi^\pm, \bar{p}, \dots$						

**Figura 2.1** Cuadro de clasificación de radiaciones ionizantes.

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

### 2.1.2. Estructura atómica

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

$$\left[ \frac{\vec{p}^2}{2M} + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = \varepsilon \psi(\vec{r}) \quad (2.2)$$

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

$$\psi_{\varepsilon, \ell, m_\ell}(\vec{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_{\ell, m_\ell}(\vec{r}) \quad (2.3)$$

<sup>1</sup>Las unidades atómicas se definen tomando:  $m_e = m_e = \hbar = 1$ .

donde  $u$  son las funciones radiales y  $Y_{\ell, m_\ell}$  los armónicos esféricos.

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

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r) \right] u(r) = \varepsilon u(r) \quad (2.4)$$

Si el potencial es atractivo ecuación 2.4 admite soluciones con autovalores  $\varepsilon_{n,\ell}$  negativos discretos ( $n$  es el número cuántico principal), que representan estados ligados. Las correspondientes funciones radiales reducidas  $u_{n,\ell}(r)$  están normalizadas a la unidad:

$$\int_{\mathbb{R}^+} u_{n,\ell}^2(r) dr = 1 \quad (2.5)$$

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

$$u_{\varepsilon,\ell} \sim \text{sen} \left( kr - \ell \frac{\pi}{2} - \eta \ln(2kr) + \delta_\ell(k) \right) [r \rightarrow \infty] \quad (2.6)$$

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

$$\psi(\vec{r}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (2.7)$$

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

$$[c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + (\beta - 1)Mc^2 + V(r)] \psi(\vec{r}) = \varepsilon \psi(\vec{r}) \quad (2.8)$$

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

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

$$\mathbf{H}_A(\zeta_1, \dots, \zeta_N) \psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) = E\psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) \quad (2.9)$$

donde  $\mathbf{H}_A$  es el Hamiltoniano atómico y contiene, además de las energías cinéticas (no-relativistas) de los electrones constituyentes, las energías potenciales electrostáticas atractivas electrón-núcleo y repulsivas electrón-electrón:

$$\mathbf{H}_A = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} + \sum_{i=1}^N \left( \frac{-Zq_e^2}{r_i} \right) + \sum_{j<i} \frac{q_e^2}{r_{ji}} \quad (2.10)$$

<sup>2</sup>No hace al contenido del presente curso.

Es conocido que la ecuación 2.9 con el Hamiltoniano definido según la expresión 2.10 no tiene solución exacta, y por tanto es necesario recurrir a aproximaciones para simplificarla. Por ejemplo, en el modelo de electrones independientes en un campo central se supone que todos los electrones se mueven en un potencial atómico promedio o efectivo  $V_{ef}(r)$ , elegido de modo que sea una buena aproximación a los potenciales electrostáticos de la ecuación 2.10. Luego:

$$\mathbf{H}_A = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} + V_{ef}(r_j) \right] \quad (2.11)$$

O, la formulación correspondiente en el límite relativista:

$$\mathbf{H}_A = \sum_{i=1}^N [c\vec{\alpha}_j \cdot \vec{p}_j + (\beta_j - 1)m_e c^2 + V(r_j)] \quad (2.12)$$

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

$$\Psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) = \frac{1}{\sqrt{(N!)}} \begin{bmatrix} \psi_1(\zeta_1) & \cdots & \psi_1(\zeta_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\zeta_1) & \cdots & \psi_N(\zeta_N) \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

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

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

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

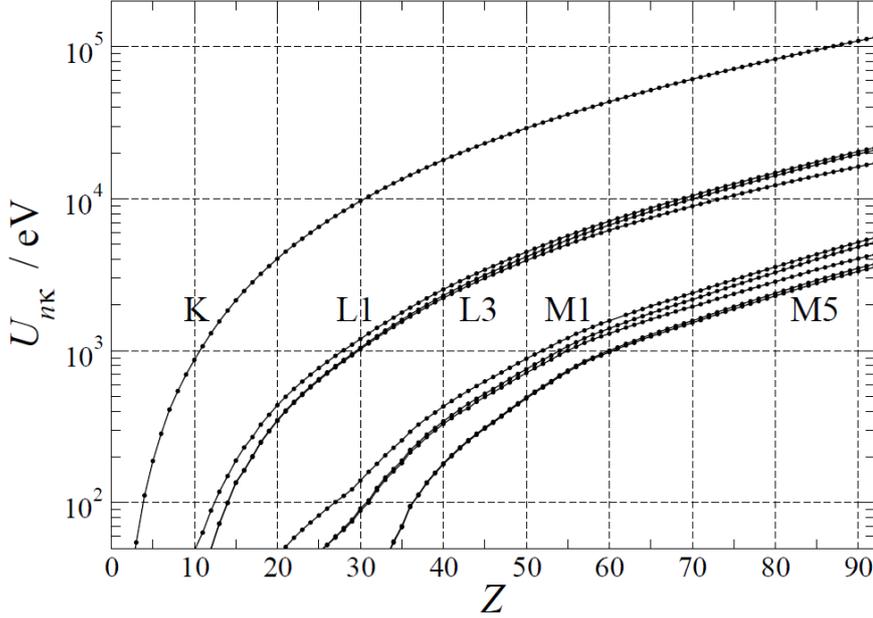
Cuando un átomo se ve sometido a la influencia de la radiación incidente deben incluirse en el Hamiltoniano  $\mathbf{H}$  términos adicionales con las energías de interacción entre el proyectil y los electrones atómicos. La ecuación de Schrödinger (o Dirac) en este caso es difícil o imposible de resolver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

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

$$\mathbf{H}_0 = \mathbf{H}_A + \mathbf{H}_F \quad (2.14)$$

donde el hamiltoniano del átomo ( $\mathbf{H}_A$ ), está dado por las ecuaciones 2.11 (o 2.12) y:

$$\mathbf{H}_F \equiv \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} b_{\lambda}^{\dagger} b_{\lambda} \quad (2.15)$$



**Figura 2.2** Energías de ionización experimentales de las capas  $K$ ,  $L1 - L3$  y  $M1 - M5$  de los átomos neutros (J.M. Fernández-Varea.)

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

$$b_\lambda^\dagger |\dots, n_\lambda, \dots\rangle = \sqrt{n_\lambda + 1} |\dots, n_\lambda + 1, \dots\rangle \quad (2.16)$$

$$b_\lambda |\dots, n_\lambda, \dots\rangle = \sqrt{n_\lambda} |\dots, n_\lambda - 1, \dots\rangle \quad (2.17)$$

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

$$\vec{A}(\vec{r}) \propto \sum_\lambda \left( \vec{A}_\lambda b_\lambda + \vec{A}_\lambda^* b_\lambda^\dagger \right) \quad \vec{A}_\lambda \sim \hat{\pi}_\lambda e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (2.18)$$

Efectuando el acoplamiento mínimo en la ecuación 2.11 se obtiene:

$$\mathbf{H}'_{\text{fot}} = \sum_{j=1}^N \frac{q_e}{m_e c} \vec{A}(\vec{r}_j) \cdot \vec{p}_j + \sum_{j=1}^N \frac{q_e^2}{2m_e c^2} \vec{A}^2(\vec{r}_j) \equiv \mathbf{H}'_{\text{fot } 1} + \mathbf{H}'_{\text{fot } 2} \quad (2.19)$$

En el caso relativista, se utiliza el acoplamiento mínimo en la ecuación 2.12, resultando:

$$\mathbf{H}'_{\text{fot}} = \sum_{j=1}^N q_e \vec{\alpha}_j(\vec{r}) \cdot \vec{A}(\vec{r}_j) \quad (2.20)$$

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

$$\mathbf{H}'_{\text{c p}} = \frac{Z Z^* q_e^2}{r_0} + \sum_{j=1}^N \left( \frac{-Z^* q_e^2}{r_{0j}} \right) \equiv \mathbf{H}'_{\text{c p 1}} + \mathbf{H}'_{\text{c p 2}} \quad (2.21)$$

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

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

$$W_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}|^2 \rho(E_{|f\rangle} = E_{|i\rangle}) \quad (2.22)$$

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

$$\mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle} = \langle f | \mathbf{H}' | i \rangle + \sum_n \frac{\langle f | \mathbf{H}' | n \rangle \langle n | \mathbf{H}' | i \rangle}{E_i - E_n} + \dots \equiv \mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}^{(1)} + \mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}^{(2)} + \dots \quad (2.23)$$

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

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

$$m_e \frac{\partial^2 \vec{r}}{\partial t^2} + m_e \Gamma \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} + m_e \omega_j^2 \vec{r} = -q_e \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (2.24)$$

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

$$\vec{r}(t) = -\frac{q_e}{m_e \omega_j^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \vec{E}(t) \quad (2.25)$$

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

$$\epsilon(k, \omega) = \epsilon_{\Re}(k, \omega) + i\epsilon_{\Im}(k, \omega) \quad (2.26)$$

La función dieléctrica depende del vector de onda  $k$  y la frecuencia angular  $\omega$ . La magnitud relevante en este tipo de formalismos es la *función de pérdida de energía*  $\Im(1/\epsilon) = \frac{\epsilon_{\Im}}{\epsilon_{\Re}^2 + \epsilon_{\Im}^2}$ .

Finalmente, cuando la energía de la radiación incidente es muy alta, es posible despreciar las energías de ligadura y las distribuciones de velocidades de todos los electrones del blanco, y describirlos como si estuvieran libres y en reposo. Las ecuaciones de conservación de la energía y el momentum permiten estimar las energías y direcciones de salida más probables de las partículas luego de interactuar (modalidad colisión binaria).

## 2.2. Sección eficaz: Introducción

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

$$\frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \equiv \frac{1}{\dot{\Phi}} \frac{\dot{N}}{dE' d\Omega} \quad (2.27)$$

En la expresión anterior (2.27) el último factor está directamente relacionado con la probabilidad de transición por unidad de tiempo dada por la regla de oro de Fermi (2.22).

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

$$\sigma = \int dE' \int d\Omega \frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \quad (2.28)$$

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

$$p(E', \theta) = \frac{1}{\sigma} 2\pi \sin(\theta) \frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \quad (2.29)$$

Obsérvese que la sección eficaz diferencial depende del ángulo de dispersión polar  $\theta$  pero no del —ángulo de dispersión— acimutal  $\phi$  debido a la simetría cilíndrica del problema.

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

$$\lambda^{-1} = \mathcal{N}\sigma \quad (2.30)$$

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

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

$$\sigma_{Total} = \sum_i \sigma_i \quad \wedge \quad \lambda_{Total}^{-1} = \sum_i \lambda_i \quad (2.31)$$

### 2.3. Conceptos básicos sobre interacción de fotones con la materia

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

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

$$\varsigma \equiv \frac{E}{m_e c^2} \quad (2.32)$$

#### 2.3.1. Efecto Fotoeléctrico

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

#### Efecto Fotoeléctrico en la aproximación de Born

La aproximación de Born (no-relativista) considera la perturbación  $\mathbf{H}'_{\text{fot } 1}$  (2.21) a primer orden, con la simplificación adicional de reemplazar la función de onda del fotoelectrón por una onda plana. Esta aproximación implica secciones eficaces razonables sólo si  $\epsilon_e \gg U_i$  de modo que se pueda despreciar la interacción Coulombiana del fotoelectrón con el ión residual.

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_e} = 2^{\frac{3}{2}} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \varsigma^{-\frac{7}{2}} \frac{\text{sen}^2(\theta_e)}{\left[1 - \frac{v_e}{c} \cos(\theta_e)\right]^4} \approx 2^{\frac{3}{2}} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \varsigma^{-\frac{7}{2}} \text{sen}^2(\theta_e) \quad (2.33)$$

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

$$\sigma(E) = \int_{-1}^1 d2\pi \cos(\theta_e) \frac{d\sigma}{d\Omega_e} = \frac{2^{\frac{3}{2}} \pi}{3} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \varsigma^{-\frac{7}{2}} \quad (2.34)$$

Esta fórmula (2.34) resulta ser aplicable no sólo para fotoionización de átomos hidrogenoides, sino que también describe de forma aproximada la ionización de la capa  $K$  de —átomos o iones por

rayos X y  $\gamma$ . Obsérvese que la sección eficaz es proporcional a  $Z^5$  y a  $E^{-\frac{7}{2}}$ , creciendo rápidamente al aumentar el número atómico y disminuir la energía.

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

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

En la aproximación dipolar eléctrica no-relativista, el Hamiltoniano de la interacción entre el campo de radiación electromagnética y el átomo es  $\mathbf{H}'_{\text{fot } 1}$  (2.21), pero haciendo la exponencial igual a 1 en la expresión del potencial vector. Con estas simplificaciones, la relación de conmutación de Heisenberg permite reemplazar los valores esperados de los operadores  $\vec{p}_j$  por los  $\vec{r}_j$ . Aplicando teoría de perturbaciones a primer orden (sólo con el término  $\mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}^{(1)}$  en las expresiones 2.23, resulta la sección eficaz de efecto fotoeléctrico se escribe:

$$\sigma(E) = 4\pi\alpha E \left| \langle \Psi_f | \sum_{j=1}^N \vec{r}_j | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (2.35)$$

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

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

$$\sigma(E) = \frac{4\pi^2\alpha}{3} \mathbb{N}_{n\ell} (\zeta_e - \epsilon_{n\ell}) \left[ \frac{\ell}{2\ell+1} R_{\ell-1}^2 + \frac{\ell+1}{2\ell+1} R_{\ell+1}^2 \right] \quad (2.36)$$

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

$$R_{\ell\pm 1}(\zeta_e) \equiv \int_{\mathbb{R}^+} P_{\zeta_e \ell\pm 1}(r) r P_{n\ell}(r) dr \quad (2.37)$$

### Efecto Fotoeléctrico en la aproximación Scofield

Actualmente, los cálculos considerados más exactos son los realizados por Scofield, que incluyen todos los multipolos del campo de radiación así como efectos relativistas, lo cual es esencial para átomos pesados. Es decir, se trata  $\mathbf{H}'_{\text{fot}}$  a primer orden sin introducir simplificaciones adicionales. Estos resultados han sido incorporados a la base de datos EPDL en 1997<sup>3</sup> y en el programa XCOM. A modo de ejemplo, la figura 2.3 presenta las secciones eficaces de efecto fotoeléctrico para Al, Cu y Pb.

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

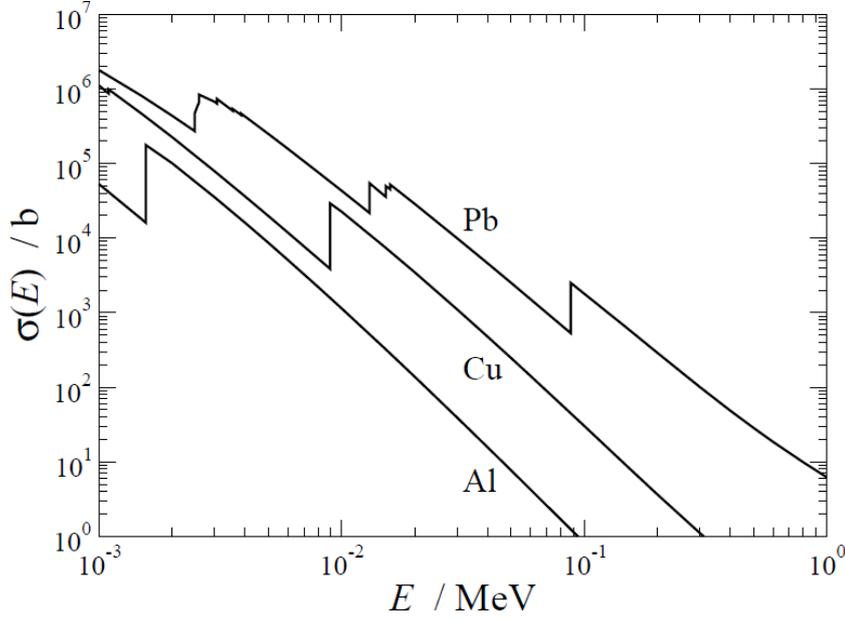


Figura 2.3 Secciones eficaces de efecto fotoeléctrico para Al, Cu y Pb.

### 2.3.2. Scattering coherente o Rayleigh

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

#### Dispersión coherente en la aproximación del factor de forma

En este formalismo (básicamente no-relativista) se trata al Hamiltoniano  $\mathbf{H}'_{\text{foto}2}$  (expresión 2.20) asociado a la interacción entre la radiación electromagnética y el átomo como una perturbación a primer orden, mientras que desprecia la contribución de  $\mathbf{H}'_{\text{foto}1}$  a segundo orden. Desarrollando los correspondientes elementos de matriz  $\langle f | \mathbf{H}'_{\text{foto}2} | i \rangle$  puede calcularse la sección eficaz diferencial (por átomo) para dispersión coherente:

$$\frac{d\sigma_{coh}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_T}{d\Omega} |F(q, Z)|^2 = r_e^2 \left( \frac{1 + \cos^2(\theta)}{2} \right) |F(q, Z)|^2 \quad (2.38)$$

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

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

$$F(q, Z) = \langle \Psi_0 | \sum_{j=1}^N e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j / \hbar} | \Psi_0 \rangle \quad (2.39)$$

donde  $\Psi_0$  denota la función de onda atómica del estado fundamental y la suma recorre los  $Z$  electrones atómicos;  $\vec{q}$  es el vector transferencia de momento, cuyo módulo está dado por:

$$q = 2 \frac{E}{c} \operatorname{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \quad (2.40)$$

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

$$F(q, Z) = \int_{\mathfrak{R}^+} \rho(r) \frac{\operatorname{sen} \left( \frac{qr}{\hbar} \right)}{\frac{qr}{\hbar}} 4\pi r^2 dr \quad (2.41)$$

$F(q, Z)$  es una función monótonamente decreciente en  $q$  que varía desde  $F(0, Z) = Z$  a  $F(\infty, Z) = 0$ . Por lo tanto, la presencia del término en  $F(q, Z)^2$  en la expresión para la sección eficaz diferencial (2.38), favorece la dispersión coherente (Rayleigh) hacia ángulos pequeños.

En el caso del átomo de hidrógeno no-relativista el factor de forma atómico puede evaluarse analíticamente<sup>4</sup>:

$$F_H(q, Z = 1) = \left[ 1 + \left( \frac{q a_0 \hbar}{2Z} \right) \right]^{-2} \quad (2.42)$$

Pero, los factores de forma atómicos para átomos multielectrónicos (con más de un electrón) requieren de ser calculados numéricamente. Por lo general, existen extensas tablas<sup>5</sup>, obtenidas a partir de densidades atómicas autoconsistentes para átomos con  $Z = 2 - 100$ . La Figura 2.4 muestra los factores de forma atómicos correspondientes a los átomos de C, Cu y Pb.

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

$$\sigma(E) = \pi r_e^2 \int_{-1}^1 (1 + \cos^2(\theta)) |F(q, Z)|^2 d(\cos(\theta)) \quad (2.43)$$

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

$$\sigma = \frac{8}{3} \pi r_e^2 Z^2 \quad (2.44)$$

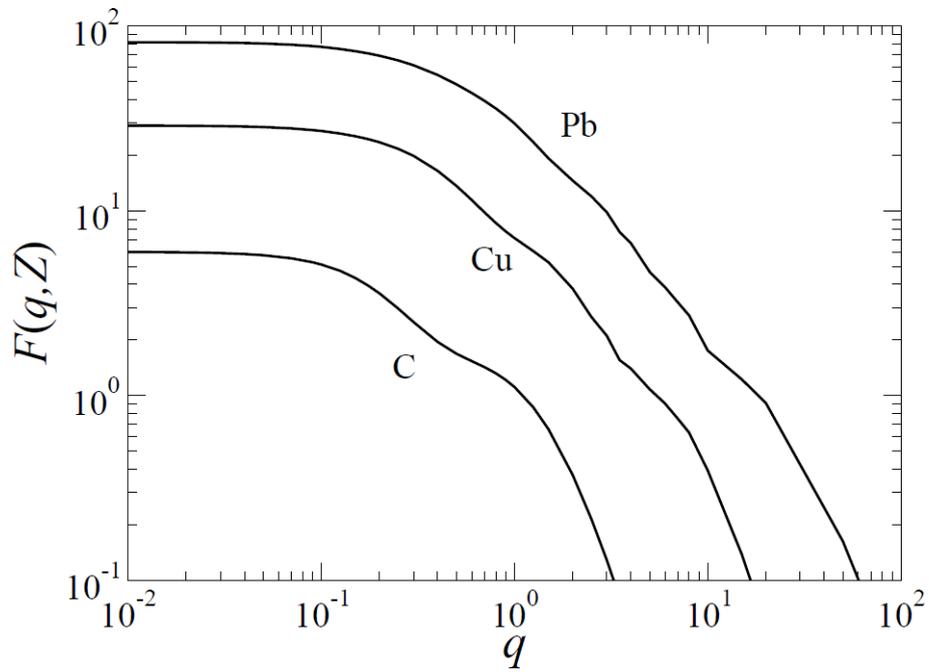
Mientras que en el límite de alta energía se tiene:

$$\sigma \sim E^{-2} \quad (2.45)$$

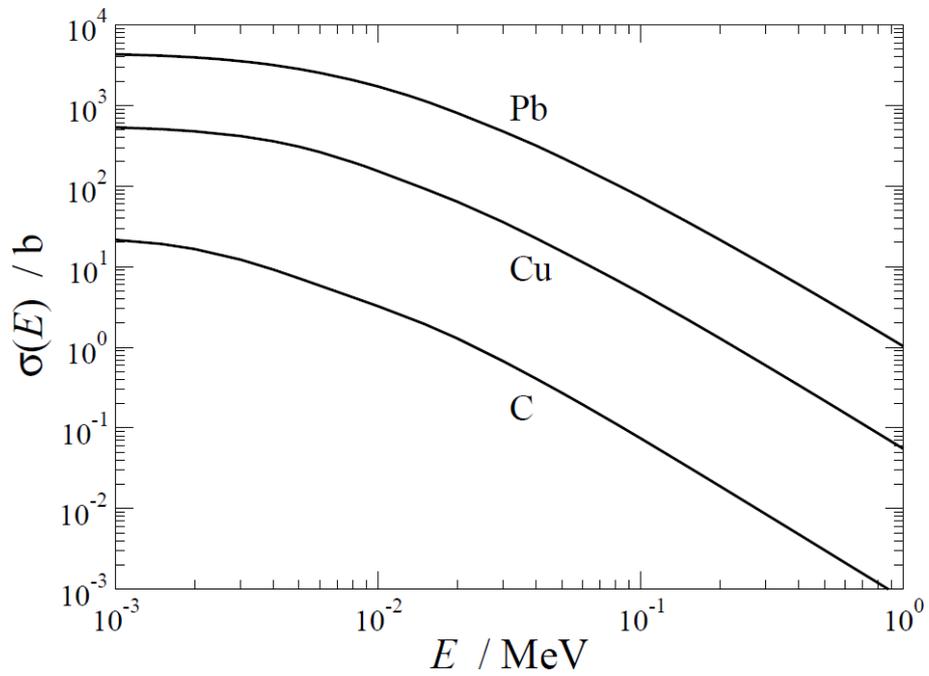
Estos comportamientos asintóticos pueden apreciarse en la Figura 2.5, donde se han representado las secciones eficaces totales Rayleigh para C, Cu y Pb.

<sup>4</sup>fórmula de Pirene.

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



**Figura 2.4** Factores de forma atómicos para C, Cu y Pb (Hubbell et al.)



**Figura 2.5** Secciones eficaces Rayleigh para C, Cu y Pb.

### Dispersión coherente anómala

En un sentido estricto, la expresión 2.38 es adecuada sólo para fotones si  $E \gg U_K$ , para  $U_K$ : energía de ligadura de la capa  $K$  del átomo. El comportamiento predicho por la expresión 2.44 es alterado sustancialmente cuando se introducen los factores (reales) de dispersión “anómala”  $f'$  y  $f''$ , cuyo origen está en el Hamiltoniano relativista  $\mathbf{H}'_{\text{fot}}$  tratado a segundo orden<sup>6</sup>. En este tratamiento, la sección eficaz diferencial resulta:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma_T}{d\Omega} |F(q, Z) + f'(E, Z) + if''(E, Z)|^2 \quad (2.46)$$

La correspondiente sección eficaz total presenta cerca de los bordes de absorción una marcada reducción respecto de la sección eficaz predicha por la expresión 2.43.

Afortunadamente, cuando aparecen estos efectos de dispersión anómala el *scattering* coherente es mucho menos probable que la absorción fotoeléctrica. Por tanto, para muchos propósitos, es posible la aproximar el factor de forma por medio de la expresión 2.43.

#### 2.3.3. Scattering incoherente o Compton

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

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

$$\cos(\theta) = \frac{1}{\kappa} \left( \kappa + 1 - \frac{1}{\tau} \right) \quad (2.47)$$

$$\cos(\theta_e) = (\kappa + 1) \sqrt{\frac{1 - \tau}{\kappa [2 + \kappa(1 - \tau)]}} \quad (2.48)$$

Por lo tanto:

$$\tau = \frac{1}{1 + \kappa(1 - \cos(\theta))} \quad (2.49)$$

$$E' = \frac{E}{1 + \frac{E}{m_e c^2} (1 - \cos(\theta))} \equiv E_C \quad (2.50)$$

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

#### La formulación de Klein-Nishina

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

<sup>6</sup>Lo que se denomina “método de la matriz  $S$  de dispersión”.

$$\frac{d\sigma_{K-N}}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \left( \frac{E_C}{E} \right)^2 \left[ \frac{E_C}{E} + \frac{E}{E_C} - \text{sen}^2(\theta) \right] = \quad (2.51)$$

$$\frac{r_e^2}{2} [1 + \kappa(1 - \cos(\theta))]^{-2} \left[ 1 + \cos^2(\theta) + \frac{\kappa^2(1 - \cos(\theta))^2}{1 + \kappa(1 - \cos(\theta))} \right] \quad (2.52)$$

Puede verse que en el límite de bajas energías ( $\kappa \rightarrow 0$ ), la sección eficaz  $\frac{d\sigma_{K-N}}{d\Omega}$  se reduce a la fórmula de Thomson (2.38)

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

$$\frac{d\sigma_{K-N}}{d\tau} = \frac{d\sigma_{K-N}}{d\Omega} \frac{2\pi d(\cos(\theta))}{d\tau} = \frac{\pi r_e^2}{\kappa^3} \left( \frac{1}{\tau^2} + \frac{\kappa^2 - 2\kappa - 2}{\tau} + (2\kappa + 1) + \kappa^2 \tau \right) \quad (2.53)$$

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

$$\sigma_{K-N} = \int_{\tau_{\min}}^{\tau_{\max}} d\tau \frac{d\sigma_{K-N}}{d\tau} = \pi r_e^2 \left[ \frac{4}{\kappa^2} + \frac{\kappa^2 - 2\kappa - 2}{\kappa^2} \ln(1 + 2\kappa) + \frac{2(\kappa + 1)}{(1 + 2\kappa)^2} \right] \quad (2.54)$$

### La aproximación de Waller-Hartree

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

$$\frac{d\sigma}{d\tau} = \frac{d\sigma_{K-N}}{d\tau} S(q, Z) \quad (2.55)$$

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

$$q^2 = \frac{E^2 + E'^2 - 2EE' \cos(\theta)}{c^2} = (m_e c)^2 \kappa [2 + \kappa - 2\tau(1 + \kappa) + \tau^2 \kappa] \quad (2.56)$$

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

La función de dispersión incoherente se calcula a partir de la función de onda atómica del estado fundamental  $\Psi_0$  mediante:

$$S(q, Z) = \langle \Psi_0 | \sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^Z e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j) / \hbar} | \Psi_0 \rangle \quad (2.57)$$

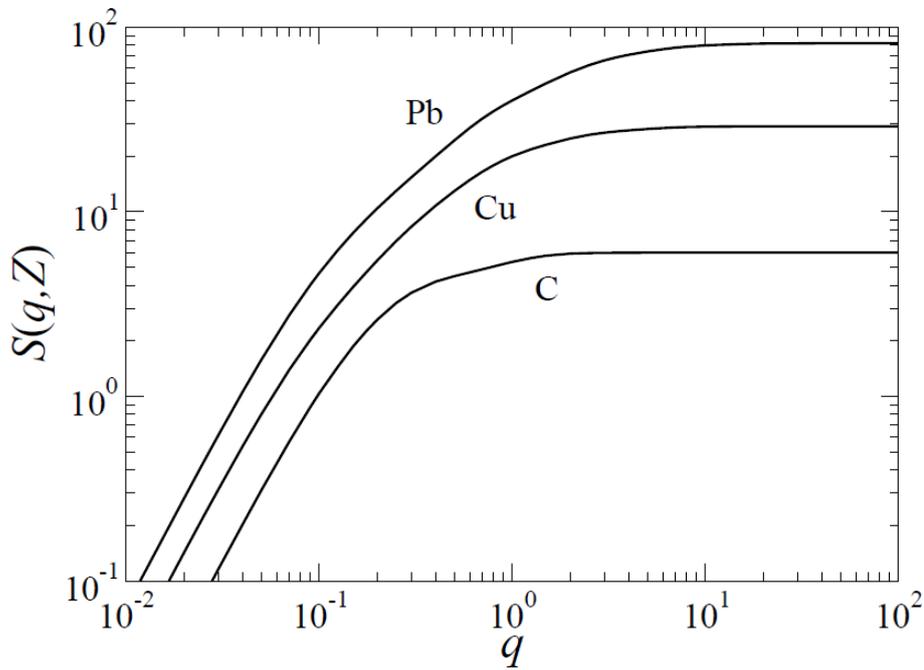
De aquí se sigue que  $S(q, Z)$  es una función monótonamente creciente de  $q$  que toma valores desde  $S(0, Z) = 0$  hasta  $S(\infty, Z) = Z$ . Se observa que la función de dispersión incoherente inhibe las colisiones "blandas", *i.e.* aquellas en las que la transferencia de momento  $q$  es pequeña,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

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

$$S_H(q, Z) = 1 - [F_H(q, Z)]^2 \quad (2.58)$$

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

En situaciones prácticas puede convenir el empleo de funciones de dispersión incoherente aproximadas pero expresadas en forma analítica <sup>8</sup>, en vez de extensas tablas de difícil manejo. La Figura 2.6 reporta funciones de dispersión incoherente correspondientes a los átomos de C, Cu y Pb.



**Figura 2.6** Funciones de dispersión incoherente de C, Cu y Pb (Hubbell et al.)

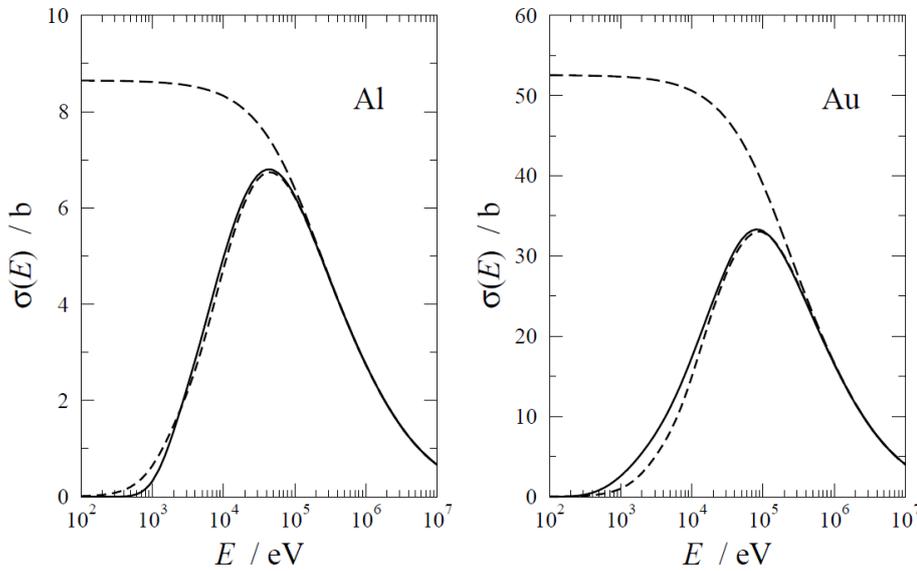
La sección eficaz total incoherente (por átomo) es entonces:

$$\sigma(E) = \int_{\tau_{\min}}^{\tau_{\max}} \frac{d\sigma_{KN}}{d\tau} S(q, Z) d\tau \quad (2.59)$$

El comportamiento de  $\sigma$  en función de la energía del fotón puede observarse en la Figura 2.7 para dos especies atómicas (Al y Au).

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

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



**Figura 2.7** Secciones eficaces Compton de Al y Au. Las curvas a trazos largos y cortos son las predicciones de Klein-Nishina y Waller-Hartree, respectivamente. Las curvas continuas corresponden a la aproximación de impulso relativista.

La sección eficaz total tiende a cero para fotones de bajas energías, mientras que la sección eficaz total obtenida a partir de la fórmula de Klein-Nishina ( $\sigma_{KN}$ ) permanece finita en  $E = 0$ . La diferencia entre secciones eficaces totales obtenidas de la expresión 2.59 y de la fórmula de Klein-Nishina aumenta cuando la energía del fotón disminuye y es apreciable para energías menores a  $\sim 100$  keV.

### Scattering Compton: aproximaciones de mayor precisión

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

#### 2.3.4. Producción de pares electrón-positrón

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

El cálculo de las secciones eficaces del proceso de creación de pares es complicado, pues se debe recurrir a la electrodinámica cuántica. Empleando este formalismo, y suponiendo que las partículas cargadas emergentes son lo bastante rápidas como para poder ser descritas mediante ondas planas (aproximación de Born), Bethe y Heitler obtuvieron una expresión para la sección eficaz diferencial en la energía cinética del electrón creado ( $E_{-}$ )<sup>9</sup>:

$$\frac{d\sigma_{BH}^{e^{-}e^{+}}}{dE_{-}} = Z(Z+1)f(Z, E, E_{-}) \quad (2.60)$$

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

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

$$\langle \theta_{\pm} \rangle \approx \left( 1 + \frac{E}{m_e c^2} \right)^{-1} \quad (2.61)$$

La sección eficaz total de creación de pares se obtiene al integrar  $\frac{d\sigma_{BH}^{e^{-}e^{+}}}{dE_{-}}$  respecto de  $E_{-}$ . La Figura 2.8 reporta las secciones eficaces de creación de pares y tripletes en C, Cu y Pb según la energía del fotón incidente.

<sup>9</sup>Expresión conocida como fórmula de Bethe-Heitler.

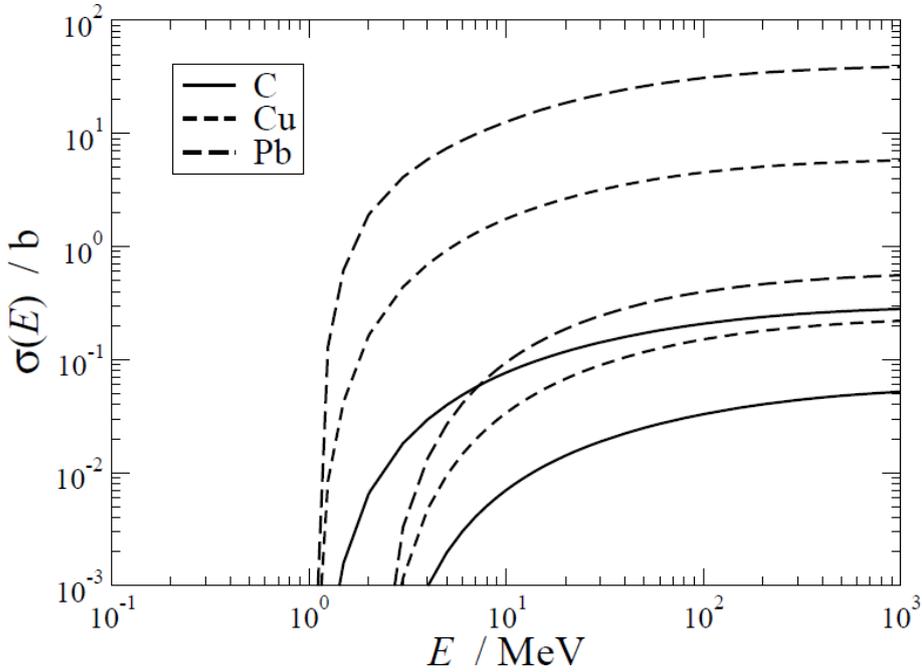


Figura 2.8 Secciones eficaces de creación de pares y tripletes en C, Cu y Pb.

### 2.3.5. Reacciones fotonucleares

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

### 2.3.6. Coeficiente de atenuación: Introducción

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

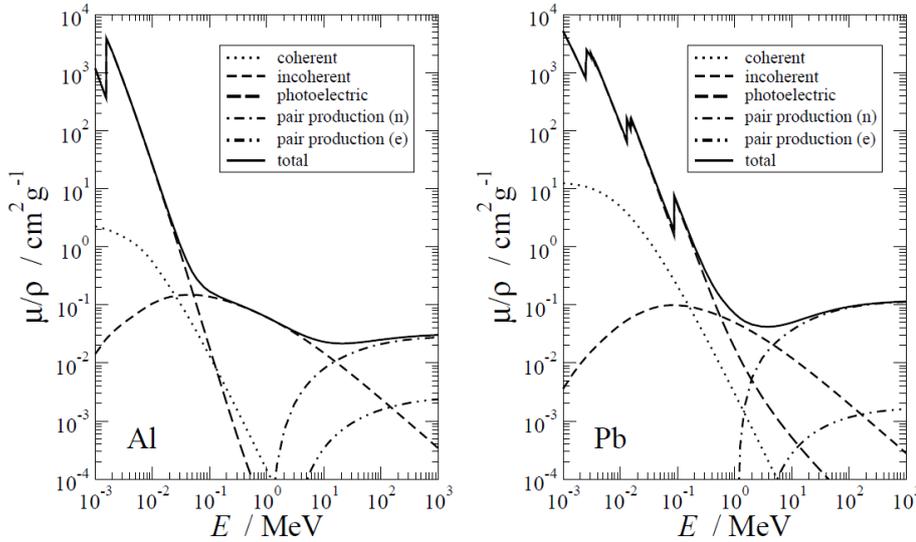
$$\mu_i \equiv \mathcal{N} \sigma_i \tag{2.62}$$

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

$$\frac{\mu}{\rho} \equiv \frac{N_{Av}}{A_w} \sum_i \sigma_i \tag{2.63}$$

Las dos tabulaciones de coeficientes de atenuación másicos más empleadas son la base de datos EPDL '97, de Cullen et al. y la del NIST de Berger-Hubbell. Esta última cubre energías de fotones

superiores a 1 keV y se puede generar mediante el programa llamado XCOM. Nótese que, convencionalmente, las tabulaciones de coeficientes de atenuación másicos no incluyen la contribución debida a reacciones fotonucleares. A modo de ejemplo, la Figura 2.9 reporta los coeficientes de atenuación másicos de Al y Pb generados con XCOM.



**Figura 2.9** Coeficientes de atenuación másicos de Al y Pb, obtenidos con el programa XCOM.

### 2.3.7. Coeficiente de atenuación másico para compuestos

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

$$\frac{\mu}{\rho_{comp}} \approx \sum_j w_j \frac{\mu}{\rho_j} \quad (2.64)$$

donde la suma se extiende sobre los  $j$  componentes elementales (puros) presentes en el compuesto siendo  $w_j$  la fracción en peso del elemento  $j$ -ésimo. Nótese que en esta expresión 2.64 se ignoran los efectos de agregación, ya sean moleculares o de materia condensada.

## 2.4. Introducción a la interacción de las partículas cargadas con la materia

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

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

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

### 2.4.1. Scattering elástico de electrones y positrones

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

#### Sección eficaz diferencial de Rutherford

Considérese un electrón (o positrón) que modifica su dirección de vuelo al interactuar elásticamente con el potencial de Coulomb producido por el núcleo del átomo blanco. El correspondiente Hamiltoniano es  $\mathbf{H}'_{\text{cp}1}$  (expresión 2.21). Es un hecho notable que para este Hamiltoniano los cálculos no-relativistas clásico y cuántico (tanto exacto como en la aproximación de Born) de la correspondiente sección eficaz diferencial conducen a la misma expresión<sup>10</sup>:

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{(2m_e Z_1 Z_2 q_e^2)^2}{q^4} = \left( \frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{m_e v^2} \right)^2 \frac{1}{(1 - \cos(\theta))^2} \quad (2.65)$$

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

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{(2m_e Z_1 Z_2 q_e^2)^2}{q^4} = \left( \frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{\beta^2 \gamma m_e c^2} \right)^2 \frac{1}{(1 - \cos(\theta))^2} = \left( \frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{(p\beta c)} \right)^2 \frac{1}{(1 - \cos(\theta))^2} \quad (2.66)$$

La divergencia de la sección eficaz diferencial de Rutherford en  $\theta = 0$  es una consecuencia directa de no haber tenido en cuenta el apantallamiento del potencial de Coulomb por los electrones atómicos, *i.e.* haber despreciado  $\mathbf{H}'_{\text{cp}2}$ .

<sup>10</sup>Véase N. Gauthier, Eur. J. Phys. **21** L17, 2000.

**2.4.1.1. La fórmula de Rutherford con apantallamiento** Una manera relativamente sencilla de evitar los problemas de la fórmula de Rutherford consiste en partir del potencial de Wentzel ( $V_W$ ): -

$$\mathbf{H}'_{\mathbf{cP}} \sim V_W = \frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{r} e^{-\frac{r}{R}} \quad (2.67)$$

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

$$R \approx 0,885 Z^{-\frac{1}{3}} a_0 \quad (2.68)$$

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

$$\frac{d\sigma_{SR}}{d\Omega} = \left( \frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{(p\beta c)} \right)^2 \frac{1}{(2A + 1 - \cos(\theta))^2} \quad (2.69)$$

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

$$A \equiv \frac{1}{4} \left( \frac{\hbar}{p} \right)^2 R^{-2} \quad (2.70)$$

Finalmente, puede calcularse la correspondiente sección eficaz total:

$$\sigma_{SR} = \left( \frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{(p\beta c)} \right)^2 \frac{\pi}{A(A + 1)} \quad (2.71)$$

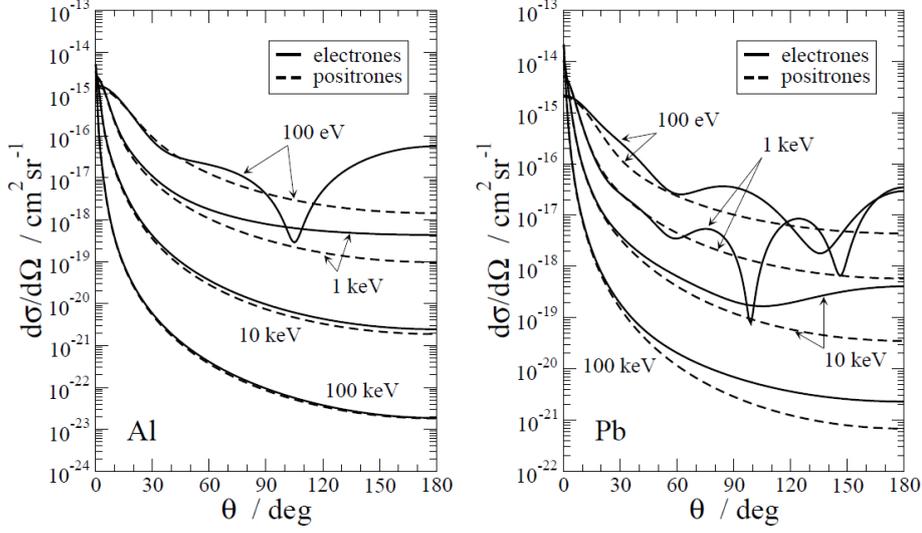
**2.4.1.2. Método de ondas parciales** En el caso de energías bajas y números atómicos altos es necesario recurrir a formalismos más sofisticados para obtener las secciones eficaces elásticas. En particular, los métodos basados en los desarrollos en ondas parciales proporcionan una descripción adecuada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

Recientemente, ICRU <sup>11</sup> ha revisado a fondo los modelos de dispersión elástica de electrones y positrones y ha elaborado una tabulación basada en el método de ondas parciales relativista. La Figura ?? reporta, a modo de ejemplo, las secciones eficaces diferenciales de Al y Pb para electrones y positrones de varias energías, tomadas de la base de datos del informe 77 de ICRU.

## 2.4.2. Scattering inelástico de electrones y positrones

En estas colisiones la partícula cargada incidente experimenta una reducción de su energía, *i.e.*  $E' < E$ , que se invierte en excitar o ionizar el átomo blanco ( $\Psi_f \neq \Psi_i$ ). Normalmente un único

<sup>11</sup>International Commission on Radiation Units and Measurements, Inc. (ICRU)



**Figura 2.10** Secciones eficaces diferenciales de *scattering* elástica de electrones y positrones en átomos de Al y Pb.

electrón, al que se denomina “electrón activo”, efectúa una transición desde un orbital ligado  $i$  a otro  $f$ , que puede ser ligado (excitación) o libre (ionización). Por supuesto sólo se podrá ionizar la capa atómica  $i$ -ésima si  $E > U_i$  mientras que el electrón secundario (rayo  $\delta$ ) se emite con energía cinética  $\epsilon_e = WU_i$ .

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

$$W \leq W_{\text{máx}} \equiv \frac{2m_e v^2}{\left(1 + \frac{m_e}{M}\right)^2} \quad (2.72)$$

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

$$\frac{d\sigma_R}{dW} = \frac{2\pi Z_1^2 q_e^4}{m_e v^2} \frac{1}{W^2} \quad (2.73)$$

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

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

$$\frac{d\sigma_M}{dW} = \frac{2\pi q_e^4}{m_e c^2 \beta^2} \frac{1}{W^2} \left[ 1 - \frac{W}{E - W} + \left(\frac{W}{E - W}\right)^2 + \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma}\right)^2 \left(\frac{W}{E - W} + \frac{W^2}{E^2}\right) \right] \quad (2.74)$$

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

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

$$\frac{d\sigma_B}{dW} = \frac{2\pi q_e^4}{m_e c^2 \beta^2} \frac{1}{W^2} \left[ 1 - b_1 \frac{W}{E} + b_2 \left( \frac{W}{E} \right)^2 - b_3 \left( \frac{W}{E} \right)^3 + b_4 \left( \frac{W}{E} \right)^4 \right] \quad (2.75)$$

con  $W \leq W_{\text{máx}} = E$  y

$$\begin{aligned} b_1 &\equiv \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^2 \frac{2(\gamma + 1)^2 - 1}{\gamma^2 - 1} & b_2 &\equiv \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^2 \frac{3(\gamma + 1)^2 - 1}{(\gamma + 1)^2} \\ b_3 &\equiv \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^2 \frac{2\gamma(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)^2} & b_4 &\equiv \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^2 \frac{(\gamma - 1)^2}{(\gamma + 1)^2} \end{aligned} \quad (2.76)$$

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

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

$$\frac{d^2\sigma_i}{dQ dW} = \frac{2\pi Z_1^2 q_e^4}{m_e v^2} \frac{1}{W Q} \frac{df_i(Q, W)}{dW} \quad (2.77)$$

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

$$Q \equiv \frac{q^2}{2m_e} = \frac{M}{m_e} \left[ 2E - W - 2\sqrt{E(E - W)} \cos(\theta) \right] \quad (2.78)$$

Los primeros factores de la expresión 2.77 son puramente cinemáticos, mientras que el último describe la respuesta del átomo blanco a la perturbación causada por el proyectil incidente. Este último factor se conoce como *intensidad de oscilador generalizada*, y se calcula a partir de las funciones de onda inicial y final del átomo ionizado:

$$\frac{df_i(Q, W)}{dW} = \frac{W}{Q} \left| \langle \Psi_f | \sum_{j=1}^{Z_2} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{r}_j} | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (2.79)$$

Expresando las funciones de onda atómicas  $\Psi_i$  y  $\Psi_f$  como determinantes de Slater que difieren únicamente en el orbital de spin monoparticular del electrón activo, el elemento de matriz se reduce

a  $\langle \Psi_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{r}} | \Psi_i \rangle$ . La intensidad de oscilador generalizada del orbital 1S del átomo de hidrógeno admite una expresión analítica, pero la de los orbitales de átomos multielectrónicos ha de calcularse numéricamente tras efectuar un desarrollo en ondas parciales de la función de onda  $\Psi_f$  del orbital libre.

La sección eficaz diferencial en la transferencia de energía  $W$  se obtiene integrando la expresión 2.77 respecto de  $Q$ :

$$\frac{d\sigma_i}{dW} = \int_{Q_-}^{Q_+} \frac{d^2\sigma_i}{dQ dW} \wedge Q_{\pm} \equiv Q \cos(\theta) = \pm 1. \quad (2.80)$$

Las predicciones de la fórmula de Rutherford están en buen acuerdo con los resultados que se obtienen de la ecuación anterior (2.80) sólo para  $U_i \ll W < W_{\text{máx}}$ , *i.e.* cuando la transferencia de energía es tan grande que los efectos de ligadura y movimiento pasan a ser irrelevantes. Además,  $\frac{d\sigma_i}{dW} = 0$  para  $W < U_i$ , lo que elimina la divergencia de la fórmula de Rutherford en  $W = 0$ .

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

$$\frac{df_i(Q, W)}{dW} \approx N_i \delta(W - Q) \quad (2.81)$$

Cabe destacar que empleando esta aproximación e integrando la expresión 2.80 respecto de los valores cinemáticamente permitidos de  $Q$  se recupera la fórmula de Rutherford.

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

$$\sigma_i(E) = \int_{U_i}^E \frac{d\sigma_i}{dW} dW \quad (2.82)$$

que toma un valor finito.

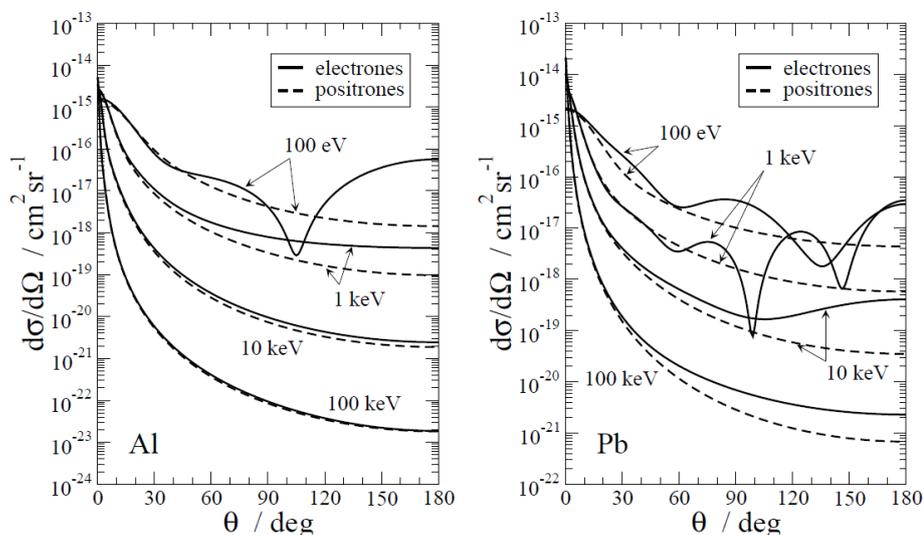
#### 2.4.2.3. Métodos más precisos para la ionización de capas atómicas por impacto de $e^-/e^+$

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

Trabajos como la referencia [23] contienen una parametrización, basada en las aproximaciones de Born con ondas planas y distorsionadas (relativistas), de las secciones eficaces de ionización de las capas  $K$ ,  $L$  y  $M$  de todos los átomos por impacto de electrones y positrones. La Figura 2.11 presenta estas secciones eficaces para las capas más internas del átomo de Al.

#### 2.4.3. Scattering inelástico de iones positivos “vestidos”

Un ión de carga positiva (protón, partícula  $\alpha$ , etc.) puede viajar acompañado de uno o varios electrones que reducen su carga neta, apantallándolo parcial o totalmente. Se dice que es un “ión



**Figura 2.11** Sección eficaz de ionización de las capas  $1s_{1/2}$ ,  $2s_{1/2}$ ,  $2p_{1/2}$  y  $2p_{3/2}$  del átomo de Al por impacto de electrones (curvas continuas) y positrones (curvas a trazos).

vestido”. Es posible incorporar este apantallamiento en la expresión de la sección eficaz doble diferencial (2.80) reemplazando  $Z_1$  por  $Z_1 - F(q, Z_1)$ , donde  $F(q, Z_1)$  es el factor de forma atómico del proyectil. Dado que  $0 \leq F(q, Z_1) \leq Z_1$ , la interacción del ión vestido es menor que cuando se trata de una carga  $Z_1 q_e$  “desnuda”.

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

**2.4.3.1. Emisión de radiación de frenado o Bremsstrahlung** Es bien sabido que las partículas cargadas emiten radiación electromagnética (radiación de frenado Bremsstrahlung) cuando están sometidas a aceleraciones. Un resultado de la electrodinámica clásica indica que la intensidad de radiación ha de ser proporcional al cuadrado de la aceleración. Recurriendo a la primera ley de Newton, y sabiendo que la interacción Coulombiana es la responsable de la fuerza que da lugar a dicha aceleración, se deduce que la intensidad será proporcional a los cuadrados de las cargas del proyectil y del núcleo, e inversamente proporcional al cuadrado de la masa de la partícula. Este resultado cualitativo indica que la emisión de Bremsstrahlung es muchos órdenes de magnitud más baja (prácticamente despreciable) para partículas cargadas pesadas ( $M \gg m_e$ ) que para electrones y positrones. De hecho, la emisión de Bremsstrahlung acaba siendo el proceso dominante de pérdida de energía de estos leptones <sup>12</sup> cuando su energía es suficientemente alta.

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

<sup>12</sup>Electrones y positrones son clasificados dentro del conjunto denominado “leptones”, que refiere -brevemente- a partículas con spin  $\pm 1/2$  ( $-1/2$  en el caso de los neutrinos y  $+1/2$  en los demás, “fermiones”) que no experimenta interacción fuerte.

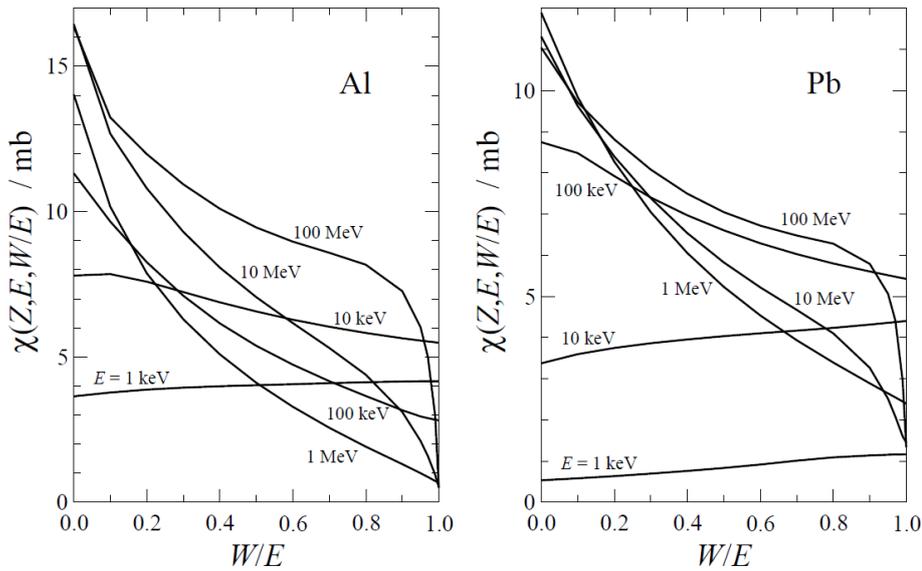
$$\frac{d\sigma_{BH}}{dW} = Z(Z + 1) \frac{1}{W} f(Z, E, W) \quad (2.83)$$

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

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

$$\chi(Z, E, W/E) = \frac{\beta^2}{Z^2} W \frac{d\sigma}{dW} \quad (2.84)$$

para electrones con energías comprendidas entre 1 keV y 10 GeV. La Figura 2.12 presenta algunas de estas funciones para Al y Pb.



**Figura 2.12** Secciones eficaces diferenciales reducidas para la emisión de Bremsstrahlung por electrones en Al y Pb.

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

$$p(Z, E, W/E, \cos(\theta)) = \frac{d^2\sigma}{dW d(\cos(\theta))} \quad (2.85)$$

Kissel et al. calcularon secciones eficaces diferenciales, empleando métodos de ondas parciales, para electrones con energía cinética entre 1 y 500 keV, y a partir de sus resultados tabularon

$p(Z, E, W/E, \cos(\theta))$  para unos cuantos valores de  $Z$ ,  $E$  y  $W/E$ . Éstos y otros autores han propuesto fórmulas analíticas que permiten obtener la densidad de probabilidad de  $\cos(\theta)$  cuando el número atómico o la energía no se corresponden con los de las tablas. También existen en la literatura expresiones analíticas sencillas para estimar la distribución angular en el límite de altas energías. En este límite  $\gamma \gg 1$  el ángulo polar promedio de emisión del fotón de Bremsstrahlung disminuye al aumentar la energía del electrón siguiendo la relación aproximada:

$$\langle \theta \rangle \approx \gamma^{-1} \quad (2.86)$$

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

#### 2.4.4. Aniquilación $e^+e^-$

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

#### 2.4.5. Scattering elástico múltiple de electrones y positrones

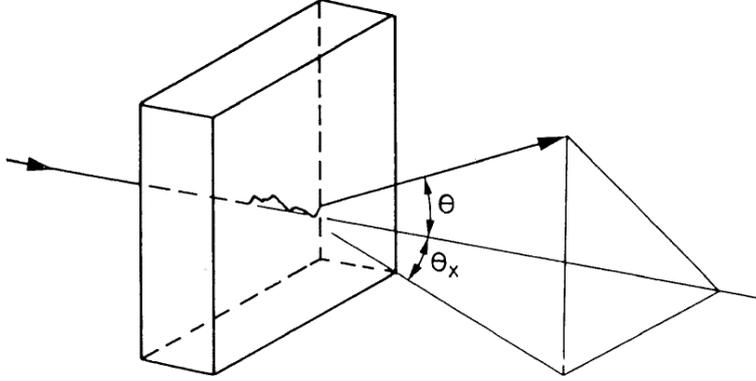
Los recorridos libres medios entre colisiones elásticas de electrones o positrones son muy pequeños. Como consecuencia de este hecho, si un electrón/positrón recorre un cierto camino  $s$  dentro del medio material en el que se mueve, experimentará numerosas deflexiones angulares, aunque la mayor parte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

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

**2.4.5.1. Modelo gaussiano de scattering elástico múltiple de  $e^-$  y  $e^+$**  Se presenta en esta sección un modelo que permite evaluar de un modo simple la distribución de ángulos  $\Theta$  en función de  $s$ . La Figura 2.13 indica esquemáticamente la situación que se aborda:  $\Theta_x$  es el ángulo proyectado sobre el plano  $x - z$ .

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

$$p(\Theta_x, s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\langle \Theta_x \rangle^2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{\Theta_x^2}{\langle \Theta_x \rangle^2}} \quad (2.87)$$



**Figura 2.13** *Scattering* elástico múltiple. (manual de ENELOPE v. 2008 y Fernández-Várea et al.)

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

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

$$p(\Theta, s) = p(\Theta_x, s)p(\Theta_y, s) = \frac{1}{\pi \langle \Theta^2 \rangle} e^{-\frac{\Theta^2}{\langle \Theta^2 \rangle}} \quad (2.88)$$

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

$$\langle \Theta^2 \rangle = \frac{s}{\lambda} \langle \theta^2 \rangle = s \mathcal{N} \int_{\mathfrak{R}^+} \theta^2 \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi\theta d\theta \quad (2.89)$$

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

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

$$T \equiv \frac{d\langle \Theta^2 \rangle}{ds} \quad (2.90)$$

que proporciona el incremento de  $\langle \Theta^2 \rangle$  por unidad de recorrido <sup>13</sup>. El modelo gaussiano que presentado es válido para ángulos  $\Theta \ll 1$  rad y está emparentado con el modelo de Fermi-Eyges.

**2.4.5.2. Distribuciones angulares de Goudsmit y Saunderson y de Molière** Goudsmit y Saunderson obtuvieron en 1940 la siguiente expresión para la distribución angular de un electrón que ha recorrido un trayecto  $s$ :

$$p(\Theta, s) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} e^{-\frac{s}{\lambda_\ell}} P_\ell(\cos(\Theta)) \quad (2.91)$$

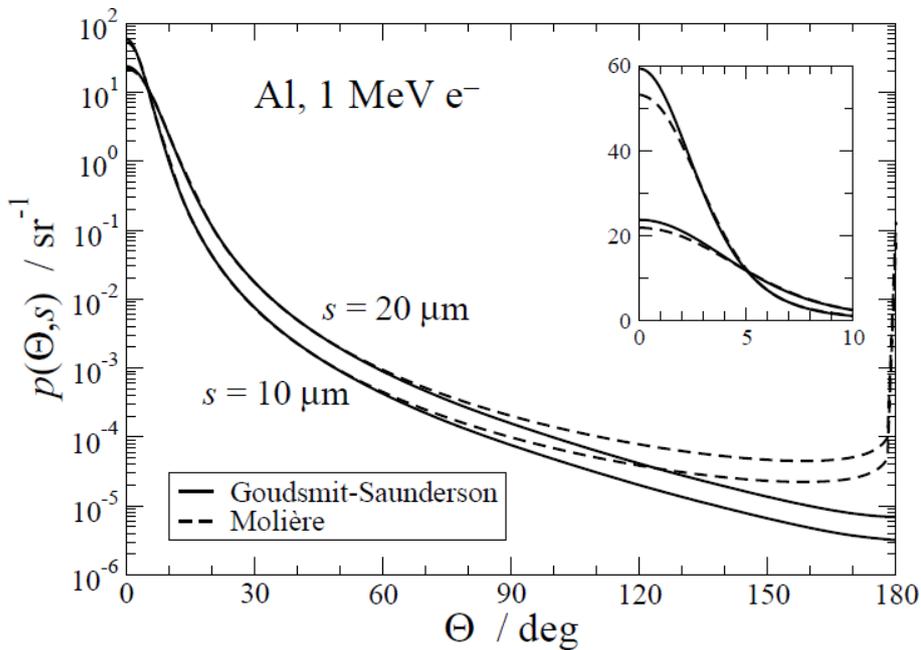
donde los  $P_\ell$  son polinomios de Legendre y

<sup>13</sup>ICRU publica tablas con poderes de dispersión másicos,  $T/\rho$ , para diversos materiales.

$$\lambda_\ell \equiv \mathcal{N} \int_{-1}^1 [1 - P_\ell(\cos(\theta))] \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi d(\cos(\theta)) \quad (2.92)$$

Este resultado es más realista que la aproximación gaussiana, pues es válido para ángulos  $\Theta$  arbitrarios y cualquier sección eficaz diferencial elástica.

La Figura 2.14 presenta, a modo de ejemplo, las distribuciones angulares de electrones de 1 MeV en Al después de recorrer distancias  $s$  iguales a  $10 \mu\text{m}$  y  $20 \mu\text{m}$  (49.4 y 98.8 colisiones elásticas en promedio, respectivamente).



**Figura 2.14** Distribuciones angulares de electrones de 1 MeV tras recorrer  $10 \mu\text{m}$  y  $20 \mu\text{m}$  en Al. Las curvas continuas y a trazos corresponden a las distribuciones de Goudsmit-Saunderson y de Molière, respectivamente.

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

#### 2.4.6. Scattering inelástico múltiple de electrones y positrones

Al igual que en el caso de dispersión elástica múltiple, resulta de interés lograr una descripción global de las colisiones inelásticas que experimenta una partícula cargada al recorrer una distancia  $s$  mucho mayor que el correspondiente recorrido libre medio inelástico (que es pequeño). Se trata de condiciones de *scattering/dispersión inelástico múltiple*. De manera análoga, surge una distribución

gaussiana en la pérdida de energía acumulada  $w$ . No obstante se suele simplificar aún más esta descripción, y se adopta la denominada *aproximación de frenado continuo*, que retiene el valor promedio de  $w$  pero desprecia las fluctuaciones estadísticas. Es decir, sólo interesa el valor medio de la gaussiana sin tomar en cuenta la varianza (ni, por supuesto, momentos de orden superior).

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

$$S \equiv -\frac{dE}{ds} = \frac{\langle W \rangle}{\lambda} = \mathcal{N} \int_0^E W \frac{d\sigma}{dW} dW \quad (2.93)$$

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

**2.4.6.1. Stopping power de colisión o electrónico** En 1915, previo a la formulación de la mecánica cuántica, Bohr dedujo el poder de frenado de partículas cargadas pesadas suponiendo que los electrones atómicos están ligados armónicamente, obteniendo:

$$S_{col} = \frac{4\pi Z_1^2 q_e^4}{m_e v^2} \mathcal{N} Z_2 \ln \left[ \frac{1,123 m_e v^3}{Z_1 q_e^2 \langle w \rangle} \right] \quad (2.94)$$

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

$$Z_2 \ln (\langle w \rangle) = \sum_j f_j \ln (w_j) \quad (2.95)$$

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

Trabajando en el formalismo de la mecánica cuántica,  $S_{col}$  puede calcularse a partir de la expresión 2.93, con la sección eficaz diferencial  $\frac{d\sigma}{dW}$ . Este procedimiento requiere evaluar la intensidad de oscilador generalizada con las funciones de onda de todos los electrones de los átomos del medio. Como éstas son complicadas de obtener en el caso de un sólido, es más pragmático realizar de entrada simplificaciones que eviten tener que calcularlas.

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

$$S_{col} = \frac{4\pi Z_1 q_e^2}{m_e v^2} \mathcal{N} Z_2 \ln \left[ \alpha \frac{m_e v^2}{I} \right] \quad (2.96)$$

donde:

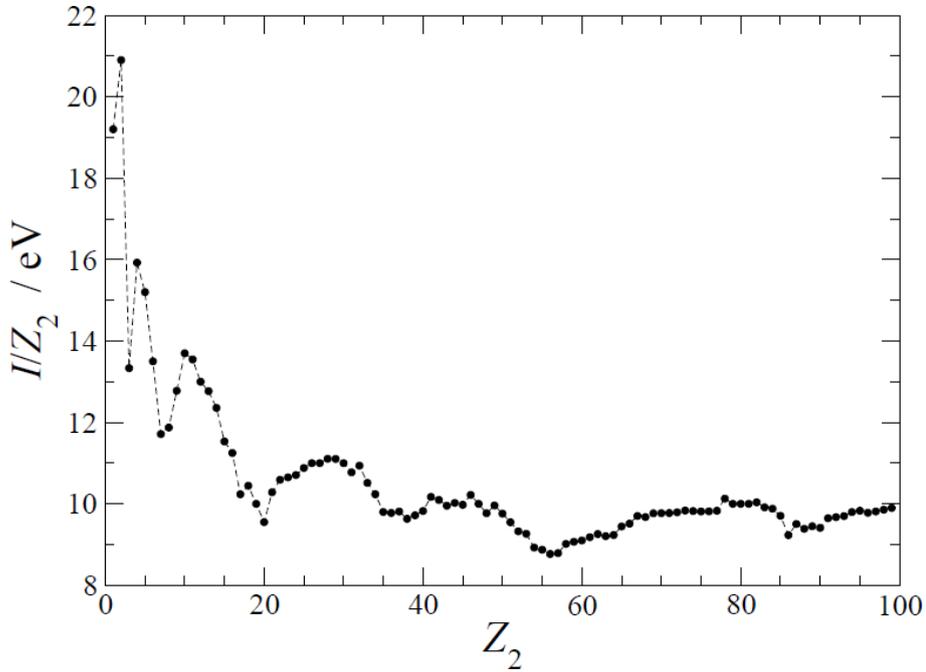
$$\alpha = \begin{cases} 2 & \text{part. cargadas pesadas} \\ 1 & \text{positrones} \\ \sqrt{e/8} \approx 0,583 & \text{electrones} \end{cases} \quad (2.97)$$

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

$$Z_2 \ln(I) = \int_{\mathbb{R}^+} \frac{df(Q=0, W)}{dW} \ln(W) dW \quad (2.98)$$

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

Nótese la similitud de esta expresión con la ecuación 2.95. Los valores de  $I$  para los elementos de la tabla periódica se han representado en la Figura 2.15. Obsérvese que, salvo oscilaciones características,  $I \approx 10 \times Z_2$  eV para  $Z_2 \geq 15$ . Otro aspecto notable de la fórmula de Bethe es que el poder de frenado depende de la velocidad y la carga de la partícula, pero no de su masa.



**Figura 2.15** Energías medias de excitación  $I$  en función del número atómico  $Z_2$  (ICRU 37 *Stopping Powers for Electrons and Positrons*).

La validez de la fórmula de Bethe puede ser extendida a energías mayores y menores incluyendo varios efectos que no son tenidos en cuenta por la expresión 2.96. Introduciendo  $\mathcal{N}$  (2.1), y el radio clásico del electrón  $r_e$ , la expresión resultante es la *fórmula de Bethe-Bloch* para el poder de frenado másico por colisión de partículas cargadas pesadas.

$$\frac{S_{col}}{\rho} = \frac{K}{\beta^2} \frac{Z_2}{A} Z_1^2 L(\beta) \quad (2.99)$$

donde:

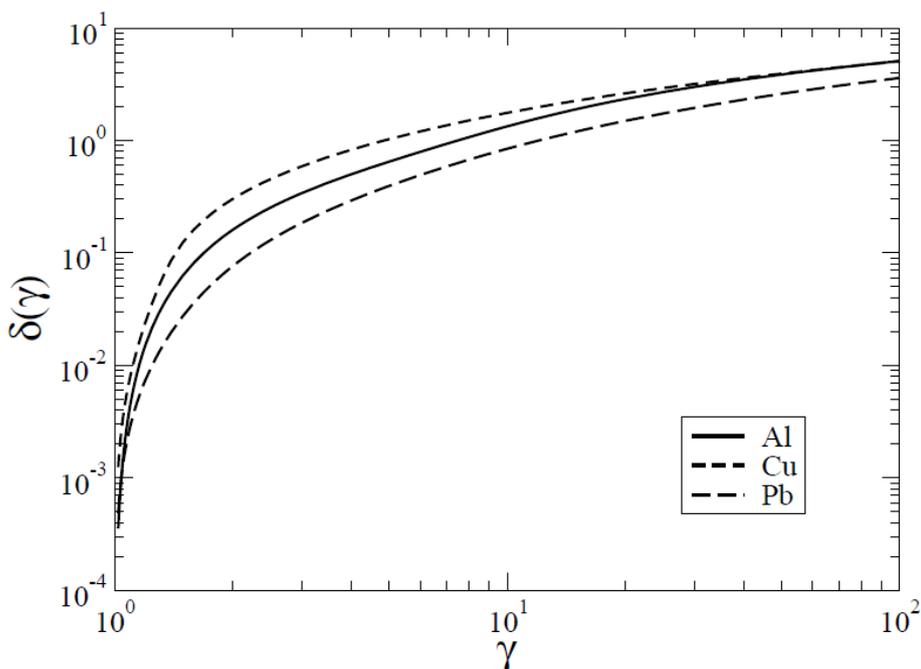
$$K \equiv 4\pi r_e^2 c^2 / m_u = 0,307 \text{ MeV cm}^2 / \text{g} \quad \wedge \quad L(\beta) = L_0 + Z_1 L_1 + Z_1^2 L_2 + \dots \quad (2.100)$$

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

$$L_0(\beta) = \ln \left( \frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2}{I} \right) - \beta^2 - \frac{C}{Z_2} - \frac{\delta}{2} \quad (2.101)$$

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

La corrección por efecto de densidad da cuenta de la reducción del poder de frenado debido a la polarización del medio, más apreciable cuanto mayor es la energía del proyectil como muestra la Figura 2.16.



**Figura 2.16** Efecto de densidad de Al, Cu y Pb (ICRU 37 *Stopping Powers for Electrons and Positrons*).

Vale la pena indicar que, dada una sustancia,  $\delta$  sólo depende de la velocidad de la partícula cargada o, equivalentemente, del factor relativista  $\gamma$ .

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

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

$$Z_1^2 L_2 = -y^2 \sum_{n=1}^{\infty} [n(n^2 + y^2)]^{-1} \quad (2.102)$$

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

$$Z_1^2 L_2 \approx -c_E - \ln(y) \quad (2.103)$$

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

Sumando este valor asintótico al límite no-relativista de la ecuación 2.101 (con  $C/Z_2 = 0$  y  $\delta = 0$ ) se recupera la expresión clásica de Bohr para el poder de frenado.

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

$$\langle \mathcal{Q} \rangle = Z_1 \left[ 1 - e^{-\frac{v}{v_0 Z_1^{2/3}}} \right] \quad (2.104)$$

donde  $v_0$  es la velocidad de Bohr.

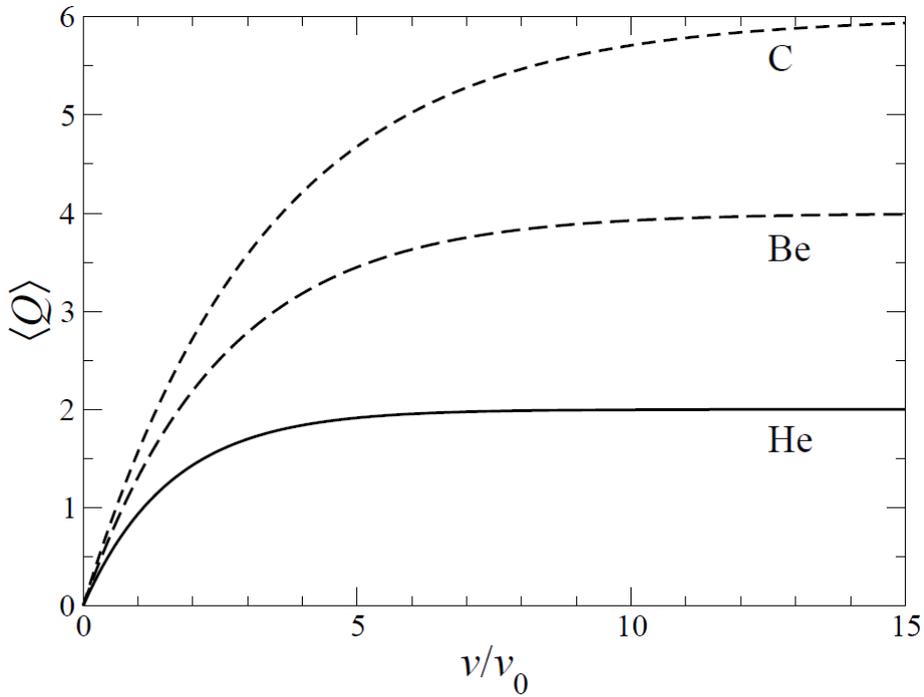
La Figura 2.17 se presenta los estados de carga promedio de varios iones ligeros en función de su velocidad, calculados con la ecuación 2.104. Puede observarse que  $\langle \mathcal{Q} \rangle \rightarrow 0$  cuando  $v \rightarrow 0$ , mientras que  $\langle \mathcal{Q} \rangle \rightarrow Z_1$  si  $v \gg v_0 Z_1^{2/3}$ .

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

ICRU ha publicado tablas con valores recomendados de  $S_{col}/\rho$  para protones y partículas  $\alpha$ ; estos valores pueden generarse fácilmente empleando los programas `pstar` y `astar`, respectivamente. A modo de ejemplo, la Figura 2.18 muestra los poderes de frenado máxicos electrónicos de protones y partículas  $\alpha$  en Al, Cu y Pb. Recientemente ICRU también ha proporcionado tablas de  $S_{col}/\rho$  para iones comprendidos entre el Li y el Ar.

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

$$S_{col} = \mathcal{N} Z_2 \frac{2\pi q_e^4}{m_e c^2 \beta^2} \left[ \ln \left( \frac{E^2 \gamma + 1}{I^2} \frac{\gamma + 1}{2} \right) + f^\pm(\gamma) - \delta \right] \quad (2.105)$$



**Figura 2.17** Estado de carga promedio de iones de He, Be y C en función de su velocidad, calculado con la ecuación 2.104.

Con:

$$f^-(\gamma) = \gamma^{-2} \left[ 1 - (2\gamma - 1) \ln(2) + \frac{1}{8}(\gamma - 1)^2 \right] \quad (2.106)$$

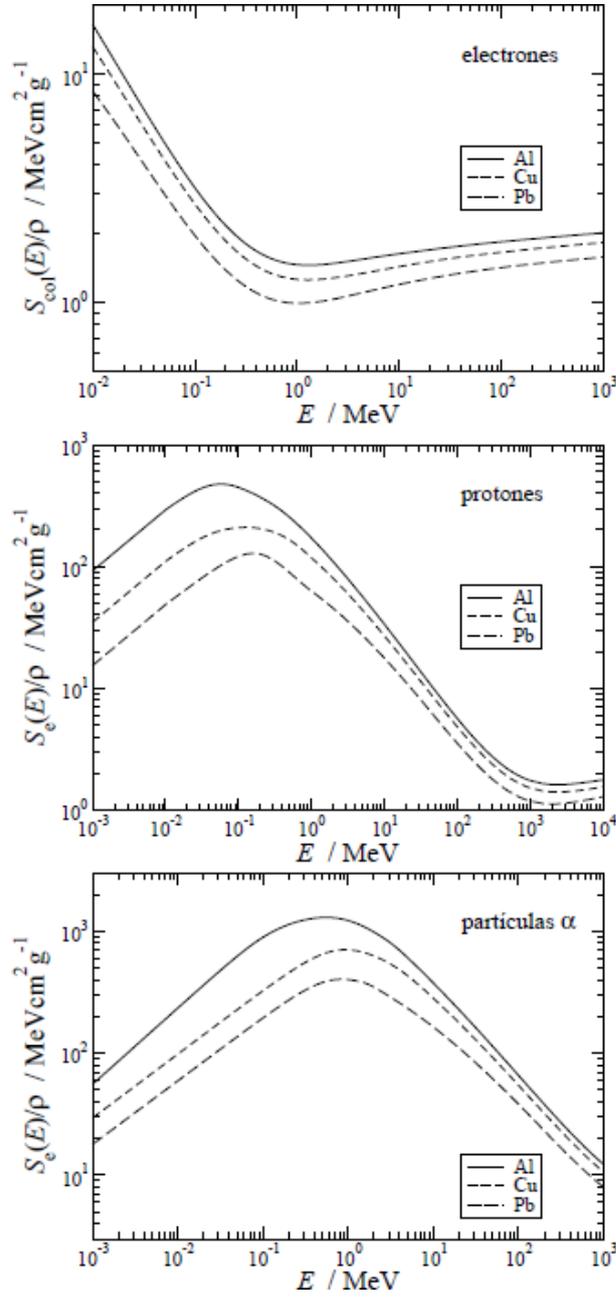
$$f^+(\gamma) = 2 \ln(2) - \frac{1 - \gamma^{-2}}{12} \left[ 23 + \frac{14}{\gamma + 1} + \frac{10}{(\gamma + 1)^2} + \frac{4}{(\gamma + 1)^3} \right] \quad (2.107)$$

ICRU ha publicado tabulaciones extensas con valores recomendados de  $S_{col}/\rho$  para numerosos materiales. La Figura 2.18 muestra los poderes de frenado másicos por colisión de electrones en Al, Cu y Pb. Los valores de  $S_{col}/\rho$  han sido obtenidos empleando el programa `estar`.

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

$$\frac{S_{col}}{\rho} = \sum_j w_j \left( \frac{S_{col}}{\rho} \right)_j \quad (2.108)$$

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



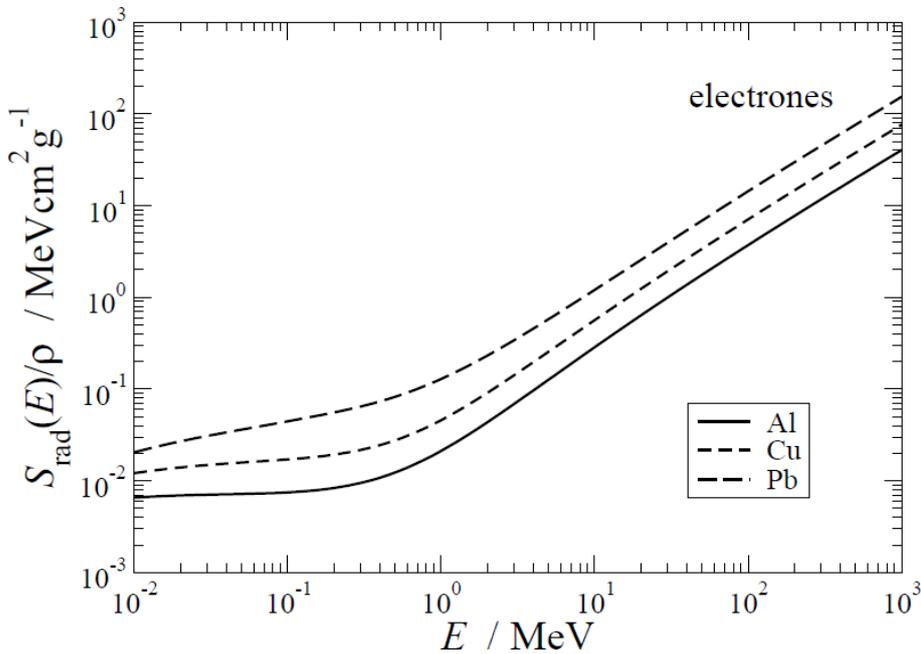
**Figura 2.18** Poder de frenado másico por colisión de electrones, protones y partículas  $\alpha$  en Al, Cu y Pb.

$$\langle Z/A \rangle = \sum_j w_j \left( \frac{Z_j}{A_j} \right) \quad (2.109)$$

$$\langle Z/A \rangle \ln(I) = \sum_j w_j \left( \frac{Z_j}{A_j} \ln(I_j) \right) \quad (2.110)$$

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

**2.4.6.5. Stopping Power de radiación (o radiativo)** A energías elevadas la emisión de radiación de frenado acaba siendo responsable de la mayor parte de pérdidas de energía de electrones y positrones. El programa *estar* permite generar tablas con los poderes de frenado másicos radiativos de estas partículas que son idénticas a la publicadas por ICRU. La Figura 2.19 reporta los valores para electrones en Al, Cu y Pb.



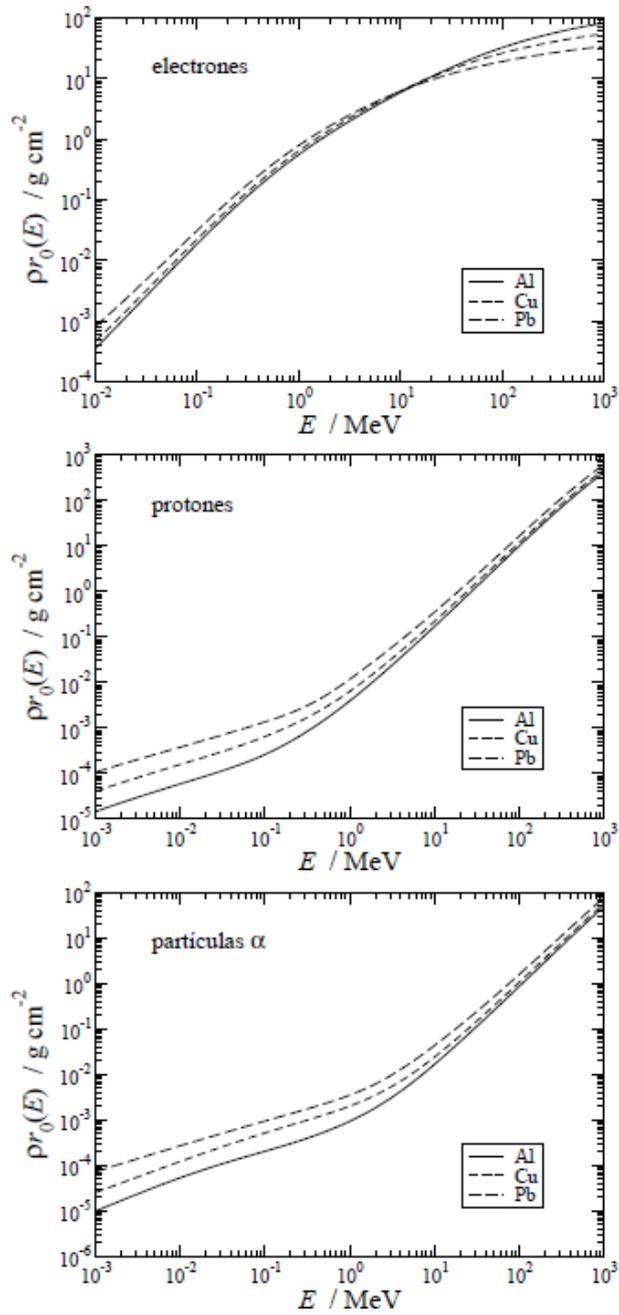
**Figura 2.19** Poder de frenado másico por radiación de electrones en Al, Cu y Pb

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

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

$$r_0(E) \equiv \int_0^s ds' = \int_0^E \frac{dE'}{-\frac{dE'}{ds}} = \int_0^E \frac{dE'}{S(E')} \tag{2.111}$$

donde  $S$  es el poder de frenado total, incluyendo las contribuciones de colisión y radiativa (esta última sólo en el caso de electrones y positrones). La Figura 2.20 presentado el rango másico de electrones, protones y partículas  $\alpha$  en Al, Cu y Pb.

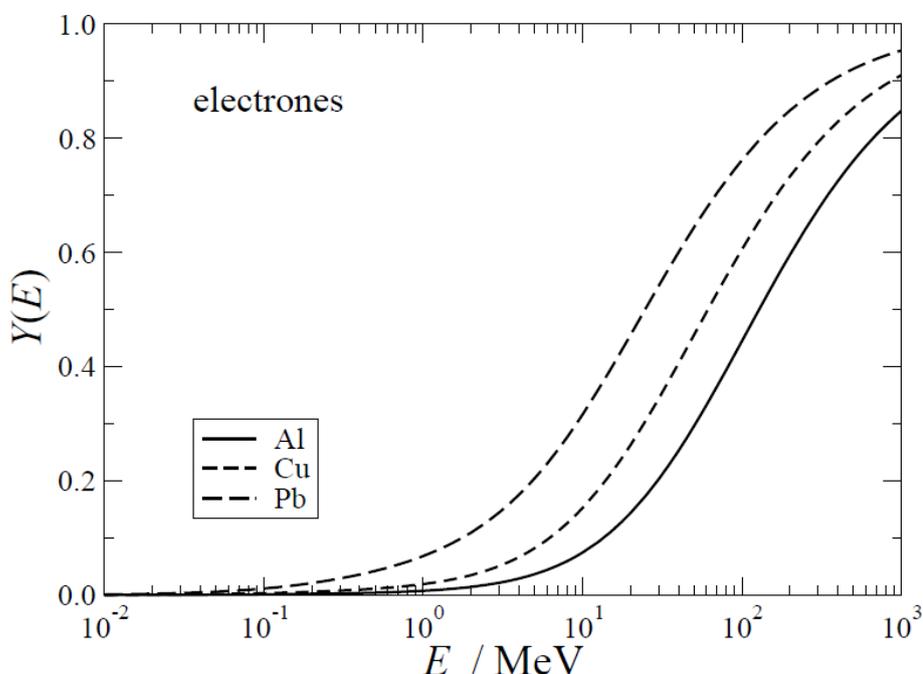


**Figura 2.20** Rango másico (en la aproximación de frenado continuo) de electrones, protones y partículas  $\alpha$  en Al, Cu y Pb.

**2.4.6.7. Rendimiento radiativo de electrones y positrones** El rendimiento radiativo  $Y(E)$  es la fracción de la energía inicial  $E$  de un electrón (o positrón) que es convertida en Bremsstrahlung durante su frenado. En la aproximación de frenado continuo está dado por:

$$Y(E) = \frac{1}{E} \int_0^E \frac{S_{rad}(E')}{S_{col}(E') + S_{rad}(E')} dE' \quad (2.112)$$

Tablas con los rendimientos radiativos de todos los elementos pueden encontrarse en literatura; los mismos valores pueden generarse con el programa *estar*. La Figura 2.21 muestra que  $Y(E)$  de electrones varía entre 0 y valores cercanos a 1, aumentando con la energía, y siendo mayores para los materiales de número atómico elevado. Esto último es debido a que aproximadamente  $S_{col} \propto Z_2$ , mientras que  $S_{rad} \propto Z_2^2$ .



**Figura 2.21** Rendimiento radiativo de electrones en Al, Cu y Pb en función de la energía.

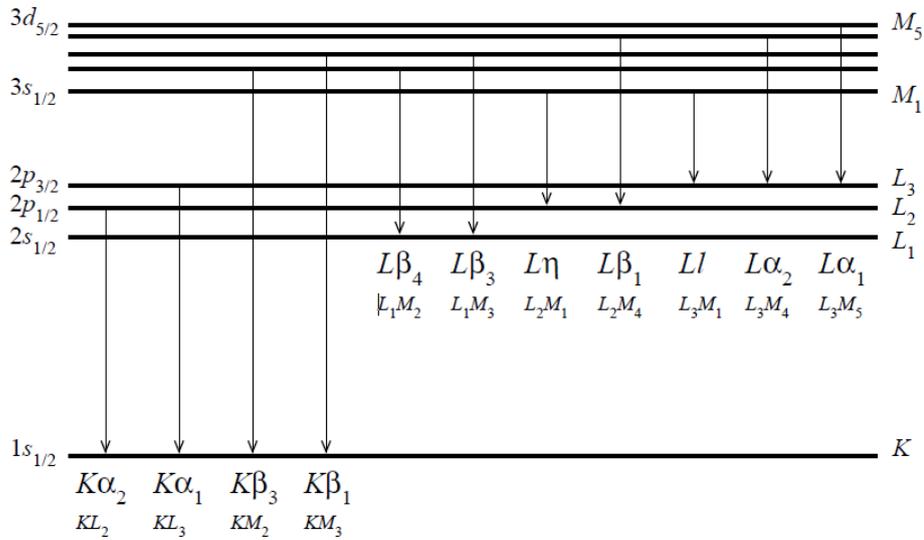
## 2.5. Radiación fluorescente: rayos X característicos y electrones Auger

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

**2.5.0.1. Rayos X característicos** Si la vacante en la capa atómica interna se “llena” con un electrón proveniente de capas menos ligadas y la diferencia de energías se emite en forma de un

fotón (rayo X característico), la transición se denomina radiativa. Las transiciones que respetan las reglas de selección  $\Delta\ell = \pm 1$  y  $j = 0, \pm 1$  están “permitidas” (a primer orden de teoría de perturbaciones) y son muy probables; de lo contrario están fuertemente inhibidas (son “prohibidas”). La energía del fotón vendrá dada aproximadamente por  $E_X \approx U_X - U_Y$ , donde  $X$  es la (sub)capa donde se produjo la vacante e  $Y$  la (sub)capa de la que proviene el electrón que realiza la transición, respectivamente.

Las notaciones clásica (de Siegbahn) y moderna (IUPAC) de los rayos X característicos se indican en la Figura 2.22 para las principales líneas  $K$  y  $L$ .



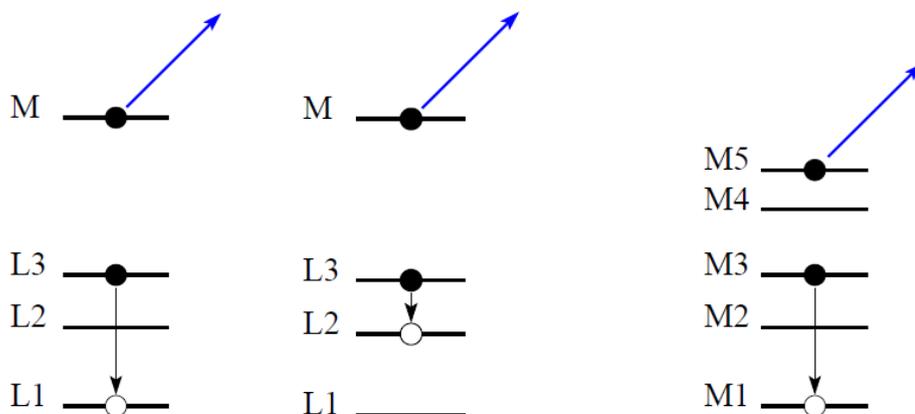
**Figura 2.22** Notaciones de Siegbahn e IUPAC de los rayos X característicos de las líneas  $K$  y  $L$  más importantes.

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

### 2.5.1. Electrones Auger

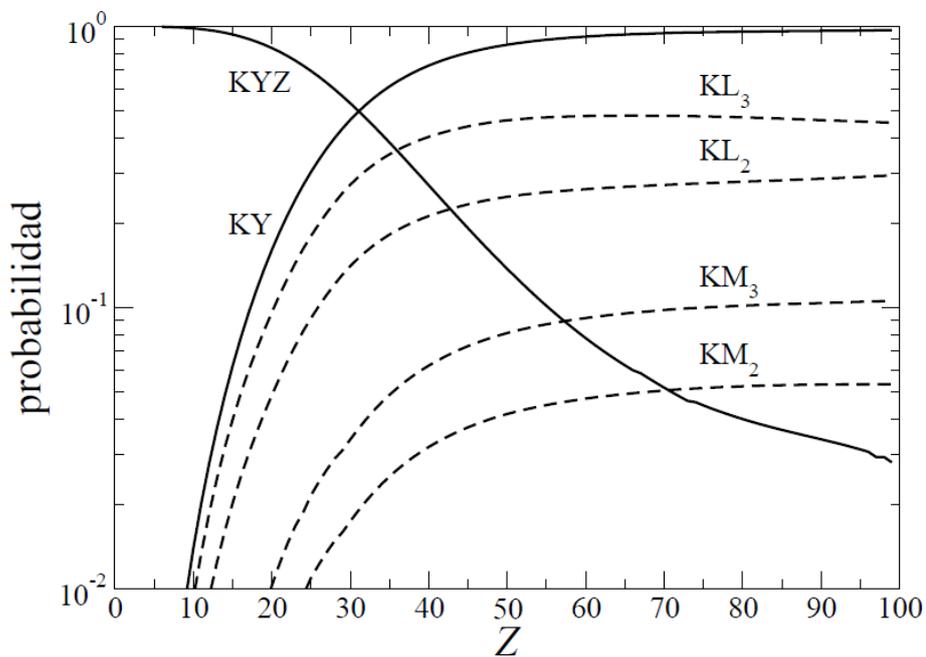
En algunos casos la energía del electrón que efectúa la transición de  $Y$  a  $X$  se entrega a otro electrón, inicialmente en la subcapa  $Z$  que es liberado con energía cinética  $\epsilon_e \approx U_X - U_Y - U_Z$ . La emisión de electrones Auger es por tanto un proceso no radiativo. Por razones históricas, cuando la transición la efectúa un electrón de la misma capa en la que está la vacante original, el proceso se denomina Coster-Kronig. Si el electrón liberado también es de la misma capa, el proceso se llama super Coster-Kronig (ver los ejemplos de la Figura 2.23). Después de una transición no radiativa el átomo queda con una vacante más.

La Figura 2.24 muestra las probabilidades de las transiciones no radiativas (KYZ) y radiativas (KY) que ocurren tras producirse una vacante en la capa  $K$ , *i.e.*  $a_K$  y  $w_K$ , respectivamente. Como



**Figura 2.23** Ejemplos de transiciones Coster-Kronig  $L_1L_3M$ ,  $L_2L_3M$  y super Coster-Kronig  $M_1M_3M_5$ .

puede verse, la emisión de electrones Auger predomina para números atómicos bajos, mientras que para valores de  $Z$  intermedios o grandes es más probable la emisión de rayos X característicos, sobre todo  $K_{\alpha 1}$ . Las probabilidades han sido extraídas de la base de datos EADL.



**Figura 2.24** Las curvas continuas representan las probabilidades de las transiciones no radiativas (KYZ) y radiativas (KY) consecuencia de una vacante en la capa  $K$ , mientras que las curvas a trazos indican las transiciones radiativas más probables ( $KL_2$ ,  $KL_3$ ,  $KM_2$  y  $KM_3$ ).

**2.6. Interacción de los neutrones con la materia: Conceptos básicos**

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

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

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

**Cuadro 2.1** Denominación de los neutrones.

Análogamente al caso de los fotones, un haz de neutrones monoenergéticos bien colimado se atenúa siguiendo la denominada ley de atenuación exponencial. El coeficiente de atenuación másico también se define mediante la ecuación 2.63, aunque ahora  $\sigma_i$  son las secciones eficaces de los distintos mecanismos de interacción de los neutrones.

**2.6.1. Scattering elástico de  $n^0$**

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

$$\frac{E_0}{E} = \frac{A^2 + 1 + 2A \cos(\theta_{cm})}{(A + 1)^2} \tag{2.113}$$

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

$$\left(\frac{E_0}{E}\right)_{mín} = \left(\frac{A - 1}{A + 1}\right)^2 \equiv \alpha \tag{2.114}$$

En consecuencia los valores permitidos de  $E/E_0$  están comprendidos en el intervalo  $(\alpha, 1)$ . Obsérvese que cuando la dispersión tiene lugar con un átomo de hidrógeno ( $A = 1$ ), el neutrón

puede ceder toda su energía al protón pues  $\alpha = 0$  (lo mismo sucede en un choque frontal de dos bolas de billar de igual masa). En general, los mejores moderadores de neutrones son sustancias con  $A$  bajo (hidrógeno, deuterio, agua, agua pesada, grafito, parafina, etc).

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

$$dp = \frac{d\Omega_{cm}}{4\pi} = \frac{2\pi \operatorname{sen}(\theta_{cm}) d\theta_{cm}}{4\pi} \quad (2.115)$$

Derivando la expresión 2.113:

$$\frac{dE}{dE_0} = \frac{2A}{(A+1)^2} \operatorname{sen}(\theta_{cm}) d\theta_{cm} \quad (2.116)$$

Y combinando las dos últimas ecuaciones, se obtiene:

$$p_1(E) \equiv \frac{dp}{dE} = \frac{(A+1)^2}{4A} \frac{1}{E_0} = \frac{1}{(1-\alpha)E_0} \quad (2.117)$$

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

La Figura 2.25 muestra las distribuciones  $p_n(E)$  de neutrones cuya energía inicial es de 1 MeV tras experimentar entre 1 y 10 colisiones elásticas con núcleos de  $^{12}\text{C}$ .

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

$$\begin{aligned} \xi(E) &\equiv \left\langle \ln \left( \frac{E_0}{E} \right) \right\rangle = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{cm} \ln \left[ \frac{(A+1)^2}{A^2 + 1 + 2A \cos(\theta_{cm})} \right] \\ &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos(\theta_{cm})) \ln \left[ \frac{(A+1)^2}{A^2 + 1 + 2A \cos(\theta_{cm})} \right] \end{aligned} \quad (2.118)$$

El resultado de esta integral es:

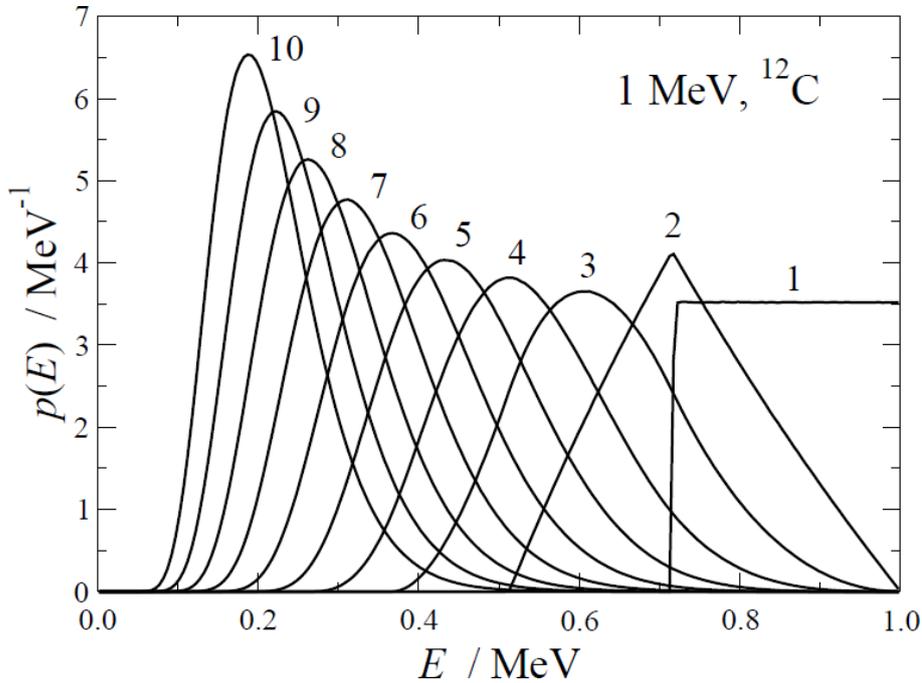
$$\xi(E) = 1 + \frac{(A-1)^2}{2A} \ln \left( \frac{A-1}{A+1} \right) = 1 + \frac{\alpha \ln(\alpha)}{1-\alpha} \quad (2.119)$$

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

$$\ln(E) = \ln(E_0) - \bar{n}\xi \quad (2.120)$$

De donde se obtiene:

$$\bar{n} = \xi^{-1} \ln(E_0/E) \quad (2.121)$$



**Figura 2.25** Distribuciones de energía de neutrones después de 1, 2,  $\dots$ , 10 colisiones elásticas con núcleos de  $^{12}\text{C}$  ( $\alpha = 0.716$ ). La energía inicial es  $E_0 = 1$  MeV.

### 2.6.2. Scattering inelástico, reacciones nucleares y captura radiativa de $n^0$

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

Los neutrones también pueden interactuar con los núcleos mediante un amplio abanico de reacciones nucleares. Los procesos con mayor probabilidad son las reacciones de tipo ( $n, p$ ), ( $n, \alpha$ ), ( $n, d$ ), etc, en las que el neutrón incidente arranca del núcleo blanco uno o más nucleones. Además son posibles reacciones ( $n, \gamma$ ), denominadas captura radiativa. Las secciones eficaces de estos procesos son en general proporcionales a  $v^{-1}$ , lo cual favorece tales mecanismos en el caso de neutrones con velocidad pequeña. A este comportamiento suave se le superpone un número variable de resonancias, intervalos de energía estrechos en los que la sección eficaz pasa por un máximo pronunciado. Estos picos están relacionados con la gran estabilidad del núcleo compuesto que se forma al ser absorbido el neutrón. Por último, la fisión nuclear por neutrones térmicos es viable para nucleidos con  $A$  muy elevado.

## **Bibliografía**