

ESPECIALIDAD I

INTERACCIÓN DE LA RADIACIÓN CON LA MATERIA

Parte 1: Fotones

Introducción

Si bien los electrones, neutrones, protones, etc. presentan características ondulatorias y tienen una longitud de onda asociada y, por otro lado, la radiación electromagnética exhibe también una naturaleza corpuscular, es usual (y lo haremos a lo largo de este curso) referirse a los primeros como “partículas” y a la segunda como “radiación”, aunque se presente explícitamente como una lluvia de fotones.

Los fotones son, efectivamente, partículas de masa en reposo nula cuya energía E y momento \mathbf{P} están relacionados a una onda de frecuencia ν y longitud de onda λ que viajan a la velocidad de la luz en el vacío c ($\lambda=c/\nu$) mediante las ecuaciones

$$E=h\nu; \quad \mathbf{P}=h\nu/c,$$

Donde h es la constante de Planck: $h=6,6256 \cdot 10^{-34}$ J. S

Los fotones se clasifican más por su origen que por su energía, por ejemplo, enumeraremos los siguientes tipos:

Radiación de radiofrecuencia (RF): se emiten a raíz de transiciones entre niveles atómicos y moleculares muy próximos entre sí. $E < 10^{-6}$ eV; $\lambda > 10$ cm.

Microondas: relacionadas con transiciones moleculares rotacionales. $10^{-5} < E(\text{eV}) < 10^{-3}$; $1 \text{ mm} < \lambda < 10$ cm.

Radiación infrarroja: Emitida por cuerpos “calientes” (radiación de cuerpo negro) y por transiciones moleculares vibracionales. $10^{-3} < E(\text{eV}) < 1$; $1 \mu\text{m} < \lambda < 1$ mm.

Luz visible y ultravioleta: Emitida por transiciones electrónicas entre niveles exteriores de átomos y moléculas. $1 \text{ eV} < E < 1 \text{ keV}$; $1 \text{ nm} < \lambda < 1 \mu\text{m}$.

Rayos x característicos: Producidos por transiciones electrónicas en capas atómicas internas. $100 \text{ eV} < E < 100 \text{ keV}$; $0,1 \text{ \AA} < \lambda < 100 \text{ \AA}$.

Radiación de frenado o Bremsstrahlung: Producidos por el frenado de partículas cargadas en el campo eléctrico de los núcleos atómicos. Se trata de un espectro continuo de energías, que van desde cero hasta la energía cinética de la partícula cargada.

Radiación de sincrotrón: Producidos por partículas cargadas que describen una órbita circular con velocidades relativistas. Se emiten fotones en un cono estrecho en la dirección de la velocidad de las partículas. La energía es muy variable, ya que depende de la energía de las partículas cargadas.

Rayos γ : Debidos a transiciones nucleares. $100 \text{ keV} < E$; $\lambda < 0,1 \text{ \AA}$.

Radiación de aniquilación: Se emite cuando se aniquila un electrón con un positrón. $1 \text{ MeV} < E$; $\lambda < 0,01 \text{ \AA}$.

Tipos de interacción de fotones con la materia

Un fotón puede interactuar con:

1. electrones
2. núcleos
3. átomos o moléculas

de las siguientes maneras:

- a) absorción total ($h\nu \rightarrow 0$)
- b) dispersión elástica ($h\nu \rightarrow h\nu$)
- c) dispersión inelástica ($h\nu \rightarrow h\nu'$)

Algunos ejemplos de interacción son:

1.a) Efecto fotoeléctrico

Un fotón con energía $h\nu > E_c$ puede arrancar un electrón ligado a un átomo con energía E_c . La subsiguiente desexcitación puede dar lugar a rayos x característicos. El proceso puede esquematizarse como $h\nu + A \rightarrow e^- + A^+$, donde con A se denota el átomo.

1.a) Fotoexcitación

Un fotón puede ser absorbido por un electrón atómico si aquél tiene la energía justa para elevar éste a un nivel energético superior. $h\nu + A \rightarrow A^*$, donde A^* indica un estado excitado del átomo A.

1.a) Bremsstrahlung inverso

Un electrón libre puede absorber un fotón aumentando su energía. $h\nu + e^- \rightarrow e^{-*}$, donde $*$ indica que ha aumentado la energía del electrón.

1.b) Dispersión Thomson

Es la dispersión elástica de un fotón por un electrón libre. Constituye el límite clásico y no relativista del efecto Compton; sólo se produce cuando $E_c \ll h\nu \ll m_0c^2$, donde m_0 es la masa en reposo del electrón. El límite inferior debe cumplirse para que el electrón atómico pueda considerarse como libre, mientras que el superior se debe a que este es un efecto no relativista. $h\nu \rightarrow h\nu$ con cambio de dirección.

1.c) Efecto Compton

Como en el caso anterior, se asume que el electrón atómico es libre, es decir, su energía de ligadura E_c debe cumplir la condición $E_c \ll h\nu$. $h\nu + e^- \rightarrow h\nu' + e^{-*}$

2.a) Creación de pares

El fotón es absorbido en el campo eléctrico del núcleo y se produce un par electrón positrón, con energías cinéticas T_- y T_+ , respectivamente. Sólo puede producirse si $h\nu > 1,012 \text{ MeV} = 2m_0c^2$. $h\nu \rightarrow (T_- + m_0c^2) + (T_+ + m_0c^2)$

2.a) Fotodesintegración del núcleo

Es el análogo nuclear del efecto fotoeléctrico; la absorción ocurre cuando el fotón tiene energía suficiente para arrancar un neutrón o un protón del núcleo ($h\nu > 8 \text{ MeV}$). $h\nu + N \rightarrow n, p^+ + N^*$, donde con N se denota el núcleo.

2.b) Dispersión Thomson por núcleos

Es el análogo nuclear de la dispersión Thomson por electrones; es un efecto débil y difícil de observar. $h\nu \rightarrow h\nu$ con cambio de dirección.

2.c) Dispersión de resonancia nuclear

Consiste en la fotoexcitación de un nivel nuclear a costa de la energía del fotón absorbido. Posteriormente, cuando se desexcita el núcleo hacia un estado distinto del original se produce la emisión de otro fotón. $h\nu + N \rightarrow h\nu' + N^*$

3.a) Fotodisociación de moléculas

Cuando un fotón tiene energía suficiente, éste puede partir una molécula al entregar su energía en ella. $h\nu + M \rightarrow M_1 + M_2$, donde con M se denota la molécula.

3.b) Dispersión de Rayleigh

Es la dispersión coherente de radiación electromagnética por el conjunto de electrones ligados a un átomo. Se produce cuando $h\nu \ll E_c$, es decir, cuando los electrones están “bien” ligados. $h\nu \rightarrow h\nu$ con cambio de dirección.

3.c) Dispersión Raman

Este proceso puede considerarse en dos etapas: 1. Un fotón es absorbido en un átomo o molécula que inicialmente está en un estado rotacional-vibracional A; la molécula es excitada a un estado virtual. 2. La molécula se desexcita a otro estado rotacional-vibracional B distinto del inicial emitiendo un fotón de energía diferente al absorbido. Si $A < B$, $h\nu > h\nu'$ (dispersión Stokes) y si $A > B$, $h\nu < h\nu'$ (dispersión anti-Stokes). $h\nu + M \rightarrow h\nu' + M^*$

En este curso se tratará en detalle el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton y la creación de pares y se hará un comentario breve sobre la dispersión Thomson y la dispersión Rayleigh.

Sección eficaz

Desde el punto de vista corpuscular, la sección eficaz es una magnitud relacionada con la probabilidad de que ocurra una interacción, es decir, con la razón entre el número n de fotones que interactuaron y el número n_o de fotones que incidieron. Resulta de interés contar con una magnitud que refleje exclusivamente la probabilidad de un dado proceso y sea independiente de la cantidad de centros dispersores presentes en el medio material donde éste tiene lugar, por este motivo se define la sección eficaz σ de un proceso determinado como:

$$\sigma = \frac{n}{n_o} \frac{1}{n_c/A}$$

donde n_c/A es el número de centros dispersores del blanco por unidad de área. Vemos que con esta definición se cumple que $[\sigma] = \text{cm}^2/\text{n}^o$ de centros dispersores. Es útil introducir una unidad acorde con la escala de los procesos de interacción atómicos: el barn = 10^{-24} cm^2 .

Una forma de visualizar la sección eficaz es asociar la superficie σ a cada partícula dispersora del blanco; cuanto más grande sea el área, mayor será la probabilidad de que un fotón incidente choque contra ella, es decir, interactúe.

Si son varios los tipos de interacción posibles, el número n de fotones que interactuaron y por lo tanto σ , constarán de otros tantos sumandos:

$$\sigma = \frac{1}{n_o} \sum_i \frac{n_i}{n_{Ci}/A}$$

donde n_i es el número de fotones que sufrieron una interacción del tipo i , por ejemplo Compton y n_{Ci} es el número de centros dispersores relevantes para el proceso i , por ejemplo electrones.

La probabilidad por centro dispersor por unidad de área de que ocurra una determinada dispersión hacia cierto ángulo particular θ , por unidad de ángulo sólido Ω alrededor del ángulo θ , se denomina sección eficaz diferencial por unidad de ángulo sólido: $\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\theta}$

$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$ es la sección eficaz total del efecto considerado.

Dispersión Thompson

J. J. Thomson descubrió el electrón en 1897 y explicó la dispersión de rayos x al incidir sobre un medio material, como la interacción clásica y no relativista entre la onda electromagnética incidente y los electrones atómicos, que se consideran libres. Según esta aproximación clásica, el electrón que es afectado por la onda electromagnética comienza a oscilar con la frecuencia de aquélla. A raíz de estas oscilaciones, como se trata de una partícula cargada acelerada, irradia a su vez radiación de la misma frecuencia que la original. La sección eficaz diferencial por unidad de ángulo sólido es el cociente de la energía radiada por unidad de ángulo sólido sobre la energía incidente por unidad de área. En el caso en que la radiación incidente no está polarizada, este cociente resulta ser:

$$\frac{d\sigma_{Th}}{d\Omega} = \frac{r_o^2}{2} (1 + \cos^2 \theta), \text{ donde } r_o = \frac{e^2}{m_o c^2} \text{ es el llamado radio clásico del electrón.}$$

Una integración elemental conduce a la sección eficaz total de Thomson (compruébelo):

$$\sigma_{Th} = \frac{8\pi}{3} r_o^2$$

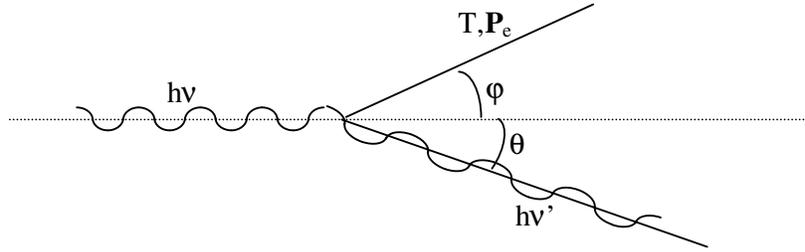
Vemos que σ_{Th} no depende de la energía; de todas maneras, esta expresión funciona razonablemente cuando se cumple $Ec \ll h\nu \ll m_o c^2$, ya que si $h\nu \sim Ec$, falla la hipótesis de electrón libre y si $h\nu \sim m_o c^2$ falla la aproximación no relativista en la expresión para el campo eléctrico del electrón oscilante.

Efecto Compton

Aquí también se hace la aproximación de electrón libre, inicialmente en reposo, es decir que se ignora la influencia del átomo que contiene a dicho electrón.

Recordemos que la masa de una partícula relativista puede expresarse como $m = m_o \gamma$, con $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$ y $\beta = v/c$, donde v es la velocidad de la partícula; por otra parte, la energía de dicha partícula, que en nuestro caso será un electrón, se expresa como $E_e = mc^2 = T + m_o c^2$, donde T corresponde a la energía cinética. Por otro lado, el momento está dado por $\mathbf{P}_e = m\mathbf{v} = m_o \gamma \mathbf{v}$.

El efecto Compton puede esquematizarse de la siguiente manera:



A continuación una relación entre λ y λ' .

Por conservación de la energía:

$$E + m_0 c^2 = E' + m_0 \gamma c^2, \quad (1)$$

donde $E = hv$ es la energía del fotón incidente y $E' = hv'$ es la energía del fotón dispersado. Por otro lado,

$$P_e^2 = m_0^2 \gamma^2 v^2 = \frac{m_0^2 v^2}{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

Sumando a ambos miembros $m_0^2 c^2$,

$$P_e^2 + m_0^2 c^2 = \frac{m_0^2 v^2 + m_0^2 c^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)}{1 - \frac{v^2}{c^2}} = m_0^2 c^2 \gamma^2,$$

con lo cual,

$$E_e = m_0 \gamma c^2 = c \sqrt{P_e^2 + m_0^2 c^2}.$$

La ecuación (1) puede escribirse:

$$E + m_0 c^2 = E' + c \sqrt{P_e^2 + m_0^2 c^2},$$

de donde

$$P_e^2 + m_0^2 c^2 = \frac{1}{c^2} (E - E' + m_0 c^2)^2;$$

luego

$$P_e^2 = \frac{1}{c^2} (E^2 + E'^2 - 2EE') - 2E'm_0 + 2Em_0 \quad (2)$$

Por conservación del momento,

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}' + \mathbf{P}_e \Rightarrow P_e^2 = P^2 + P'^2 - 2\mathbf{P} \cdot \mathbf{P}'$$

Reemplazando el módulo del momento del fotón P por E/c y efectuando el producto escalar:

$$P_e^2 = \frac{1}{c^2} (E^2 + E'^2 - 2EE' \cos \theta) \quad (3)$$

Igualando (2) y (3):

$$-\frac{2EE' \cos \theta}{c^2} = -\frac{2EE'}{c^2} + 2(E - E')m_o$$

Despejando E-E':

$$E - E' = \frac{EE'}{m_o c^2} (1 - \cos \theta) \quad ,$$

$$\frac{1}{E'} - \frac{1}{E} = \frac{(1 - \cos \theta)}{m_o c^2} \quad (4)$$

Es decir,

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_o c} (1 - \cos \theta) \quad , \quad \text{corrimiento Compton}$$

Resulta útil relacionar la energía E' del fotón dispersado con la energía del fotón incidente medida en términos de la energía en reposo del electrón; para ello es necesario definir un parámetro $\alpha = E/(m_o c^2)$. A partir de (4) se tiene que:

$$\frac{1}{E'} = \frac{m_o c^2 + E(1 - \cos \theta)}{Em_o c^2} ;$$

luego,

$$E' = \frac{m_o c^2}{\frac{m_o c^2}{E} + 1 - \cos \theta} \quad ,$$

o bien

$$E' = \frac{m_o c^2}{1 - \cos \theta + 1/\alpha} \quad .$$

De aquí puede verse que para energías incidentes grandes comparadas con la energía en reposo del electrón, $E' = \frac{m_o c^2}{1 - \cos \theta}$, con lo cual se observa que para $\theta = \pi/2$ $E' = m_o c^2$, mientras que para $\theta = \pi$ (retrodispersión), $E' = m_o c^2/2$. Por otro lado, para $\theta = 0$, $E' = E$, es decir, el electrón sigue de largo sin interactuar.

Para la energía cinética T adquirida por el electrón tenemos que $T = E(1 - E'/E)$ poniendo la energía del fotón en función de la longitud de onda asociada y utilizando la expresión del corrimiento Compton,

$$T = E \left(1 - \frac{\lambda}{\lambda'}\right) = E \left\{1 - [1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^{-1}\right\} \quad ; \quad (5)$$

es decir:

$$T = E \frac{\alpha(1 - \cos \theta)}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \quad (6)$$

También puede ponerse T en función del ángulo φ que forma la dirección de viaje del electrón con respecto a la dirección del fotón incidente.

$$T = E \frac{2\alpha \cos^2 \varphi}{(1 + \alpha)^2 - \alpha^2 \cos^2 \varphi} \quad (7)$$

La demostración de la ecuación anterior queda como ejercicio (problema 1 de la guía 1).

La máxima transferencia de energía $T_{\text{máx}}$ se obtiene a partir de (6); haciendo la sustitución $u=1-\cos\theta$: $T = \frac{E\alpha}{\frac{1}{u} + \alpha}$; se observa que el máximo valor de T se obtiene

maximizando u , es decir haciendo $u=2$, o bien $\theta=\pi$: $T_{\text{máx}} = \frac{E}{1 + \frac{1}{2\alpha}}$.

Por otro lado, reescribiendo (7) como

$$T = E \frac{E2\alpha}{\frac{(1 + \alpha)^2}{\cos^2 \varphi} - \alpha^2},$$

se ve que el máximo ocurre cuando $\cos^2\varphi=1$, es decir:

$$T_{\text{máx}} = \frac{E2\alpha}{1 + 2\alpha + \alpha^2 - \alpha^2} = \frac{E}{1 + \frac{1}{2\alpha}}.$$

Con lo que recuperamos el valor obtenido anteriormente. El caso de máxima transferencia de energía corresponde a una retrodispersión del fotón ($\theta=\pi$) acompañada de una eyección del electrón hacia delante ($\varphi=0$), como ocurre en un choque de dos partículas clásicas.

Sección eficaz diferencial Compton

Hasta aquí hemos visto cuál es la relación entre la energía $h\nu'$ de un fotón dispersado por un electrón y el ángulo θ hacia el cuál se dirige el fotón, pero nada hemos dicho acerca de qué ángulos (o qué valores de $h\nu'$) son más probables. Para esto debemos considerar la sección eficaz diferencial angular Compton.

Klein y Nishina en 1928 aplicaron la teoría cuántica de Dirac del electrón para obtener resultados que tuvieran en cuenta los aspectos cuánticos y relativistas del proceso. Lo hicieron en tres etapas:

1. Obtuvieron $d\sigma/d\Omega$ para un haz polarizado de fotones dispersados según θ con un ángulo de polarización Θ con respecto al vector eléctrico de los fotones incidentes.
2. Integraron para todos los ángulos Θ de la radiación dispersada manteniendo θ fijo.
3. Consideraron radiación incidente no polarizada, agrupándola en dos componentes polarizadas ortogonalmente, cada una con la mitad de intensidad:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T + \frac{1}{2} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_N,$$

donde los subíndices T y N se refieren a las probabilidades de dispersión de las componentes del haz incidente polarizadas tangencial y normalmente al plano de dispersión, respectivamente.

El resultado final es:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_o^2}{2} \left(\frac{v'}{v} \right)^2 \left(\frac{v}{v'} + \frac{v'}{v} - \text{sen}^2 \theta \right).$$

Teniendo en cuenta que $v'/v = \lambda/\lambda' = [1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^{-1}$ (ver ecuación 5), la expresión anterior puede escribirse como

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{r_o^2}{2} \frac{1}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^2} \left[1 + \alpha(1 - \cos \theta) + \frac{1}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} - 1 + \cos^2 \theta \right] \\ \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{r_o^2}{2} \frac{1}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^2} \left[\frac{\alpha(1 - \cos \theta) + \alpha^2(1 - \cos \theta)^2 + 1}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} + \cos^2 \theta \right] \\ \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{r_o^2}{2} \frac{1}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^2} \left[1 + \cos^2 \theta + \frac{\alpha^2(1 - \cos \theta)^2}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \right] \quad (8) \end{aligned}$$

La expresión de Klein-Nishina en esta forma permite ver claramente que tiende a la fórmula de Thomson para bajas energías:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_o^2}{2} (1 + \cos^2 \theta) = \frac{d\sigma_{Th}}{d\Omega}$$

Se observa que, para bajas energías, la probabilidad de dispersión es máxima para $\theta=0$ y π y mínima para $\theta = \pi/2$ (ver fig. 1).

La fracción de energía dispersada por unidad de ángulo sólido y por número de centros dispersores por unidad de área $d\sigma_s/d\Omega$ es el producto de la fracción de fotones dispersados en ese ángulo por la fracción de energía que se lleva cada fotón:

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = \frac{h\nu'}{h\nu} \frac{d\sigma}{d\Omega} < \frac{d\sigma}{d\Omega} ;$$

entonces:

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = \frac{r_o^2}{2} \frac{1}{[1 + \alpha(1 + \cos \theta)]^3} \left[1 + \cos^2 \theta + \frac{\alpha^2(1 - \cos \theta)^2}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \right]$$

Sección eficaz total Compton

Integrando (8) se obtiene la sección eficaz total:

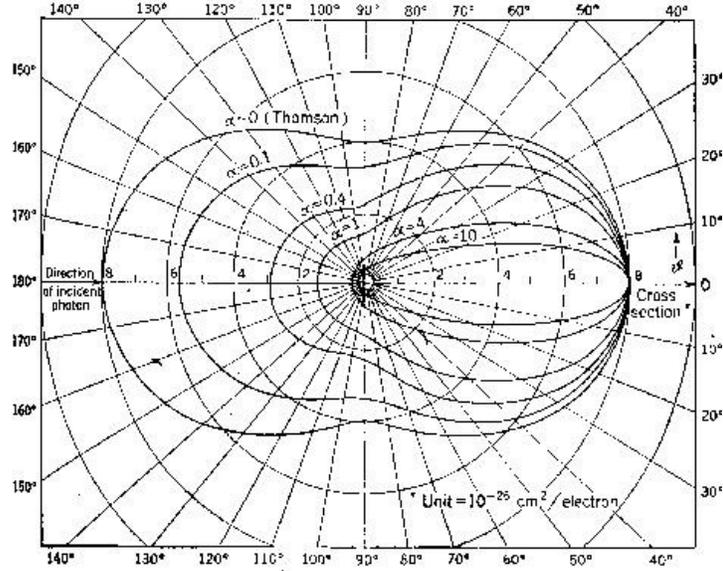


Figura 1. Sección eficaz diferencial angular $d\sigma/d\Omega$ para un ángulo de dispersión θ .

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi \sin\theta d\theta$$

De acuerdo con lo que ustedes obtendrán en el problema 3a) de la guía 1,

$$\sigma = 2\pi r_0^2 \left\{ \frac{1+\alpha}{\alpha^2} \left[\frac{2(1+\alpha)}{1+\alpha^2} - \frac{1}{\alpha} \ln(1+\alpha) \right] + \frac{1}{2\alpha} \ln(1+\alpha) - \frac{1+3\alpha}{(1+2\alpha)^2} \right\} \text{cm}^2/e$$

Para bajas energías, en la aproximación de primer orden en α , la expresión anterior conduce a

$$\sigma = \frac{8\pi r_0^2}{3} (1-2\alpha), \quad (9)$$

según se obtiene al resolver el problema 3b) de la guía 1.

Entonces, en el límite de bajas energías, la sección eficaz total Compton tiende a la sección eficaz total Thomson:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \sigma = \frac{8\pi}{3} r_0^2 = \sigma_{Th} = 0,66 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^2/e = 2/3 \text{ barn/e}$$

La sección eficaz total para la energía dispersada se define como

$$\sigma_s = \int \frac{d\sigma_s}{d\Omega} d\Omega = \int_0^\pi \frac{d\sigma_s}{d\Omega} 2\pi \sin\theta d\theta$$

Por el problema 4 a) de la guía 1 se obtiene:

$$\sigma_s = \pi r_0^2 \left[\frac{1}{\alpha^3} \ln(1+2\alpha) + \frac{2(1+\alpha)(2\alpha^3 - 2\alpha - 1)}{\alpha^2(1+2\alpha)^2} + \frac{8\alpha^2}{3(1+2\alpha)^3} \right].$$

Resolviendo el inciso b) del mismo problema se llega que para bajas energías incidentes, en primer orden de α :

$$\sigma_s = \frac{8\pi r_o^2}{3}(1 - 3\alpha) \quad (10)$$

Vemos de la expresión anterior que para bajas energías σ_s tiende a la expresión de la sección eficaz de Thomson. Esto significa que cuando $h\nu$ es pequeño la dispersión es elástica, es decir, el electrón no absorbe energía, o sea que cuando α tiende a cero, $\sigma_s = \sigma$.

La sección eficaz para la energía absorbida por el electrón está dada por la diferencia entre la sección eficaz total y la sección eficaz de la energía dispersada: $\sigma_a = \sigma - \sigma_s$. Entonces σ_s representa la fracción de la energía del haz de fotones incidente que interactuó por efecto Compton que es dispersada, es decir, que se llevan los fotones dispersados, mientras que σ_a es la fracción de energía que no se llevan los fotones, o sea, que se llevan los electrones. Los subíndices s (scattered) y a (absorbed) se refieren a que la energía que se llevan los fotones dispersados puede viajar “lejos” de la zona de la colisión, mientras que la que se llevan los electrones es depositada “cerca”. Desde un punto de vista más macroscópico, entonces, sólo la energía que se llevan los electrones es *absorbida* por el material, o por esa región del material, mientras que el resto es *dispersada* lejos.

Restando (9)-(10) vemos que para pequeños valores de α ,

$$\sigma_a = \frac{8\pi r_o^2}{3} \alpha \quad ,$$

Vemos que σ_a tiende a cero para bajas energías, lo que es otra forma de decir que en este caso estamos en un proceso de dispersión elástica o Thomson.

Distribución angular de fotones Compton

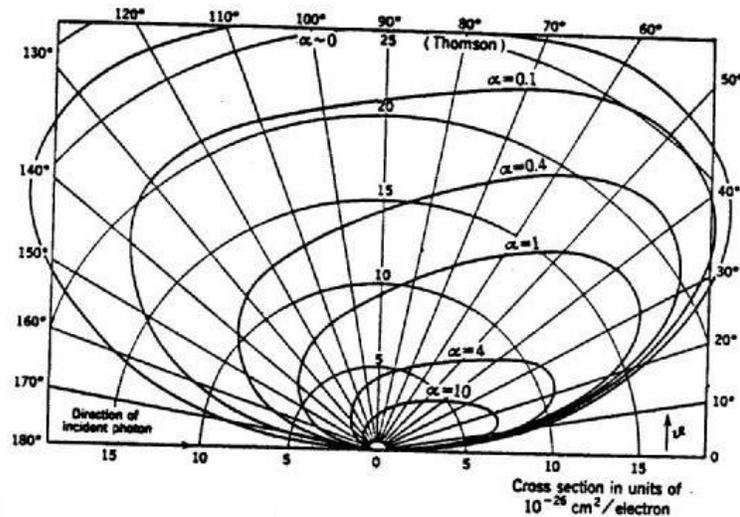


Figura 2. Sección eficaz diferencial $d\sigma/d\theta$ por ángulo para un ángulo de dispersión θ .

No es lo mismo la sección eficaz diferencial angular $d\sigma/d\Omega$ para un ángulo de dispersión θ que la sección eficaz angular $d\sigma/d\theta$ para el mismo ángulo, ya que $d\Omega=2\pi \text{sen}\theta d\theta$. Efectivamente,

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{d\Omega}{d\theta} = \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi \text{sen}\theta$$

De esta expresión se observa que aunque $d\sigma/d\Omega$ es máxima para θ igual a cero, $d\sigma/d\theta$ se anula, puesto que $\text{sen}\theta$ se anula (comparar las figuras 1 y 2).

Distribución angular de electrones Compton

Por cada fotón dispersado en $d\Omega=2\pi \text{sen}\theta d\theta$ hay un electrón dispersado en el ángulo sólido $d\Omega'=2\pi \text{sen}\varphi d\varphi$. Entonces,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta} d\Omega = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'}\right)_{\varphi} d\Omega'$$

Para averiguar la distribución angular de los electrones $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega'}\right)_{\varphi}$ es necesario utilizar la expresión conocida para la distribución angular de fotones $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta}$ y la relación entre los ángulos θ y φ , que según se demuestra en el problema 2 de la guía 1 está dada por:

$$\cot g\varphi = (1 + \alpha) \text{tg}\theta / 2 = (1 + \alpha) \frac{1 - \cos\theta}{\text{sen}\theta} \quad (11)$$

En efecto, la distribución angular de los electrones estará dada por

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega'}\right)_{\varphi} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta} \frac{d\Omega}{d\Omega'} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta} \frac{\text{sen}\theta d\theta}{\text{sen}\varphi d\varphi}. \quad (12)$$

Podemos encontrar $d\theta/d\varphi$ llamando $f(\varphi)=\cot g\varphi$ y $g(\theta)=(1+\alpha)(1-\cos\theta)/\text{sen}\theta$ en (11)

y recordando que $\frac{d\theta}{d\varphi} = \frac{df/d\varphi}{dg/d\theta}$:

$$\frac{df}{d\varphi} = -\frac{1}{\text{sen}^2\varphi} \quad \text{y} \quad \frac{dg}{d\theta} = (1 + \alpha) \frac{1 - \cos\theta}{\text{sen}^2\theta},$$

con lo cual, la ecuación (12) resulta

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega'}\right)_{\varphi} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta} \left(-\frac{1}{1 + \alpha}\right) \frac{\text{sen}\theta(1 + \cos\theta)}{\text{sen}^3\varphi}$$

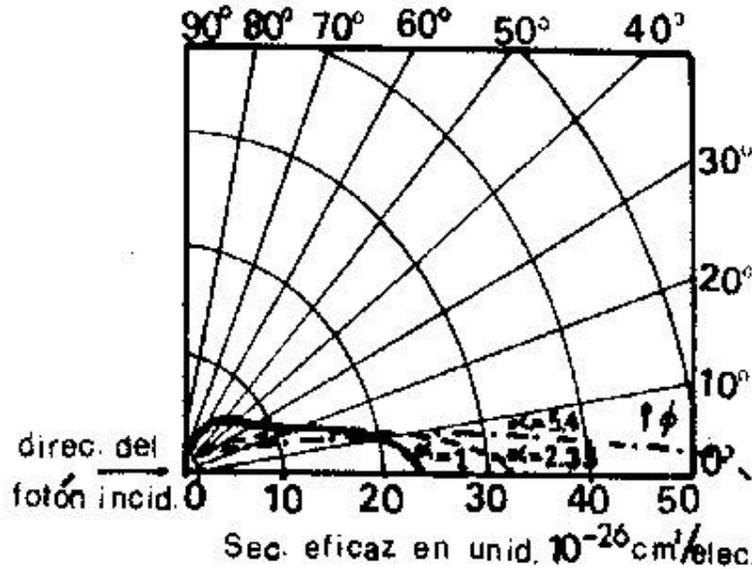


Figura 3. Sección eficaz diferencial angular $d\sigma/d\Omega'$ para electrones dispersados en un ángulo ϕ .

Esto representa la sección eficaz diferencial angular por unidad de ángulo sólido graficada en la figura 3; la distribución por unidad angular $d\sigma/d\phi$ está dada por

$$\left(\frac{d\sigma}{d\phi}\right) = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'}\right)_{\phi} \frac{d\Omega'}{d\phi},$$

es decir:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\phi}\right) = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta} \left(-\frac{2\pi}{1+\alpha}\right) \frac{\text{sen}\theta(1+\cos\theta)}{\text{sen}^2\phi}.$$

Expresando la ecuación anterior en términos del ángulo ϕ se obtiene la relación representada en la figura 4. De la observación de ambas figuras puede verse que si bien $d\sigma/d\Omega'$ es máxima $\phi=0$, para $d\sigma/d\phi$ se anula para ese ángulo. Además se aprecia que no existen electrones “retrodispersados”, es decir, dispersados en un ángulo mayor que 90° , lo que coincide con el caso de un choque clásico.

Distribución en energía de los electrones dispersados

La fracción de electrones dispersada con energía cinética T por intervalo de energía está dada por

$$\frac{d\sigma}{dT} = \frac{d\sigma}{d\phi} \frac{d\phi}{dT} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta} \left(-\frac{2\pi}{1+\alpha}\right) \frac{\text{sen}\theta(1+\cos\theta)}{\text{sen}^2\phi} \frac{d\phi}{dT} \quad (13)$$

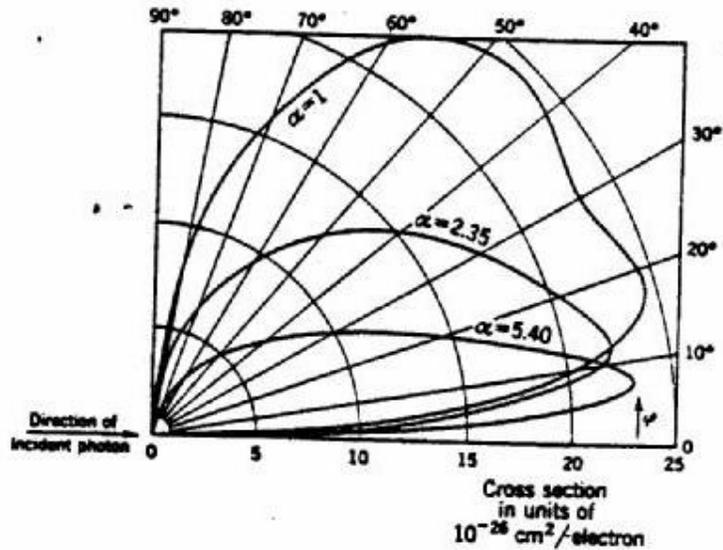


Figura 4. Sección eficaz diferencial $d\sigma/d\phi$ por ángulo para los electrones dispersados en ϕ .

A partir de la ecuación (7) puede obtenerse $\phi(T)$ y de allí $d\phi/dT$; por otra parte, a partir de (6) puede expresarse $\cos\theta$ en función de T ; efectuando los reemplazos correspondientes en (13) se obtiene la sección eficaz diferencial en energía $d\sigma/dT$ de los electrones en función de su energía cinética T . Esta relación se representa gráficamente en la figura 5.

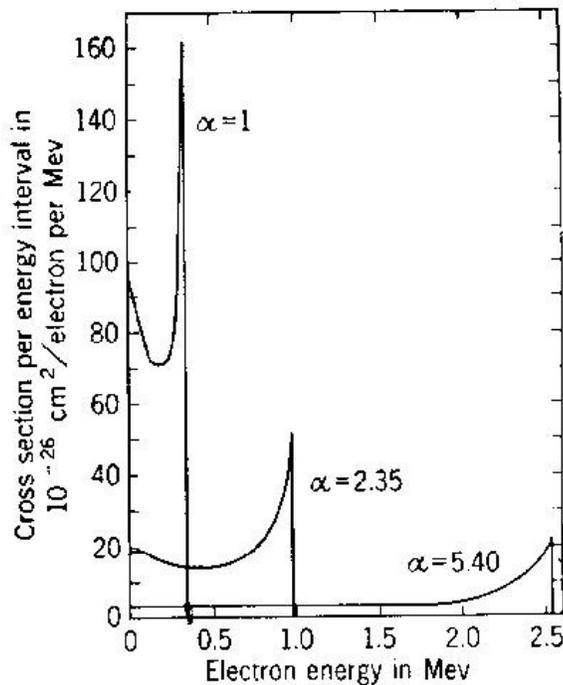


Figura 5. Sección eficaz diferencial en energía $d\sigma/dT$ para los electrones dispersados.

Se observa que la sección eficaz diferencial se anula a partir de cierto valor de T , puesto que como habíamos dicho antes, existe un valor máximo para T

$$T_{m\acute{a}x} = \frac{E}{1 + \frac{1}{(2\alpha)}}; \text{ efectivamente, los valores de corte en el gr\'afico corresponden a}$$

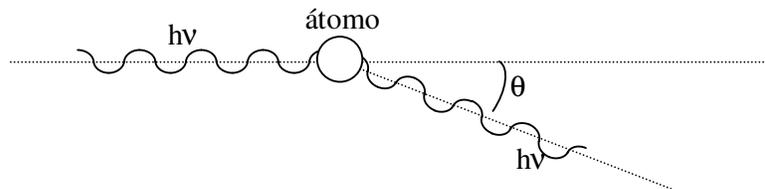
este valor de $T_{m\acute{a}x}$ para cada valor de α . Vemos tambi\en que si α tiende a cero $T_{m\acute{a}x}$ tiende a cero, es decir, llegamos al l\imita de la dispersi3n el\asticas de Thomson.

Como $h\nu' = h\nu - T$, puede obtenerse informaci3n acerca de la distribuci3n en energ\ia de los fotones dispersados utilizando los gr\'aficos de la figura 5.

Nota: puesto que la dispersi3n Compton es producida por electrones "libres", la secci3n eficaz correspondiente es una secci3n eficaz electr3nica o por electr3n y suele expresarse como σ_e .

Dispersi3n Rayleigh o coherente

El fot3n interactúa con los electrones ligados a un \atomo. El \atomo no es ionizado ni excitado y el fot3n no cambia su energ\ia sino s3lo su direcci3n de viaje.



Este tipo de dispersi3n se produce cuando $h\nu \ll E_c$, o sea, cuando los electrones est\an fuertemente ligados en comparaci3n con la energ\ia del fot3n incidente. Todos los electrones del \atomo actúan como centros dispersores de manera coherente, es decir, la componente de la onda dispersada por cada uno de ellos guarda la misma diferencia de fase respecto de la onda incidente.

La secci3n eficaz diferencial angular est\ada dada por

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} (1 + \cos^2 \theta) f^2 = \frac{d\sigma_{Th}}{d\Omega} f^2 ,$$

donde $f=f(h\nu, \theta, Z)$ (Z es el n\umero at3mico) es el factor de forma at3mico y est\arelacionado con la densidad electr3nica del \atomo blanco.

Una característica de la dispersi3n Rayleigh es que, dentro del rango de energ\ias en que se observa, el cono de dispersi3n es peque\no para valores grandes de $h\nu$, mientras que para bajas energ\ias y particularmente para Z grandes ese cono aumenta su apertura considerablemente.

La secci3n eficaz total Rayleigh presenta, en primera aproximaci3n, el siguiente comportamiento:

$$\sigma_R \propto \frac{Z^2}{(h\nu)^2}$$

Est\ae expresi3n confirma lo dicho anteriormente, ya que muestra que el efecto es m\as intenso para $h\nu$ bajas y Z grandes, es decir, cuando el fot3n incidente "ve" m\as ligado a los electrones.

Nota: puesto que la dispersión Rayleigh es producida coherentemente por todos los electrones ligados a un átomo, la sección eficaz correspondiente es una sección eficaz atómica o por átomo y suele expresarse como $a\sigma_R$.

Efecto fotoeléctrico

Es una interacción de un fotón con los electrones atómicos que consiste en la absorción del fotón y la emisión de un electrón ligado que sale eyectado fuera del átomo (fotoelectrón). Habíamos visto que los fotones no pueden ser absorbidos cuando interactúan con un electrón libre (efecto Compton), ya que debido a la conservación de \mathbf{P} y E se obtiene que existe un valor máximo para la energía

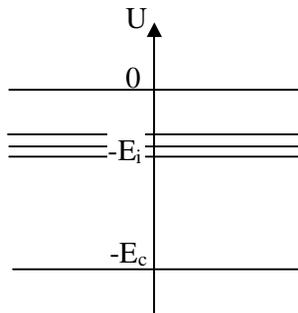
transferida $T_{máx}$, que es siempre menor que $h\nu$: $T_{máx} = \frac{h\nu}{1 + \frac{1}{2\alpha}}$.

Si el electrón, en cambio, está ligado, el átomo también participa en la conservación de \mathbf{P} y E . Básicamente, luego de la absorción del fotón, de energía $h\nu$ y momento $h\nu/c \hat{i}$, un electrón es eyectado con energía cinética T y momento \mathbf{P}_e en una dada dirección. El átomo ionizado retrocede con una dirección prácticamente puesta, pero con velocidad muy pequeña, de manera de conservar $\mathbf{P}_{total} = h\nu/c \hat{i}$. Esto se debe a que en general el momento del fotón es mucho menor que el del electrón \mathbf{P}_e y el del átomo \mathbf{P}_a , ya que éstos son partículas con masa en reposo no nula; por eso $\mathbf{P}_e + \mathbf{P}_a \cong 0$. Como ejercicio puede mostrarse que para una energía cinética de 1 keV el momento del electrón es unas 32 veces mayor que el del fotón.

Por otro lado, $P_a = MV_a$ y $P_e = MV_e$; entonces $V_a = (m/M)V_e \ll V_e$; es decir, debido a la gran masa M del átomo, alcanza con una velocidad de retroceso V_a despreciable para conservar el momento total; por lo tanto su energía cinética es prácticamente nula:

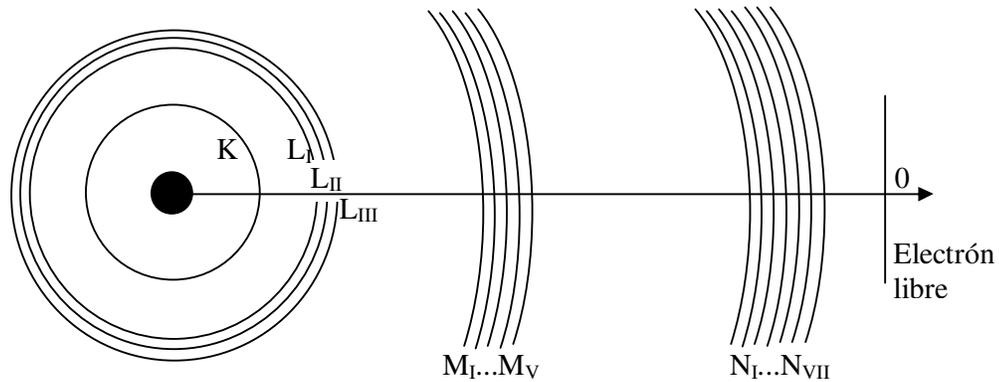
$$T_a = (MV_a^2)/2 = P_a V_a / 2 \ll P_e V_e / 2 = T_e$$

Entonces podemos suponer que la energía $h\nu$ del fotón es íntegramente utilizada para arrancar al electrón del átomo: $h\nu + U_0 = T$ (conservación de la energía). Fijando el cero del potencial de manera que para el electrón libre $U = 0$. Entonces, $U_0 = -E_c$, donde U_0 es la energía potencial del electrón en cuestión y E_c es su energía de ligadura.



Luego, $h\nu = T - U_0$, o bien: $h\nu = E_c + T$.

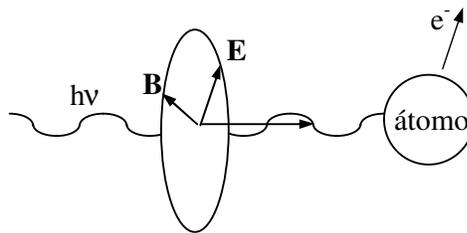
Este efecto, en el que toda la energía del fotón es transferida es, entonces, posible por la vinculación del electrón con el átomo. Por este motivo se hace más importante a medida que la energía de ligadura es mayor, es decir, en las capas más internas del átomo.



Aproximadamente el 80% de las interacciones fotoeléctricas se producen en la capa K. Esto siempre y cuando $h\nu > E_K$, es decir, cuando el fotón incidente tiene energía suficiente como para arrancar un electrón de dicha capa. Vemos, pues, que existe un “umbral” fotoeléctrico que debe exceder el fotón para que el efecto sea posible. En realidad, hay tantos umbrales como capas o subcapas atómicas pobladas.

Distribución angular de los fotoelectrones

Hay una tendencia de los fotoelectrones de baja energía a salir eyectados en la dirección del vector eléctrico del fotón incidente, o sea, en una dirección normal a la dirección de viaje del fotón. Esta tendencia es especialmente seguida cuando $h\nu$ es baja: $h\nu < 30$ keV, que es el rango de interés en algunas técnicas espectrométricas como fluorescencia de rayos x (FRX) y microanálisis con sonda de electrones (EPMA). Para altas energías los electrones tienden a salir más hacia adelante.



La distribución angular de los fotoelectrones viene dada por la sección eficaz diferencial angular $d\tau/d\Omega$, donde τ denota la sección eficaz total fotoeléctrica, que puede apreciarse en la figura 6. Otra forma de ver lo mismo es mediante el concepto de ángulo de bipartición α , que es el semiángulo de un cono dentro del cual salen dispersados la mitad de los fotoelectrones; en la figura 7 puede observarse que α crece cuando $h\nu$ decrece.

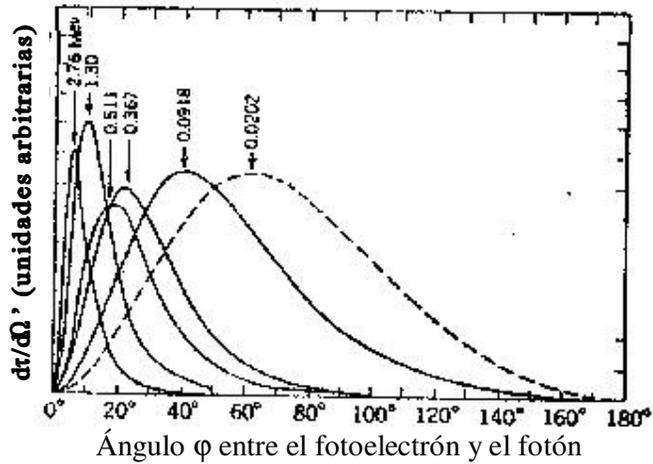


Figura 6. Sección eficaz diferencial angular fotoeléctrica $d\tau/d\Omega'$ por unidad de ángulo sólido.

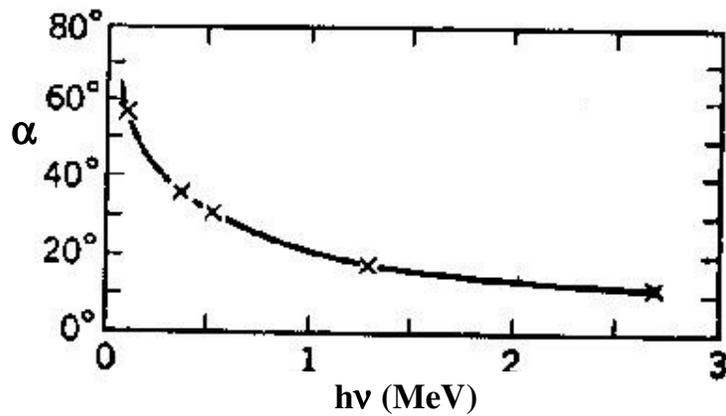


Figura 7. Ángulo de bipartición α en función de la energía del fotón.

Sección eficaz total fotoeléctrica

La sección eficaz fotoeléctrica τ o cualquiera de sus formas diferenciales $d\tau/d\phi$, $d\tau/d\Omega'$, es muy difícil de obtener a partir de cálculos teóricos; por este motivo los resultados de la teoría y de los experimentos deben apoyarse mutuamente. Como la deducción de expresiones para τ es muy compleja, no la abordaremos en este curso. Las características principales de τ son las siguientes:

- $\tau = \tau(Z, hv)$
- τ decrece con hv para un dado Z

Es decir, si aumentamos hv los fotones “pasan más de largo” disminuyendo la probabilidad de interacción. Esto ocurre hasta que hv alcanza el valor E_c de alguna capa atómica.

- τ crece abruptamente para $hv = E_c$ para cada capa o subcapa atómica debido a que para $hv < E_c$ el efecto fotoeléctrico no es posible para esa capa y para $hv > E_c$ sí lo es.

- Entre esos “bordes de absorción” E_c , el decrecimiento de $h\nu$ puede aproximarse por $\tau \propto (h\nu)^{-m}$ con $m=m(h\nu)$ ($1 \leq m \leq 3$).
- Para una misma capa atómica, E_c crece monótonamente con Z .
- Suponiendo que $h\nu > E_c$ para alguna capa en particular, y que esa condición se mantiene al aumentar Z , τ crece con Z como Z^n con $4 < n < 4,6$.

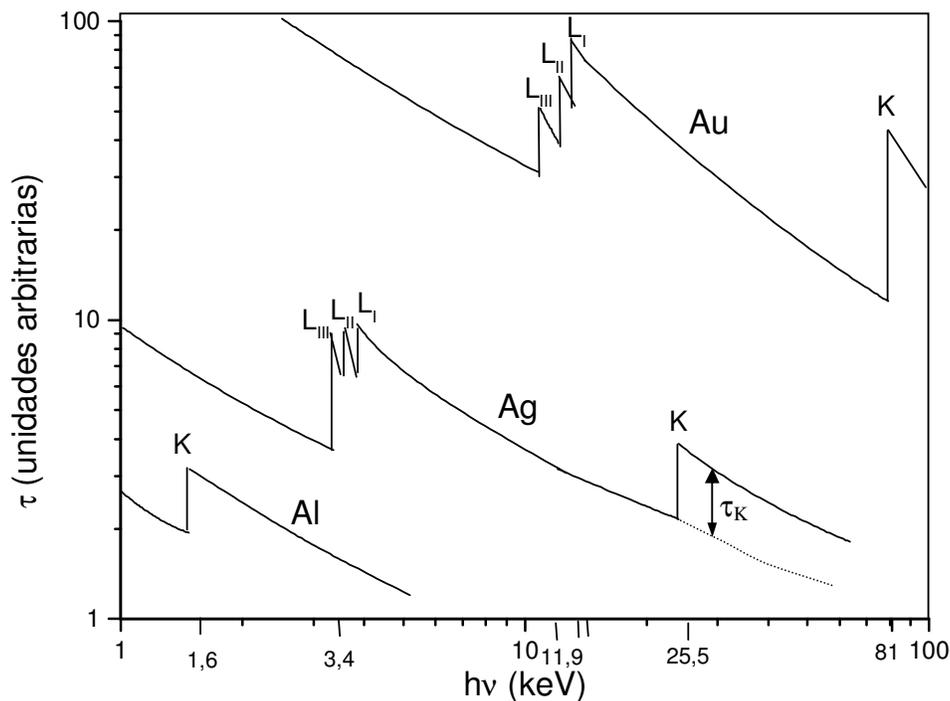


Figura 8. Sección eficaz fotoeléctrica en función de la energía del fotón incidente para Al, Ag y Au.

En la figura 8 se presenta un gráfico cualitativo de τ en función de $h\nu$ donde se ven reflejadas las consideraciones precedentes.

Se llama τ_K a la sección eficaz fotoeléctrica debida sólo a la capa K. En la figura 8 se muestra gráficamente su significado. Se cumple aproximadamente que $\tau_K = 4/5\tau$, siempre que $h\nu > E_K$; de lo contrario, se cumple que $\tau_{dom} = 4/5\tau$, donde τ_{dom} representa la contribución a τ de la capa atómica más ligada cuya energía de ligadura sea menor que $h\nu$.

Consideraciones sobre la deducción de τ

Las teorías empleadas para la obtención de expresiones para τ parten de las siguientes hipótesis:

- El átomo blanco está aislado. Esto significa que se desprecia la influencia de enlaces moleculares y cristalinos. Es muy buena aproximación para los electrones más ligados, donde es más probable el efecto fotoeléctrico.

- El átomo aislado es neutro y está en su estado fundamental.
- El potencial atómico es central. Es decir, se supone que $U=U(r)$. Esta hipótesis claramente se cumple para el átomo de hidrógeno. Si hay más electrones presentes que repelen al electrón que será eyectado se considera un promedio esférico de la distribución de carga que ejerce un apantallamiento radial sobre la atracción del núcleo.

Algunos resultados

- Stobbe (1930) obtuvo τ_K en un marco cuántico no relativista (ecuación de Schrödinger).
- Pratt y otros (1973) obtuvieron τ en un marco cuántico relativista (ecuación de Dirac) haciendo aproximaciones para obtener expresiones analíticas.
- Cullen y otros (1989) publicaron tablas de τ en base a resultados teóricos obtenidos por Saloman y otros (1988) y a datos experimentales medidos por Hubbell y otros (1980).
- Actualmente se aprovecha la capacidad de cálculo existente para evitar aproximaciones resolviendo numéricamente la ecuación de Dirac.

El grado de precisión alcanzado para los valores de τ depende de la energía del fotón incidente y del número atómico del blanco; así, los resultados obtenidos por Pratt y otros tienen una precisión del orden de:

	$h\nu \leq 1,5 \text{ MeV}$	$1,5 \text{ MeV} \leq h\nu \leq 10 \text{ MeV}$
$Z \leq 50$	5%	10%
$Z > 50$	5%	20%

Estos resultados son razonablemente aplicables siempre, ya que para energías mayores que 1,5 MeV, donde se advierten mayores discrepancias, τ es despreciable frente a las secciones eficaces de otros efectos (Compton y creación de pares).

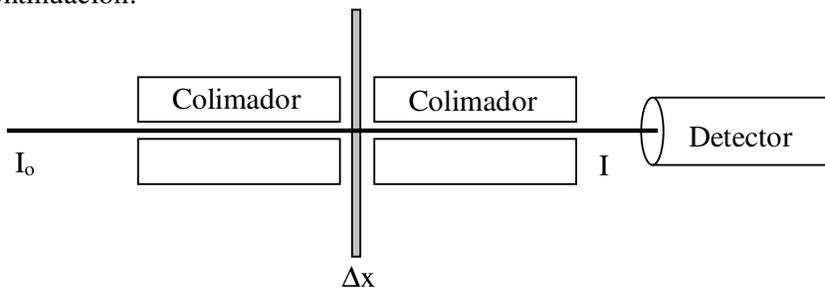
Determinaciones experimentales

Básicamente existen dos métodos experimentales para la determinación de τ :

Determinación de τ mediante la medición de la sección eficaz de atenuación total μ .

Se define la sección eficaz de atenuación total μ como la suma de las secciones eficaces de todos los efectos de interacción: $\mu = Z \sigma_e + \sigma_R + \tau + \dots$. Se ha multiplicado la sección eficaz Compton por el número atómico Z para poder sumar este efecto de tipo electrónico con los otros que son de tipo atómico.

En este método se mide la sección eficaz total μ mediante un dispositivo como el que se ilustra a continuación:



Como se verá más adelante, la intensidad I que resulta luego de la atenuación del haz de intensidad I_0 en la lámina de espesor Δx puede calcularse como $I=I_0\exp(-cte \mu \Delta x)$, donde la constante está relacionada con la densidad y el peso atómico del material interpuesto.

Si se conoce con precisión la sección eficaz de los otros efectos puede despejarse la sección eficaz fotoeléctrica: $\tau_a = \mu - Z \sigma - \sigma_R - \dots$. Este método también puede aplicarse cuando τ_a es mucho mayor que las otras secciones eficaces, es decir, para energías en el rango de los rayos x característicos. En este caso se cumple que $\tau_a \cong \mu$.

Determinación directa de τ

En realidad se mide el número de fotoelectrones y de allí se infiere τ . Por este método, además, se pueden determinar distribuciones angulares de los fotoelectrones, así como también contribuciones de las distintas subcapas, ya que $T=h\nu-E_c$. Los fotoelectrones se colectan mediante la aplicación de un campo eléctrico.

En general, por cualquiera de los dos métodos, se obtienen precisiones entre el 2% y el 10%.

Coeficientes τ_a y τ_s

Los fotoelectrones no se llevan toda la energía del fotón, sino $h\nu-E_c$. Es decir, se puede calcular la fracción de energía absorbida, análogamente a como se hizo en el caso de la dispersión Compton:

$$\tau_a = \frac{T}{h\nu} \tau \Rightarrow \tau_a = \frac{h\nu - E_c}{h\nu} \tau \quad (13)$$

La energía E_c es liberada por el átomo casi en su totalidad mediante la emisión de un fotón característico o de un electrón Auger, cuya energía es algo menor que E_c . De esta manera el átomo vuelve al estado original, pero una parte de la energía incidente (si se emite un fotón característico) abandona la región. Entonces, en realidad:

$$\tau_a = \frac{h\nu - h\bar{\nu}_{c,car} \omega_c}{h\nu} \tau, \quad (14)$$

donde $h\bar{\nu}_{c,car} < E_c$ es la energía del fotón característico promediada sobre los distintos decaimientos posibles hacia la capa c y ω_c es el coeficiente de producción de fluorescencia de la capa c , es decir, la probabilidad de que la capa c sea llenada mediante la emisión de un fotón característico y no de un electrón Auger. Por lo tanto, la expresión (13) no considera que parte de E_c finalmente se transfiere a electrones (Auger), mientras que la ecuación (14) sí lo tiene en cuenta. Además habría que tener en cuenta que si los fotones incidentes pueden excitar varias capas, los valores de $h\bar{\nu}_{c,car}$ y ω_c varían de capa a capa. De las expresiones (13) ó (14) queda claro que para valores grandes de $h\nu$, $\tau_a \cong \tau$ y entonces $\tau_s \cong 0$.

Líneas de emisión

Supongamos que luego de una absorción fotoeléctrica, un átomo eyecta un electrón ligado a la capa K con una energía de ligadura E_K . Esto implica que el átomo pasó a un estado energético aumentando su energía en E_K , que es la parte de la energía del fotón incidente que no se llevó el fotoelectrón. Si ahora la vacancia es llenada por un electrón

que estaba en la capa L, con energía de ligadura E_L , el átomo disminuye su energía pasando a un estado con una vacancia en dicha capa. La diferencia de energía entre los dos estados, puede ser emitida como un fotón de energía $h\nu_{\text{car}}=E_K-E_L$. Este fotón recibe el nombre de fotón o rayo x característico $K\alpha$. Si el hueco en la capa K hubiera sido llenado mediante un electrón de la capa M, con energía de ligadura E_M , la energía del fotón emitido habría sido $h\nu_{\text{car}}=E_K-E_M$. Este fotón característico se denomina $K\beta$.

También podría haberse producido originalmente un efecto fotoeléctrico en la capa L. En este caso los fotones característicos emitidos son del tipo L ($L\alpha$, $L\beta$, etc., dependiendo desde qué capa atómica es llenada la vacancia). En realidad, las posibilidades son muchas, ya que hay una capa K, tres capas L, cinco capas M, siete capas N, etc., aunque algunas transiciones no están permitidas (o son mucho menos probables) por las llamadas reglas de selección (ver más adelante).

Se observa que para una transición particular, la energía del fotón característico es una función creciente de Z :

$$h\nu = b(Z - a)^2,$$

donde a y b son constantes propias de cada transición. La relación anterior es conocida desde 1913 como ley de Moseley. Como caso particular, para la línea $K\alpha$ se cumple que

$$h\nu_{K\alpha} = \frac{3}{4} R c (Z - 1)^2,$$

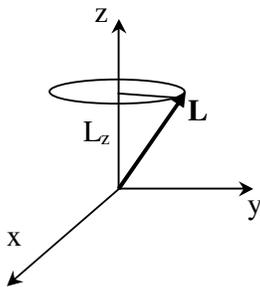
donde $R = m_e e^4 / (8 c \epsilon_0^2 h^3) = 109,737 \text{ cm}^{-1}$ es la constante de Rydberg (c es la velocidad de la luz en el vacío y ϵ_0 , su permitividad). Esta expresión comienza a fallar para números atómicos altos.

Orbitales atómicos y reglas de selección

Para comprender el origen y la naturaleza de los distintos niveles de energías de un átomo y las reglas de selección entre las diferentes transiciones, es necesario recordar que dichos niveles son los autovalores E_n de la ecuación de Schrödinger:

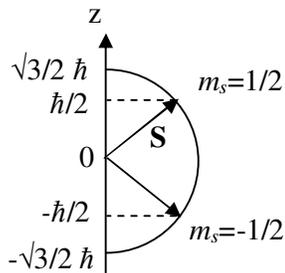
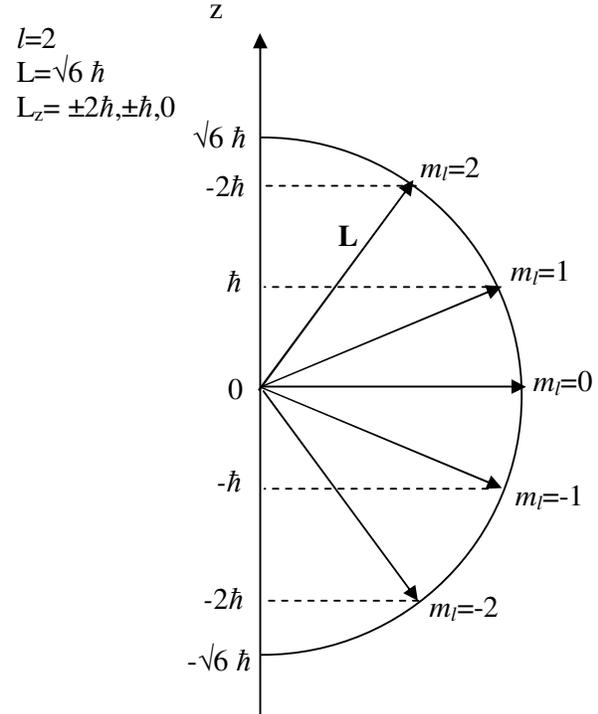
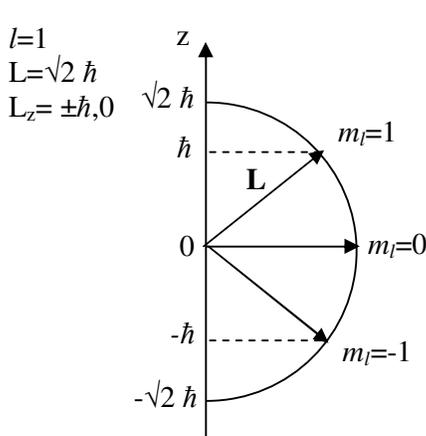
$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\vec{r})\psi = E\psi,$$

donde H es el operador hamiltoniano, $\hbar = h/(2\pi)$, V es la energía potencial del sistema y ψ , la función de onda del electrón. Para un campo central coulombiano sin considerar efectos relativistas, los niveles de energía están cuantizados siendo los autovalores del operador H , $E_n \propto -1/n^2$, donde $n=1,2,3,\dots$ se denomina número cuántico principal.



El vector impulso angular orbital \mathbf{L} del átomo también está cuantizado; en particular su módulo debe cumplir que: $L^2 = l(l+1)\hbar^2$, donde $0 \leq l \leq n-1$; l se denomina número cuántico de momento angular orbital. No es posible conocer simultáneamente las tres componentes del momento angular orbital: si se conoce el módulo L y una de las componentes (por ejemplo L_z), se desconocen las otras dos (por ejemplo L_x y L_y). Además de la cuantización en módulo hay cuantización en dirección: $L_z = m_l \hbar$, donde el número cuántico magnético m_l debe cumplir que $0 \leq m_l \leq l$.

La relación entre el módulo del momento angular orbital y su componente L_z puede verse esquematizada en la siguiente figura para los casos $l=1$ y $l=2$.

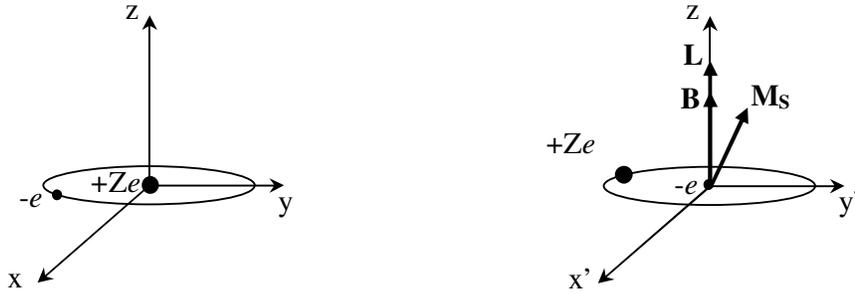


Por otra parte, el electrón tiene un momento angular de espín \mathbf{S} , que también está cuantizado: su módulo es fijo, $S = \sqrt{3/2} \hbar$, mientras que hay dos posibilidades para la componente z :

$S_z = \pm 1/2 \hbar$, o bien, $S_z = \pm m_s \hbar$, donde m_s es el número cuántico de espín.

Sumando vectorialmente los momentos angulares orbital y de espín se obtiene el momento angular total \mathbf{J} , que como consecuencia de la cuantización de sus dos componentes, también está cuantizado: $J^2 = j(j+1) \hbar^2$, donde $j = |l \pm 1/2|$.

Al considerar correcciones relativistas y también, al tener en cuenta el apantallamiento (radial) de los restantes electrones que hace que el campo no sea coulombiano, los niveles de energía no dependen sólo del número cuántico principal n , sino que también dependen de l . Por otro lado, el momento angular de espín \mathbf{S} del electrón trae aparejado un momento magnético $\mathbf{M}_S \parallel \mathbf{S}$. Visto desde el electrón, el núcleo de carga $+Ze$ gira alrededor del electrón, generando un campo magnético $\mathbf{B} \parallel \mathbf{L}$.



La energía del electrón debida a esta interacción espín-órbita es proporcional a $\mathbf{M}_S \cdot \mathbf{B}$, es decir, proporcional a $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$, por lo tanto, los niveles de energía pueden escribirse como

$E = E_{n,l} + \text{cte. } \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$, donde el primer término es la contribución del campo central apantallado y con efectos relativistas, mientras que el segundo incorpora la interacción espín-órbita. Existen dos valores posibles para este segundo término, según sea la orientación relativa de los vectores \mathbf{S} y \mathbf{L} .



Según el principio de exclusión de Pauli, en un átomo dos electrones no pueden tener el mismo conjunto de números cuánticos. En virtud de este principio, a medida que aumenta Z , las capas u orbitales atómicos van ocupándose de manera ordenada, de manera que hay un número máximo posible de electrones en cada orbital. Las capas atómicas están relacionadas con el número cuántico principal n , mientras que los orbitales, con n y l conjuntamente, como se muestra en la tabla.

El cálculo de la probabilidad de transición P desde un estado atómico inicial i a un estado atómico final f , entre un instante t_0 y un instante posterior t , puede calcularse a partir del operador evolución $U(t, t_0)$:

$$P_{f,i} = |\langle \psi_f | U(t, t_0) | \psi_i \rangle|^2,$$

donde ψ_f y ψ_i son las funciones de onda correspondientes a los estados final e inicial, respectivamente. A partir de la conservación de la energía, del momento angular y de consideraciones acerca de la paridad de las funciones de onda, algunas de las $P_{f,i}$ resultan nulas en la aproximación dipolar del operador $U(t, t_0)$, es decir, hay transiciones que están “prohibidas” en la aproximación dipolar. Esto da lugar a las llamadas *reglas de selección dipolar*; en virtud de estas reglas, las transiciones permitidas son aquellas que satisfacen las siguientes condiciones para los números cuánticos:

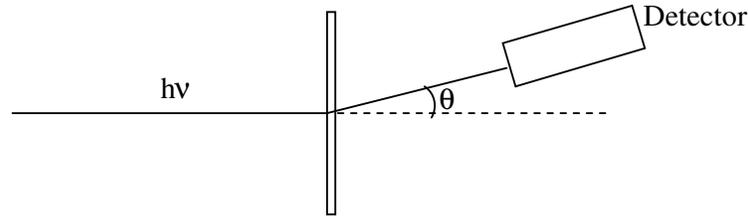
$$\Delta n \geq 1; \quad \Delta l \geq \pm 1; \quad \Delta j = 0 \text{ ó } \pm 1$$

Capa	n	l	m _l	m _s	Orbital	Nº máx de e ⁻	Subcapa (Nº de e ⁻)
K	1	0	0	±½	1s j=1/2	2	--- (2)
L	2	0	0	±½	2s j=1/2	8	L _I (2)
		1	1	±½	2p j=1/2, 3/2		L _{II} (2) j=1/2
		1	0	±½			L _{III} (4) j=3/2
		1	-1	±½			
M	3	0	0	±½	3s j=1/2	18	M _I (2)
		1	1	±½	3p j=1/2, 3/2		M _{II} (2) j=1/2
		1	0	±½			M _{III} (4) j=3/2
		1	-1	±½			
		2	2	±½	3d j=3/2, 5/2		M _{IV} (4) j=3/2 M _V (6) j=5/2
		2	1	±½			
		2	0	±½			
		2	-1	±½			
2	-1	±½					
N	4	0	0	±½	4s j=1/2	32	N _I (2)
		1	1	±½	4p j=1/2, 3/2		N _{II} (2) j=1/2
		1	0	±½			N _{III} (4) j=3/2
		1	-1	±½			
		2	2	±½	4d j=3/2, 5/2		N _{IV} (4) j=3/2 N _V (6) j=5/2
		2	1	±½			
		2	0	±½			
		2	-1	±½			
		2	2	±½			
		3	3	±½	4f j=5/2, 7/2		N _{VI} (6) j=5/2 N _{VII} (8) j=7/2
		3	2	±½			
		3	1	±½			
3	0	±½					
3	-1	±½					
3	-2	±½					
3	-3	±½					

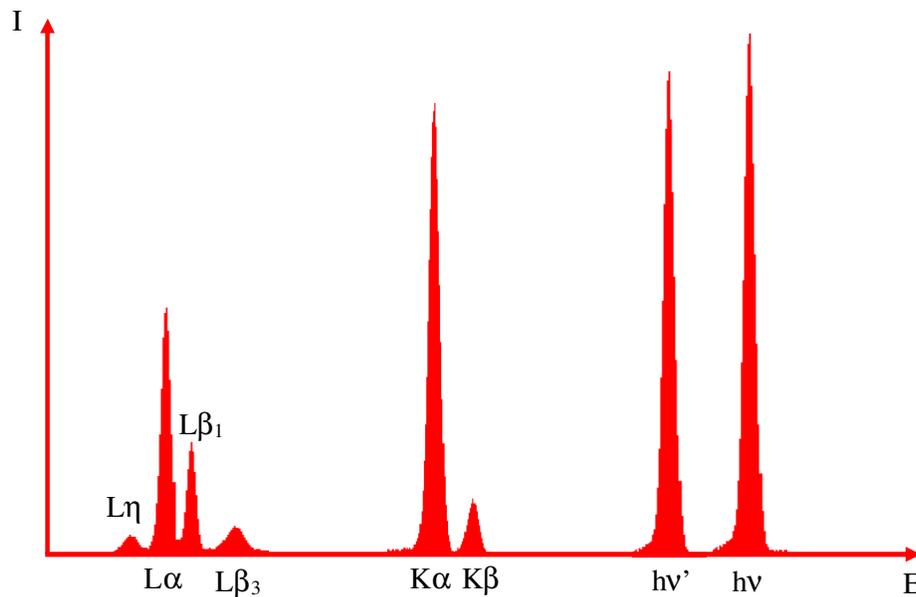
El número de electrones permitido en cada subcapa, o degeneración, está dado por $2j+1$.

Espectro de rayos x característicos

Supongamos que un haz de fotones monocromático, de energía $h\nu > E_K$ incide sobre un blanco delgado y se observa la radiación emitida por el mismo con un detector que forma un ángulo θ con respecto a la dirección de incidencia.



Si graficamos el número de fotones detectado por intervalo de energía $I(E)$ en función de la energía E observaremos algo parecido a esto:



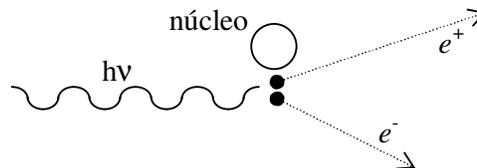
Las “líneas” observadas tienen un ancho que depende de características propias del espectrómetro además del ancho “natural” debido a la naturaleza cuántica de cada transición radiativa involucrada. Para la energía $h\nu$ de los fotones incidentes se observa un pico debido a la dispersión Rayleigh, además, puede apreciarse un pico intenso para la energía $h\nu' = h\nu/[1 + \alpha(1 - \cos\theta)]$, correspondiente a la dispersión Compton en el ángulo de detección. Las restantes líneas se deben al llenado radiativo de vacancias originadas por efecto fotoeléctrico. En el ejemplo de la figura el blanco es puro; si fuera multicomponente, habría más líneas en el espectro; la posición de las mismas revela la naturaleza de los elementos presentes, mientras que su altura estaría en relación con la abundancia relativa de los elementos correspondientes.

Es importante mencionar que los fotones característicos, a diferencia de los fotoelectrones, se emiten isotrópicamente. Esto se debe a que el tiempo en el que transcurre la eyección del electrón es del orden de 10^{-15} segundos, mientras que el decaimiento para llenar la vacancia se produce 10^{-11} segundos después, es decir, cuando

el fotoelectrón está a varias cuerdas, de manera que no perturba la simetría esférica del átomo.

Creación de pares

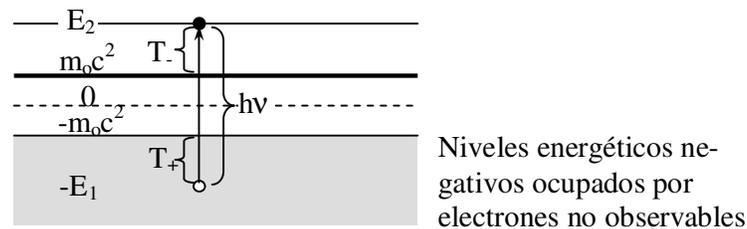
Es la absorción de fotones en el campo de partículas cargadas (principalmente, núcleos atómicos). La energía del fotón absorbido es empleada en la creación de un par electrón-positrón. El positrón es una partícula similar al electrón (con la misma masa), pero con carga $+e$, de manera que en el proceso se conserva la carga.



Por la conservación de la energía-masa: $h\nu = T_+ + m_0c^2 + T_- + m_0c^2 = T_+ + T_- + 2m_0c^2$,

donde T_+ y T_- son las energías cinéticas del positrón y el electrón, respectivamente. Como estas energías cinéticas son positivas, la energía del fotón incidente no puede ser menor que $h\nu_{\min} = 2m_0c^2 = 1,02 \text{ MeV}$; es decir, el efecto no es posible por debajo de esta energía.

Para estudiar este proceso es necesario considerar la teoría de Dirac (cuántica-relativista). En este marco se puede describir la situación con niveles negativos para la energía del electrón. De acuerdo con esta descripción, existe un mar de electrones “sumido” en niveles energéticos negativos, como se muestra en la figura.



Los electrones se vuelven observables cuando adquieren una energía m_0c^2 , mientras que con energías menores que $-m_0c^2$, están “en potencia”. Si a alguno de estos “posibles” electrones, de energía $-E_1$ se le entrega una energía $h\nu > 2m_0c^2$, salta a un estado observable con energía $E_2 = T_- + m_0c^2$. El hueco en el nivel energético negativo es un positrón de energía $E_1 = T_+ + m_0c^2$. Entonces, $h\nu = E_1 + E_2 = T_- + T_+ + 2m_0c^2$.

El electrón y el positrón interactúan con el núcleo, pero además hay que tener en cuenta el campo electromagnético del fotón incidente. Bethe y Heitler (1934) obtuvieron expresiones para la sección eficaz κ de creación de pares y para la sección eficaz diferencial en energía $d\kappa/dT_+$ asumiendo la hipótesis $T \gg U$ para todo tiempo, donde T se refiere a la energía cinética de cualquiera de las dos partículas creadas y U al potencial del núcleo. Llamando v a la velocidad de la más energética de esas partículas, puede verse que la condición $T \gg U$ lleva a que $1 \gg Ze^2/(\hbar v) = Ze^2/(\hbar c\beta) = Z/(137\beta)$, con $1/137 = e^2/(\hbar c)$: constante de estructura fina.

Entonces, para que se cumpla esta condición, debe ser: $1 \gg Z/(137\beta)$. Si la energía del electrón o la del positrón creado es del orden de m_0c^2 , entonces $T \sim 0$, es decir, $\beta \sim 0$ y la

teoría falla. Esto nos dice que la teoría no funciona cuando $h\nu \sim m_0c^2$; incluso falla para valores mayores de $h\nu$ si Z es grande. Por ejemplo, para plomo ($Z=82$) y $h\nu=88$ MeV se observan discrepancias de hasta el 12% con resultados experimentales.

Distribución angular

Para $T \gg m_0c^2$ las partículas creadas tienen una marcada tendencia a salir en la dirección del fotón incidente; el ángulo θ con la dirección de incidencia varía, en estos casos, como m_0c^2/T .

Si $T \sim m_0c^2$ la descripción es más complicada y la distribución angular es mucho menos “picuda” hacia delante.

Distribución en energía

Por cada positrón creado con energía cinética T_+ hay un electrón creado con energía cinética $T_- = h\nu - T_+ - 2m_0c^2$; por lo tanto, la probabilidad de crear un positrón con energía cinética T_+ es igual a la de crear un electrón con energía cinética $T_- = h\nu - T_+ - 2m_0c^2$ y está dada por

$$\frac{d\kappa}{dT_+} = \frac{\sigma_0 Z^2 P}{h\nu - 2m_0c^2},$$

donde $\sigma_0 = r_0^2/137 = 5,8 \times 10^{-28}$ cm²; P depende de Z , $h\nu$ y T_+ , anulándose para $h\nu \leq m_0c^2$; P es una magnitud adimensional cuyo valor oscila entre 0 y 20; aproximándose a este último valor para grandes valores de $h\nu$.

Se suele graficar P en función de la variable $\epsilon = T_+/(h\nu - 2m_0c^2)$, que es la fracción de la energía disponible que adquiere el positrón (varía entre 0 y 1). En la Fig. 9 pueden verse resultados teóricos de P obtenidos por Bethe y Heitler. Se observa que P es una función par de ϵ con respecto al valor 0,5. Esto significa que, para valores dados de Z y $h\nu$ existe la misma probabilidad de generar positrones con $T_+ < \frac{1}{2}(h\nu - 2m_0c^2)$ que hacerlo con $T_+ > \frac{1}{2}(h\nu - 2m_0c^2)$. Además existe la misma probabilidad de crear un positrón con $\epsilon=0,3$ que con $\epsilon=0,7$, es decir, de crear un electrón con $\epsilon=0,3$. Por lo tanto, en promedio, los electrones se crean con la misma energía que los positrones. En realidad no hay tal simetría, pues al ser creado el par, el núcleo atrae al electrón y repele al positrón. La energía potencial del positrón es Ze^2/r (r es la distancia al centro del núcleo), mientras que la del electrón es $-Ze^2/r$, de manera que la diferencia $\Delta U = 2Ze^2/r$. Esta diferencia de energía potencial se traduce en una diferencia de energía cinética, de manera que $T_+ > T_-$.

Apantallamiento

Para grandes valores de $h\nu$ (~20 MeV y mayores) aumenta la probabilidad de crear un par a distancias $r > r_K$, donde r_K es el radio de la capa K, con lo cual los electrones de dicha capa atómica comienzan a quedar “dentro”. Es decir, la carga efectiva del núcleo disminuye y por lo tanto también disminuye el potencial electrostático $U(r)$ y la intensidad del efecto de asimetría en las energías cinéticas de las partículas creadas.

Un modelo para describir el potencial apantallado es:

$$U(r) = \frac{Ze^2}{r} e^{-r/a}, \quad \text{con } a = \text{cte}/Z^{1/2}.$$

El símbolo e_e denota la carga del positrón, mientras que e es la base de los logaritmos naturales.

Puede verse que según este modelo, para valores pequeños de r (los electrones atómicos quedan fuera), $U(r) \rightarrow Ze_e^2/r$; en cambio, para grandes valores de r (participan más electrones apantallando el núcleo), $U(r) \rightarrow 0$.

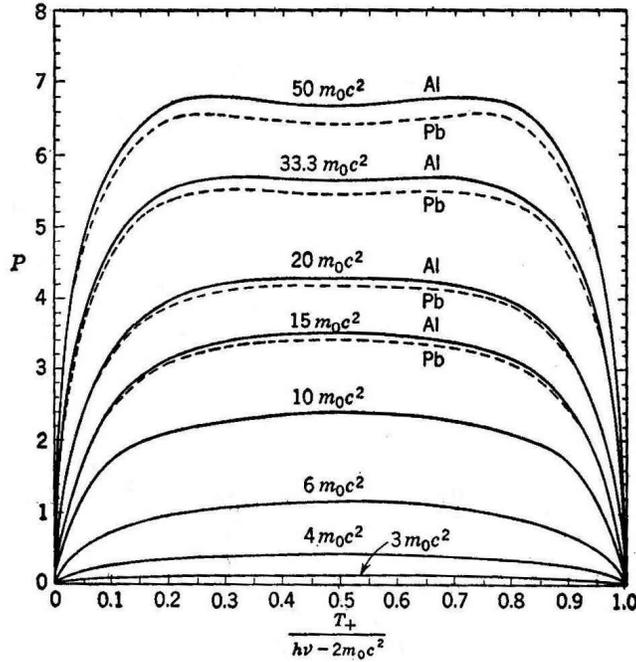


Figura 9. Sección eficaz diferencial de creación de pares expresada a través de la función adimensional P . Las curvas fueron calculadas a partir de las ecuaciones de Bethe y Heitler, incluyendo correcciones de apantallamiento para energías $h\nu > 10 m_0c^2$.

Sección eficaz total κ

La sección eficaz total se obtiene integrando la sección eficaz diferencial:

$$\kappa = \int_0^{h\nu - 2m_0c^2} \frac{d\kappa}{dT_+} dT_+ = \sigma_0 Z^2 \int_0^{h\nu - 2m_0c^2} \frac{P}{h\nu - 2m_0c^2} dT_+ = \sigma_0 Z^2 \int_0^1 P d\varepsilon ;$$

es decir, $\sigma_0 Z^2 \bar{P}$ cm²/átomo. En la siguiente tabla se muestran valores de $\sigma_0 \bar{P}$ para el plomo y el aluminio, con correcciones de apantallamiento incluidas.

$h\nu/m_0c^2$	Mev	$(\sigma_{\kappa})/Z^2 = \sigma_0 \bar{P},$ $10^{-27} \text{ cm}^2/\text{átomo}$	
		Al	Pb
2	1.02	0	0
3	1.53	0.050	0.050
4	2.04	0.189	0.189
6	3.06	0.524	0.524
10	5.10	1.15	1.15
15	7.66	1.70	1.66
20	10.22	2.12	2.08
33.3	17.0	2.94	2.84
50	25.5	3.56	3.46
100	51.0	5.0	4.5
200	102	5.9	5.3
500	255	6.5	6.0
1,000	510	7.2	6.3
2,000	1,020	7.5	6.5

En primer lugar puede verse que la sección eficaz κ crece con $h\nu$ al contrario que para los otros procesos estudiados. Además puede verse que para $h\nu < 5 \text{ MeV}$, \bar{P} no depende de Z . Entonces, si $h\nu < 5 \text{ MeV}$, para un elemento cualquiera x :

$$\frac{\kappa_x}{\kappa_{Pb}} = \frac{Z_x^2}{Z_{Pb}^2} \Rightarrow \kappa_x = \kappa_{Pb} \left(\frac{Z_x}{82} \right)^2$$

Finalmente cabe observar que la fracción de energía absorbida puede escribirse en primera aproximación como

$$\kappa_a = \kappa \frac{h\nu - 2m_0c^2}{h\nu}, \quad (15)$$

ya que la energía en reposo de las partículas creadas no es liberada en las inmediaciones del lugar donde ocurrió el proceso.

Creación de pares en el campo de un electrón

Este efecto existe y puede medirse. De todas maneras es mucho menos probable que cuando hay un núcleo atómico presente:

$$\frac{\kappa_{\text{electrón}}}{\kappa_{\text{núcleo}}} = \frac{1}{bZ},$$

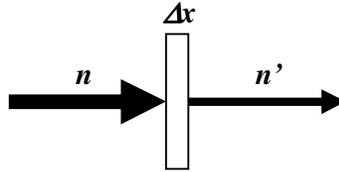
donde $b=b(h\nu)$ está entre 1 y 2. Se observa a partir de la conservación del momento lineal que la mínima energía necesaria para la creación de un par en el campo de un electrón es $4 m_0c^2$. Los productos de este proceso se observan como un triplete.

Procesos de atenuación

Ley de atenuación exponencial

Un haz de fotones que atraviesa un medio material va atenuándose a medida que va interactuando mediante algunos de los mecanismos descriptos. Existen dos formas de atenuación: por absorción (un fotón desaparece) y por dispersión (un fotón es desviado de su trayectoria inicial).

Si inciden n fotones por unidad de tiempo y por unidad de área sobre una lámina de espesor Δx , la atraviesa sin interactuar un número n' ($n' \leq n$):



Se observa experimentalmente que $\frac{n - n'}{n} \propto \Delta x$, es decir, definiendo $\Delta n = n' - n$, resulta

$\Delta n \propto -n \Delta x$. El factor de proporcionalidad que surge se denomina coeficiente de atenuación total μ . Este coeficiente es una función de la energía E_0 de los fotones incidentes y del número atómico Z del medio material.

Pasando al límite para espesores muy pequeños dn se tiene que:

$$\frac{dn}{n} = -\mu dx, \quad (16)$$

$$\ln n = -\mu x + C,$$

$$n = A e^{-\mu x}$$

A y C son constantes; en particular, $A = n(0) \equiv n_0$; luego:

$$n = n_0 e^{-\mu x} \quad (17)$$

Distintos tipos de coeficientes de atenuación

El espesor lineal x se mide en unidades de longitud, por ejemplo, cm; otra medida de espesor es el espesor másico ρx , que se expresa en g/cm^2 . También existe el espesor atómico (en átomos por cm^2) y el electrónico (en electrones por cm^2).

Como el exponente de la ec. (17) debe ser adimensional, el coeficiente de atenuación total μ tendrá distintas unidades según sea la unidad del espesor. Así, el coeficiente de atenuación lineal μ se expresa (por ejemplo) en $1/\text{cm}$; el coeficiente de atenuación másico μ/ρ , en cm^2/g , el coeficiente de atenuación atómica ${}_a\mu$, en $\text{cm}^2/\text{átomo}$ y el coeficiente de atenuación electrónica ${}_e\mu$, en $\text{cm}^2/\text{electrón}$. Estos dos últimos no son otros que las secciones eficaces atómica y electrónica, respectivamente.

Es posible relacionar los distintos coeficientes de atenuación entre sí teniendo en cuenta que el producto [coef. de atenuación] × [espesor] debe ser igual para todos los tipos de espesores, ya que la relación entre el número de fotones incidentes y transmitidos no puede depender de la forma en que se mida el espesor –ver ec. (17). Así por ejemplo, se puede comparar el coeficiente de atenuación lineal con el atómico:

$$\mu x = {}_a\mu \text{ número de átomos/área} \Rightarrow \mu = {}_a\mu \text{ número de átomos/volumen}$$

$$\therefore \mu = {}_a\mu \rho \text{ número de átomos/masa} \Rightarrow \mu = {}_a\mu \rho N_A/A$$

donde N_A es el número de Avogadro y A , el peso atómico.

También se puede comparar el coeficiente de atenuación atómico con el electrónico:

$a\mu$ número de átomos/área = $e\mu$ número de electrones/área

$$\therefore a\mu = e\mu \text{ número de electrones/número de átomos} \Rightarrow a\mu = e\mu Z$$

O bien el coeficiente de atenuación másico μ/ρ con el lineal:

$$\mu/\rho \rho x = \mu x \Rightarrow \mu/\rho = \frac{\mu}{\rho} \Rightarrow \mu/\rho = a\mu N_A/A$$

Nota: μ/ρ es el *símbolo* utilizado para denotar el coeficiente de atenuación másica.

Atenuación conjunta por distintos procesos

Se considera que cada proceso de atenuación afecta a la radiación incidente en forma independiente de los otros. La notación menos ambigua para los coeficientes de atenuación lineales Compton, fotoeléctrico, por creación de pares y Rayleigh es σ , τ , κ y σ_R , respectivamente, mientras que las correspondientes secciones eficaces se indican con $e\sigma$, $a\tau$, $a\kappa$ y $a\sigma_R$; sin embargo, es frecuente referirse a estas últimas con la notación más sencilla: σ , τ , κ y σ_R , igual que para los coeficientes de atenuación lineales, lo cual hace imprescindible apelar al contexto.

Si consideramos distintos efectos, la ec. (16) se cumple para cada uno de ellos por separado:

$$\left(\frac{dn}{n}\right)_{\text{Compton}} = -\sigma dx$$

$$\left(\frac{dn}{n}\right)_{\text{foto}} = -\tau dx$$

..... =

Sumando miembro a miembro se obtiene para el miembro izquierdo la variación total del número de fotones:

$$\left(\frac{dn}{n}\right) = -(\sigma + \tau + \dots)dx$$

Comparando esta última ecuación con la ec. (16) se ve que $\mu = \Sigma\mu_i$, donde μ_i indica la atenuación de cada efecto por separado.

Comparación entre distintos procesos de atenuación

Como puede verse en la figura 10, según sea la energía de los fotones incidentes y la naturaleza del blanco, es más importante uno u otro efecto.

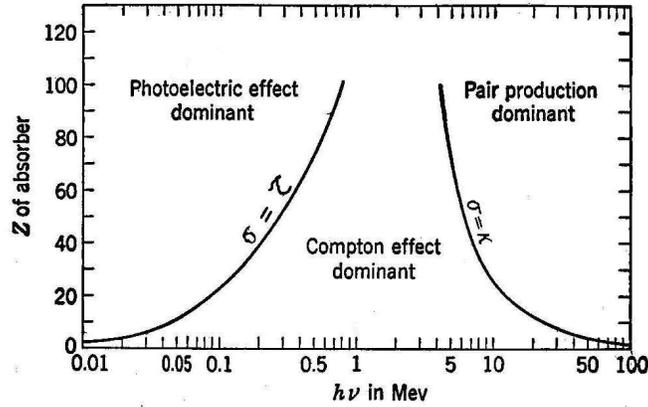


Figura 10. Comparación de los tres principales procesos de atenuación de fotones. Las líneas muestran las zonas donde dos efectos son igualmente importantes. Tomado de *The atomic nucleus*, R. Evans (1955).

Puede verse que en la zona de bajas energías predomina el efecto fotoeléctrico (para energías menores que las centenas de keV, dependiendo de Z); en la zona de energías intermedias predomina el efecto Compton (con $h\nu$ entre las décimas y las decenas de MeV). Para energías mayores, la creación de pares es el efecto más importante.

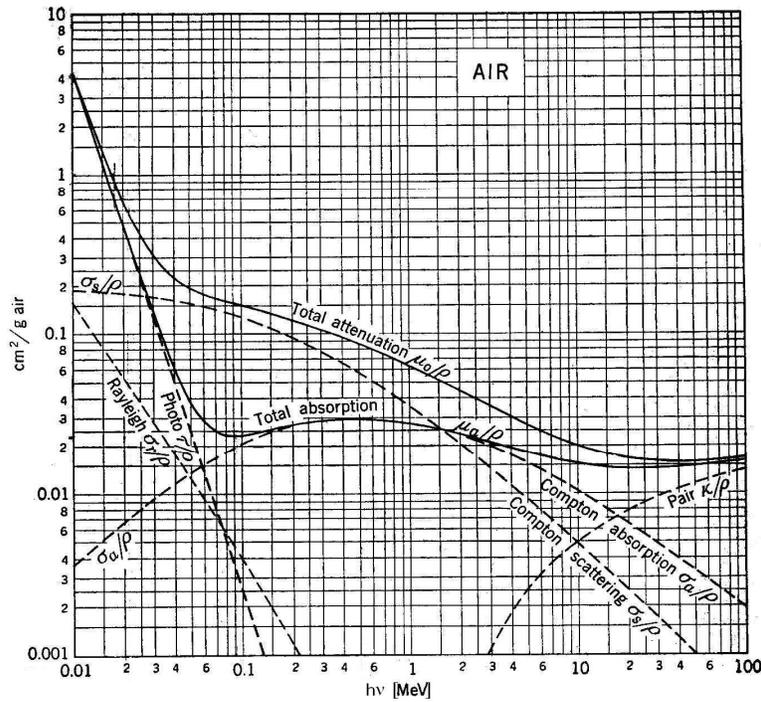


Figura 11. Coeficientes de atenuación másica para el aire. Los subíndices a y s se refieren a absorción y dispersión de energía, respectivamente. Tomado de *The atomic nucleus*, R. Evans (1955).

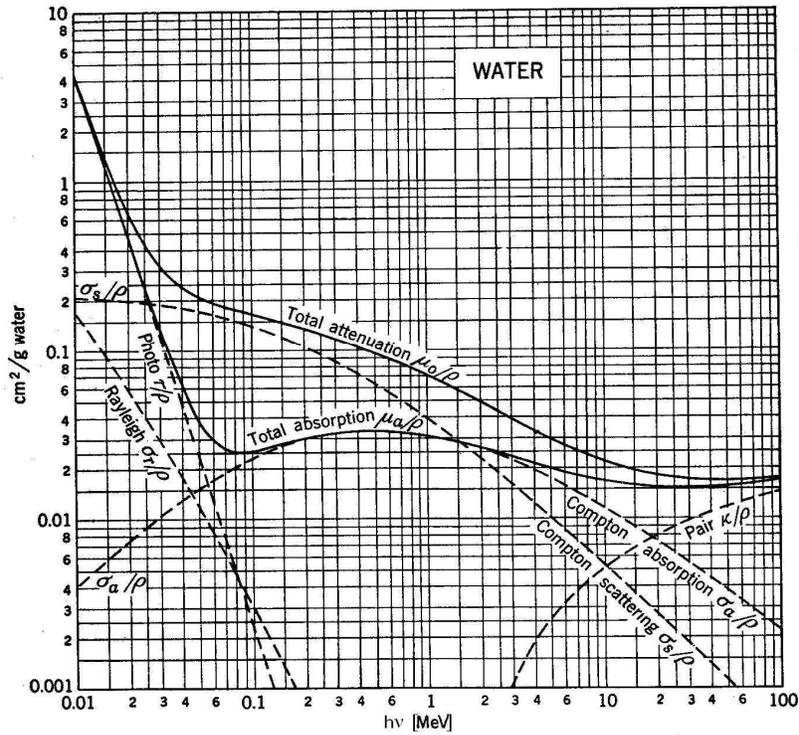


Figura 12. Coeficientes de atenuación másica para el agua. Los subíndices a y s se refieren a absorción y dispersión de energía, respectivamente. Tomado de *The atomic nucleus*, R. Evans (1955).

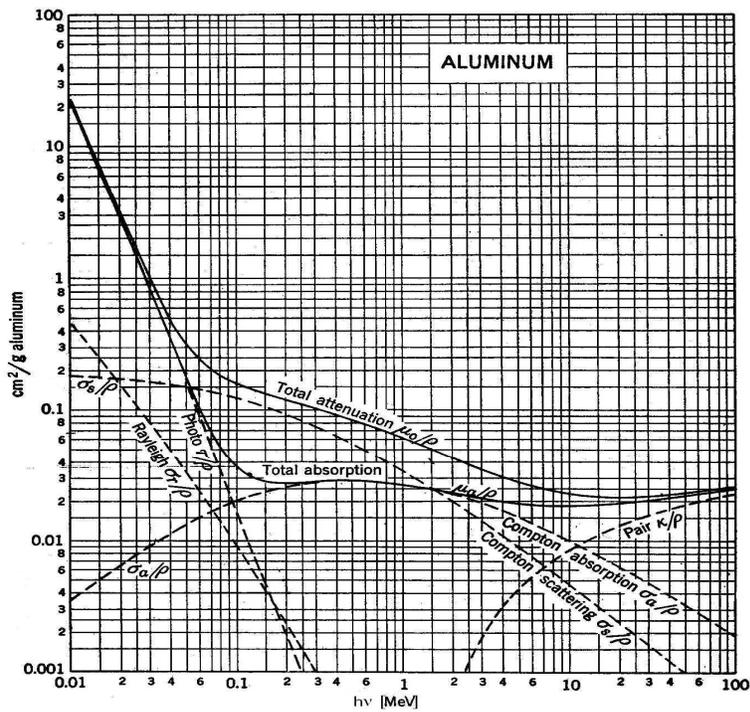


Figura 13. Coeficientes de atenuación másica para aluminio. Los subíndices a y s se refieren a absorción y dispersión de energía, respectivamente. Tomado de *The atomic nucleus*, R. Evans (1955).

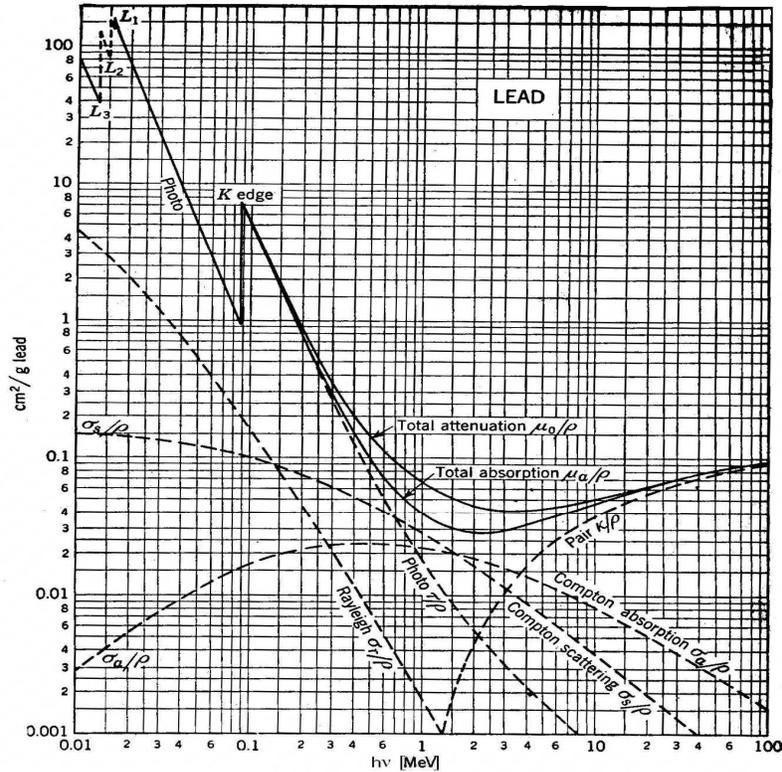


Figura 14. Coeficientes de atenuación másica para plomo. Los subíndices a y s se refieren a absorción y dispersión de energía, respectivamente. Tomado de *The atomic nucleus*, R. Evans (1955).

En las figuras 11-14 se muestran los coeficientes de atenuación másica de los distintos efectos para aire, agua, aluminio y plomo, respectivamente. Puede observarse que los coeficientes de atenuación másica Compton, σ/ρ , y de creación de pares, κ/ρ , no dependen sensiblemente del número atómico. También se observa que para grandes números atómicos (particularmente para el plomo -Fig. 14) σ_R/ρ llega a superar a σ/ρ para bajas energías; recordemos que $\sigma_R \propto Z^2/(h\nu)^2$.

Blancos multicomponentes

Si el blanco o material atenuador está compuesto por N elementos en concentraciones másicas $C_i = m_i / \sum_{i=1}^N m_i$, donde m_i es la masa del elemento i , podemos considerar que en una capa delgada de espesor Δx , una parte de la misma, de espesor Δx_i , corresponderá al elemento i . La atenuación debida a dicho elemento estará dada por -ver ec. (16):

$$-\left(\frac{\Delta n}{n}\right)_i = \mu_i \Delta x_i$$

Sumando miembro a miembro las contribuciones de todos los elementos se obtiene la atenuación total:

$$-\frac{\Delta n}{n} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\Delta n}{n}\right)_i = \sum_{i=1}^N \mu_i \Delta x_i = \mu \Delta x$$

$$\therefore \frac{\mu}{\rho} \Delta x = \sum_{i=1}^N \mu_i \frac{\Delta x_i}{\rho} = \sum_{i=1}^N \frac{\mu_i}{\rho_i} \frac{\Delta x_i}{\rho} \rho_i ,$$

luego,

$$\frac{\mu}{\rho} = \sum_{i=1}^N \frac{\mu_i}{\rho_i} \frac{\Delta x_i}{\Delta x} \frac{\rho_i}{\rho} ; \quad (18)$$

pero

$$\Delta x_i \rho_i = \frac{\Delta V_i}{S} \rho_i = \frac{\Delta m_i}{S} , \quad (19)$$

donde Δm_i es la masa del elemento i en el volumen ΔV_i y S es la sección del haz considerado.

Análogamente, para toda la capa de espesor Δx se cumple que

$$\Delta x \rho = \frac{\Delta V}{S} \rho = \frac{\Delta m}{S} \quad (20)$$

Reemplazando los resultados de las ecs. (19) y (20) en la ec. (18) se obtiene

$$\frac{\mu}{\rho} = \sum_{i=1}^N \frac{\mu_i}{\rho_i} \frac{\Delta m_i}{\Delta m} \Rightarrow \frac{\mu}{\rho} = \sum_{i=1}^N \frac{\mu_i}{\rho_i} C_i$$

Cabe acotar que esta relación es válida también para cada proceso de interacción en particular.

Absorción de energía en un medio

Cuando un haz de fotones incide sobre un blanco se producen electrones secundarios (por Compton, efecto fotoeléctrico y creación de pares) y fotones secundarios (por Compton, efecto fotoeléctrico, Rayleigh y creación de pares). Los electrones secundarios son más susceptibles de ser frenados que los fotones secundarios, debido a que los primeros tienen carga y masa en reposo; por este motivo, la energía absorbida en un medio está relacionada con la parte de la energía incidente que es llevada por los electrones secundarios. Es cierto que un electrón acelerado (o frenado) emite fotones de Bremsstrahlung, pero por esta vía pierde, en promedio, mucha menos energía que por otros mecanismos. Por ejemplo, para electrones de 1 MeV, sólo el 1% de esta energía es convertida en Bremsstrahlung. Entonces, consideraremos que toda la energía de los electrones secundarios es disipada en la región en que estos fueron liberados (en forma de calor y reacciones químicas). Esta energía disipada localmente es de fundamental importancia en el estudio de daños biológicos a tejidos y en la terapia con radiaciones.

Si inciden sobre un material n fotones por segundo y por cm^2 , con una energía $h\nu$, la intensidad será $I = n h\nu$ [$\text{MeV}/(\text{cm}^2\text{s})$]. Al atravesar un espesor dx , sufrirán interacciones un número de fotones por unidad de tiempo y de área

$$dn = n \mu dx = n (\sigma + \sigma_R + \tau + \kappa) dx$$

La energía removida del haz por unidad de tiempo y de área estará dada por $dI_T = h\nu dn$. Es decir,

$$dI_T = h\nu n (\sigma + \sigma_R + \tau + \kappa) dx = n (h\nu \sigma + h\nu \sigma_R + h\nu \tau + h\nu \kappa) dx ;$$

pero una fracción se la llevarán los fotones y otra los electrones secundarios. Esta última fracción es la energía absorbida dI por unidad de tiempo y de área en el material:

$$dI = n (\langle T_C \rangle \sigma + \langle T_R \rangle \sigma_R + \langle T_\tau \rangle \tau + \langle T_\kappa \rangle \kappa) dx, \quad (21)$$

donde $\langle T_i \rangle$ es la energía cinética promedio que se llevan los electrones liberados en el efecto i . Claramente se ve que $\langle T_R \rangle = 0$. Por otro lado, $\langle T_\tau \rangle = hv - h\bar{\nu}_{c, \text{car}} \omega_c$, donde $h\bar{\nu}_{c, \text{car}}$ es la energía del fotón característico promediada sobre los distintos decaimientos posibles hacia la capa c y ω_c es el coeficiente de producción de fluorescencia de la capa c –ver ec. (14). Además, como se desprende de la ec. (15), $\langle T_\kappa \rangle = hv - 2m_0c^2$. Finalmente, es necesario calcular $\langle T_C \rangle = hv - \langle hv' \rangle$:

$$\langle hv' \rangle = \frac{\int hv' d\sigma}{\int d\sigma} = \frac{\int hv' d\sigma}{\sigma}$$

Por otra parte, recordando la definición de la fracción de energía dispersada por unidad de ángulo sólido y por número de centros dispersores por unidad de área, $\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = \frac{hv' d\sigma}{hv d\Omega}$, la ecuación anterior puede escribirse como

$$\langle hv' \rangle = \frac{\int hv d\sigma_s}{\sigma} = hv \frac{\int d\sigma_s}{\sigma} = hv \frac{\sigma_s}{\sigma}$$

Entonces, $\langle T_C \rangle = hv (1 - \sigma_s/\sigma) = hv \sigma_a/\sigma$; puedo, podemos reescribir la ec. (21):

$$dI = n [hv \sigma_a + (hv - h\bar{\nu}_{c, \text{car}} \omega_c) \tau + (hv - 2m_0c^2) \kappa] dx$$

Para energías del orden de los MeV resulta ser $hv \gg h\bar{\nu}_{c, \text{car}} \omega_c$; por otro lado, κ comienza a pesar en la ecuación anterior para $hv > 5 \text{ keV}$ (ver Fig. 10) y para esos casos $hv \gg 2 m_0c^2$. Luego, para energías altas podemos escribir:

$$dI = n hv (\sigma_a + \tau + \kappa) dx = I (\sigma_a + \tau + \kappa) dx$$

Entonces, el coeficiente de *absorción* de energía en un medio está dado por

$$\mu_a = \sigma_a + \tau + \kappa$$

Por otro lado, $\mu = \mu_a + \mu_s = \sigma + \sigma_R + \tau + \kappa = \sigma_a + \sigma_s + \sigma_R + \tau + \kappa$,

entonces el coeficiente de dispersión de energía resulta ser $\mu_s = \sigma_s + \sigma_R$.

Podríamos preguntarnos qué pasa con la parte $2m_0c^2$ de la energía que pierde un fotón en la creación de pares. Esta energía es transportada por el electrón y el positrón: la parte correspondiente al electrón no se libera, mientras que el positrón se aniquila rápidamente, pero la energía liberada mediante fotones de aniquilación es transportada lejos de la zona.

Como vimos, dI es la energía absorbida en el medio por unidad de tiempo y de área cuando la radiación incidente atraviesa un espesor dx , luego dI/dx es la energía absorbida por unidad de volumen del material atravesado:

$$dI/dx = I \mu_a [\text{MeV}/(\text{cm}^3 \text{ s})]$$

Dividiendo por la densidad del material se obtiene la *tasa de dosis*:

$$\mathfrak{R} \equiv I \mu_a / \rho [\text{MeV}/(\text{g s})]$$

Como $\mu/\rho = N_A Z/A \mu$, o bien $\mu/\rho = N_A/A \mu$ no dependen de ρ , vemos que \mathfrak{R} no depende de ρ .

Dosis

La dosis o dosis absorbida se define como

$$D \equiv d\epsilon/dm ,$$

donde $\epsilon = (R_{in})_u - (R_{out})_u + (R_{in})_{ch} - (R_{out})_{ch} + \Sigma Q$.

ϵ es la energía absorbida en un volumen finito V de masa m ; R es la energía “radiante”, es decir, la energía que excluye la energía en reposo. Los subíndices *in* y *out* se refieren a lo que entra en el volumen V o a lo que sale de él.; *u* y *ch* denotan partículas sin y con carga, respectivamente. Por último, ΣQ es la energía neta que surge de la conversión de masa en energía (+) y viceversa (-).

La tasa de dosis \mathfrak{R} se relaciona con la dosis mediante la expresión

$$\mathfrak{R} = dD/dt = d/dt (d\epsilon/dm)$$

Entonces $D = \int \mathfrak{R} dt$ ($= \mathfrak{R}\Delta t$ si \mathfrak{R} es constante).

Las unidades de dosis son: $[D] = \text{Gy}$ (Gray), J/kg, rad, erg/g,

donde $1 \text{ Gy} = 1 \text{ J/kg} = 100 \text{ rad} = 10^4 \text{ erg/g}$.

Exposición

La exposición X está definida sólo para fotones como:

$$X \equiv dQ/dm ,$$

donde dQ es el módulo de la carga de todos los iones del mismo signo que son producidos en aire cuando todos los electrones y positrones liberados por fotones en una masa dm de aire son frenados completamente en aire.

Las unidades de exposición son: $[X] = \text{R}$ (Röntgen), C/kg, donde $1 \text{ R} = 3876 \text{ C/kg}$.

Otras definiciones

Dosis equivalente: es la dosis absorbida ponderada en términos del daño biológico potencial de los diferentes tipos de radiación. Por ejemplo, a la misma dosis absorbida se producen más daños biológicos cuando la radiación consta de partículas α ($2p+2n$) que cuando se trata de rayos x ; es decir:

$$(\text{Dosis equivalente})_{\alpha} > (\text{Dosis equivalente})_x$$

Se expresa en Sievert (Sv): $1 \text{ Sv} = 1 \text{ Gy}$.

Dosis equivalente efectiva: tiene en cuenta la vulnerabilidad de los distintos tejidos. Cada tejido tiene un “peso” diferente p . De esta manera:

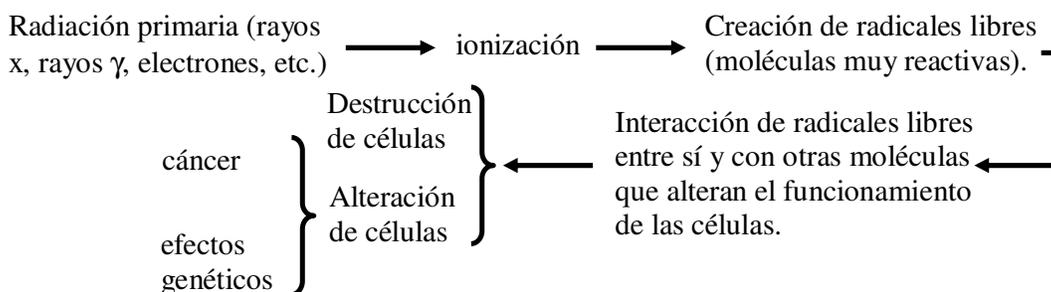
$$(\text{Dosis equivalente efectiva})_{\text{riñón}} = \text{Dosis equivalente} \times p_{\text{riñón}}$$

Esta magnitud también se expresa en Sy . A continuación se tabulan los valores de p para algunos tejidos.

Tejido	<i>p</i>
Médula ósea	0,12
Superficie ósea	0,03
Tiroides	0,03
Mama	0,15
Pulmón	0,12
Ovario/testículo	0,25

Daños biológicos

La secuencia de mecanismos por los cuales la radiación puede producir daños en organismos vivos se muestra en el siguiente esquema:



Es muy importante saber en cuánto tiempo se deposita una determinada dosis, ya que la mayoría de los órganos tiene cierta capacidad para reparar el daño sufrido por la radiación y así se puede ir recuperando. Si se trata, en cambio, de dosis únicas recibidas por todo el cuerpo,

<u>para una dosis de:</u>	<u>tiene lugar:</u>	<u>debido a lesiones en:</u>
100 Gy	muerte en horas o días	sistema nervioso central
10-50 Gy	muerte entre 1 y 2 semanas	estómago, intestino
3-5 Gy	mortalidad del 50% entre 1 y 2 meses	médula ósea

Los efectos son muy diferentes si la dosis se absorbe de a poco y sólo en partes; por ejemplo, el hígado resiste hasta 40 Gy en un mes.

La dosis máxima aceptable por persona por año es 5 mSv, de los cuales la radiación cósmica aporta un mínimo que no puede evitarse y que depende de la altura sobre el nivel del mar como se indica a continuación:

Nivel del mar	2000 msnm	4000 msnm
0,3 mSv/año	0,9 mSv/año	1,8 mSv/año

En los vuelos de pasajeros (a 12000 de altura) se reciben 5 μ Sv/hora, es decir que en 1000 horas se cubre la dosis máxima anual aceptable. La radiación terrestre natural es aun más alta. Depende marcadamente de la región, pero en promedio la dosis anual por persona debida a esta fuente es de 1,7 mSv. Por otro lado, una radiografía de tórax implica una dosis de 0,08 mSv, mientras que una dental aporta 0,1 mSv.

Llenado de vacancias

Probabilidades relativas de transición

Una vacancia creada en una capa atómica (por ejemplo en la capa K) puede ser llenada por decaimientos desde distintos niveles, dando origen a distintas líneas (líneas K). La probabilidad de que ocurra uno u otro decaimiento se denomina probabilidad de transición. Las probabilidades de transición son propiedades atómicas, es decir, no dependen del método utilizado para crear las vacancias primarias.

Los electrones de cada nivel tienen una probabilidad propia de decaer a una vacancia creada, que es inversamente proporcional a la vida media del estado en el que se encuentran: un electrón con una vida media corta tendrá gran probabilidad de decaer hacia la vacancia, “ganándole de mano” a los otros electrones, con lo cual la línea correspondiente emitida será más intensa que las otras.

Por el principio de incertidumbre de Heisenberg, $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$, lo que nos dice que una vida media corta (Δt chico) está asociada con un ΔE grande. Este valor ΔE está relacionado con el ancho del pico emitido y se denomina *ancho natural de línea*.

Entonces: línea intensa $\Rightarrow \Delta t$ chico $\Rightarrow \Delta E$ grande \Rightarrow pico ancho

En realidad el ancho natural de línea, del orden de unos pocos eV, muchas veces está inmerso en un ancho mucho mayor debido a la resolución del detector.

Se denomina probabilidad relativa de transición de un decaimiento $P_{\text{línea}}$ hacia una vacancia al cociente de la tasa de ese decaimiento sobre la suma de las tasas de todos los decaimientos posibles para llenar la vacancia considerada. Estas tasas suelen medirse en $eV/\hbar=1/\text{seg}$.

$$P_{K\alpha_1} \equiv P(L_{III} \rightarrow K) \equiv P_{K,L_{III}} = \frac{\text{tasa } L_{III} \rightarrow K}{\sum_x \text{tasa } x \rightarrow K} = \frac{I_{K\alpha_1}}{I_{K\alpha_1} + I_{K\alpha_2} + I_{K\beta_1} + I_{K\beta_2} + \dots},$$

donde I denota la intensidad generada (que no es lo mismo que la emitida ni que la detectada).

También puede definirse la probabilidad relativa de transición para un grupo de líneas, siempre que éstas correspondan a decaimientos hacia el mismo nivel; por ejemplo,

$$P_{K\alpha} \equiv P(L_{III,II} \rightarrow K) \equiv P_{K,L_{III,II}} = \frac{\text{tasa } L_{III} \rightarrow K + \text{tasa } L_{II} \rightarrow K}{\sum_x \text{tasa } x \rightarrow K} = \frac{I_{K\alpha_1} + I_{K\alpha_2}}{I_{K\alpha_1} + I_{K\alpha_2} + I_{K\beta_1} + I_{K\beta_2} + \dots}$$

Dada la definición de las probabilidades relativas de transición, es obvio que están normalizadas a la unidad:

$$\sum_x P(x \rightarrow K) = P_{K\alpha_1} + P_{K\alpha_2} + P_{K\beta_1} + P_{K\beta_2} + \dots = 1$$

Producción de fluorescencia, producción Auger, transiciones Coster-Kronig y emisión Auger radiativa

Una vez producida una vacancia en un nivel atómico, por ejemplo, por efecto fotoeléctrico, esta puede llenarse de tres formas:

1. Radiativamente

2. No radiativamente
3. De forma mixta

Llenado radiativo

Un electrón decae desde una capa más externa y se emite un fotón con energía $h\nu = E_1 - E_2$, donde E_1 y E_2 son las energías de ligadura del nivel de la vacancia a llenar y desde donde procede el electrón, respectivamente. En particular, E_1 y E_2 podrían pertenecer a distintas subcapas de una misma capa (violando la regla de selección dipolar $\Delta n \geq 1$, pero la probabilidad de este tipo de procesos es baja).

La probabilidad de que una vacancia creada (de cualquier manera) en el nivel i sea llenada radiativamente desde *cualquier* nivel se llama producción de fluorescencia ω_i del nivel i :

$$\omega_i = \frac{I_i}{n_i} = \frac{\text{n}^\circ \text{ de fotones característicos emitidos por decaimientos al nivel } i}{\text{n}^\circ \text{ de vacancias primarias en el nivel } i}$$

Se entiende que tanto I_i como n_i se refieren a fotones emitidos y vacancias creadas en un gran número de átomos, no en uno solo; es decir, estamos hablando de átomos simplemente ionizados.

La producción de fluorescencia ω_i es una propiedad atómica, ya que no depende del experimento, a diferencia de I_i y n_i , que varían según sea el método utilizado para crear las vacancias, puesto que hay métodos más o menos eficaces para crear vacancias en un nivel específico.

Llenado no radiativo

Cuando se produce el decaimiento el átomo pierde una energía $E_1 - E_2$. Esta pérdida no siempre se compensa con la emisión de un fotón; a veces en cambio, se emite un electrón de una capa más externa, con energía cinética $T = E_1 - E_2 - E_3$, donde E_3 es la energía de ligadura del electrón emitido.

Aquí conviene hacer una distinción:

- a) Transiciones no radiativas que involucran niveles E_1 y E_2 pertenecientes a distintas capas atómicas (por ejemplo K y L_{III}).
- b) Transiciones no radiativas que involucran niveles E_1 y E_2 pertenecientes a la misma capa atómica (por ejemplo L_I y L_{III}).

Transiciones no radiativas entre distintas capas: producción Auger. Se denomina producción Auger a_i del nivel i a la probabilidad de que una vacancia creada (de cualquier manera) en el nivel i sea llenada no radiativamente desde un nivel perteneciente a otra capa atómica ($\Delta n > 0$). Como consecuencia del decaimiento se emite un electrón desde una capa más externa para que se conserve la energía. Este electrón se denomina electrón Auger. Los electrones Auger dan pie a una técnica espectroscópica: la espectroscopía Auger. La producción Auger a_i decrece con Z y con $E_1 - E_2$.

Luego de un decaimiento nuclear en átomos de número atómico grande, también puede emitirse un electrón Auger (con energías del orden de los MeV).

Transiciones no radiativas entre niveles de una misma capa: transiciones Coster-Kronig. Se denomina probabilidad de transición Coster-Kronig f_{ji} a la probabilidad de

que una vacancia creada (de cualquier manera) en la subcapa j de una capa atómica sea llenada no radiativamente desde otra subcapa l de la misma capa atómica ($\Delta n=0$). Cuando el electrón Auger también es emitido desde la misma capa atómica (obviamente, desde una subcapa más externa), el proceso se denomina *Súper Coster-Kronig*.

Llenado mixto: Emisión Auger Radiativa (RAE). Una vacancia generada en una capa interna es llenada por el decaimiento de un electrón desde un nivel más externo. Después del decaimiento se emiten un fotón y un electrón desde una capa más externa, compartiendo la energía disponible para satisfacer las leyes de conservación. En el espectro de emisión de rayos x este proceso se manifiesta en estructuras anchas o “bandas”. La ecuación de conservación se escribe como:

$$h\nu + T + E_3 = E_1 - E_2 \quad ;$$

por lo tanto,

$$h\nu = E_1 - E_2 - E_3 - T \quad .$$

Entonces, los dos casos extremos corresponden a $h\nu_{\text{máx}} = E_1 - E_2 - E_3$ y $h\nu_{\text{mín}} = 0$ (efecto Auger puro).

Dada una vacancia, ésta sólo puede llenarse mediante alguno de los procesos descriptos. Despreciando la baja probabilidad de la emisión Auger radiativa, puede escribirse:

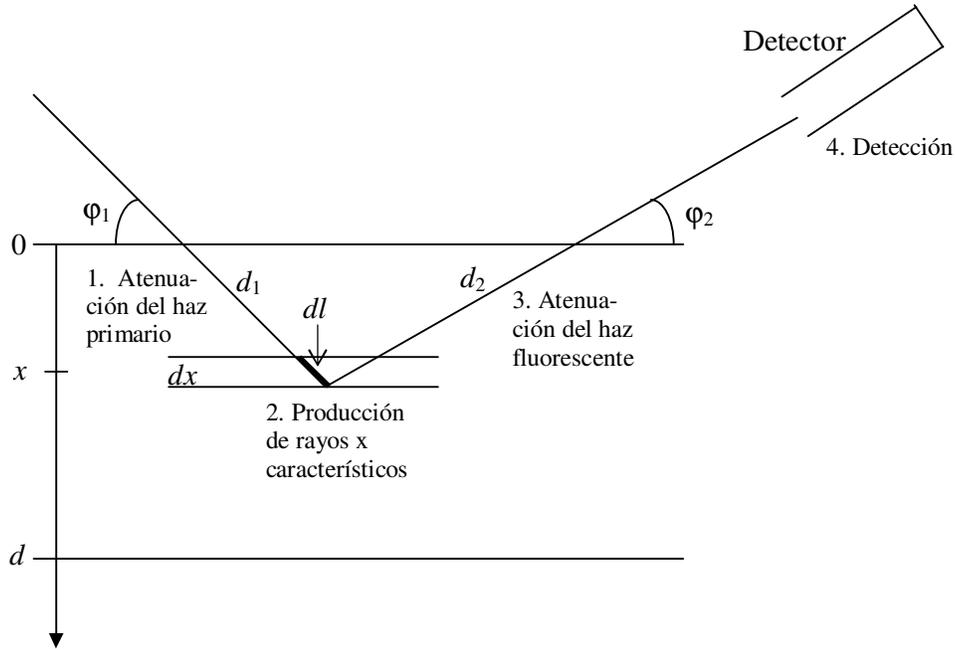
$$\omega_i + a_i + \sum_{l>j} f_{jl} = 1 \quad ,$$

donde f_{jl} denota la probabilidad de transición Coster-Kronig $l \rightarrow j$ de la capa atómica i .

Cálculo de la intensidad fluorescente

Se denomina emisión fluorescente a la radiación característica (rayos x característicos) que se produce por decaimientos a vacancias creadas por efecto fotoeléctrico. Es decir, cuando un haz de rayos x incide sobre un material se produce, entre otras cosas, efecto fotoeléctrico; luego algunas de las vacancias creadas son llenadas radiativamente y así surge la radiación característica “fluorescente”. La técnica de fluorescencia de rayos x (FRX) se basa en hacer incidir rayos x sobre una muestra incógnita y detectar la radiación fluorescente emitida por ella. Si se cuenta con ecuaciones que relacionen las intensidades características detectadas con las concentraciones másicas de los elementos constituyentes de la muestra, es posible realizar análisis cuantitativos. A continuación se presenta la deducción de tales ecuaciones. Se supone que la muestra es homogénea, su superficie es perfectamente plana y que su espesor d es uniforme. Los procesos que dan lugar a la intensidad fluorescente pueden agruparse en cuatro etapas:

1. La radiación primaria es atenuada por la muestra hasta llegar a la profundidad x .
2. Sólo una fracción de los fotones que llegan a dx (a la profundidad x) produce vacancias (efecto fotoeléctrico), solamente algunas de estas vacancias se llenan radiativamente y sólo una parte de ellas se llena desde un nivel particular, originando un pico característico en el espectro.
3. La radiación fluorescente se atenúa en la muestra antes de abandonarla.
4. Sólo una parte de la radiación fluorescente que sale de la superficie de la muestra está dirigida al detector y no todos estos fotones son detectados.



1. Atenuación primaria. Si $I_0(\lambda)$ es el número de fotones de longitud de onda ente λ y $\lambda+d\lambda$ del haz primario (generalmente por unidad de tiempo y de área), los fotones de ese tipo que llegan a la profundidad x serán $I_1(\lambda) = I_0(\lambda)d\lambda \exp[-\mu/\rho(\lambda) \rho d_1] = I_0(\lambda)d\lambda \exp[-\mu/\rho(\lambda) \text{cosec}(\varphi_1)\rho x]$, donde $\mu/\rho(\lambda)$ es el coeficiente de atenuación másico de la muestra a la radiación de longitud de onda λ .
2. Producción de rayos x característicos de la línea q que corresponde a la capa c del elemento j , generada en la lámina de espesor dx . El número de estos fotones será proporcional a:
 - a) el número de veces que se produce efecto fotoeléctrico en la capa c del elemento j (o número de ionizaciones): $C_j \tau_c^j(\lambda)/\rho_j d\rho l$, donde $\tau_c^j(\lambda)/\rho_j$ es el coeficiente de atenuación másico fluorescente para la capa c del elemento j a la radiación de longitud de onda λ , C_j es la concentración másica del elemento j en el material y $d\rho l$ es el espesor másico del camino dl recorrido en la capa de espesor dx ;
 - b) la probabilidad de llenado radiativo ω_c^j (producción de fluorescencia) de la capa c del elemento j .
 - c) la probabilidad relativa de transición $P_{c,q}^j$ correspondiente a la línea q .

Por lo tanto, el número de fotones de interés generado será:

$$I_2(\lambda) = I_1(\lambda) C_j \tau_c^j(\lambda) / \rho_j \omega_c^j P_{c,q}^j \text{cosec}(\varphi_1) d\rho x$$

3. Atenuación de la radiación fluorescente de longitud de onda $\lambda_{c,q}^j$. La atenuación generada se verá atenuada en un factor $\exp[-\mu/\rho(\lambda_{c,q}^j)\rho d_2]$. Luego, el número de fotones de interés que abandona la muestra está dado por:

$$I_3(\lambda) = I_2(\lambda) \exp[-\mu/\rho(\lambda_{c,q}^j) \text{cosec}(\varphi_2)\rho x] ,$$

donde $\mu/\rho = \sum(\mu/\rho)_j C_j$.

4. Detección. Si $\Delta\Omega$ es el ángulo sólido subtendido por el detector, $\Delta\Omega/(4\pi)$ tendrá en cuenta la fracción de la radiación emergente que llega al detector; entonces, la radiación de interés detectada será:

$$I_4(\lambda) = I_3(\lambda) \frac{\Delta\Omega}{4\pi} \varepsilon(\lambda_{c,q}^j),$$

donde $\varepsilon(\lambda_{c,q}^j)$ es la eficiencia intrínseca del detector a la radiación característica de interés.

Sustituyendo la expresión para I_3 en la ecuación anterior e integrando para toda la muestra (ρx entre 0 y ρd) y para todas las longitudes de onda del espectro incidente, se obtiene la intensidad fluorescente detectada de la línea de interés:

$$I_{c,q}^j = C_j \omega_c^j P_{c,q}^j \frac{\Delta\Omega}{4\pi} \varepsilon(\lambda_{c,q}^j) \cos ec(\varphi_1) \times \int_{\lambda_{\min}^j}^{\lambda_{c,abs.}^j} \frac{\tau_c^j(\lambda)}{\rho_j} \frac{1 - \exp\left[-\left(\frac{\mu(\lambda)\cos ec(\varphi_1) + \frac{\mu(\lambda_{c,q}^j)\cos ec(\varphi_2)}{\rho}\right)\rho d\right]}{\frac{\mu(\lambda)\cos ec(\varphi_1) + \frac{\mu(\lambda_{c,q}^j)\cos ec(\varphi_2)}{\rho}} I_o(\lambda) d\lambda$$

Los límites de integración corresponden a los fotones de máxima energía del espectro incidente (λ_{\min}) y a la energía del borde de absorción de la capa c del elemento j ($\lambda_{c,abs.}^j$).

Si la muestra es infinita, es decir, si el espesor incidente se atenúa totalmente en la muestra,

$$I_{c,q}^j = C_j \omega_c^j P_{c,q}^j \frac{\Delta\Omega}{4\pi} \varepsilon(\lambda_{c,q}^j) \cos ec(\varphi_1) \times \int_{\lambda_{\min}^j}^{\lambda_{c,abs.}^j} \frac{\tau_c^j(\lambda)}{\rho_j} \frac{1}{\frac{\mu(\lambda)\cos ec(\varphi_1) + \frac{\mu(\lambda_{c,q}^j)\cos ec(\varphi_2)}{\rho}} I_o(\lambda) d\lambda$$

Otra posibilidad interesante se da cuando la muestra es delgada, es decir, cuando la exponencial dentro del integrando puede aproximarse utilizando su desarrollo de Taylor hasta el término lineal. La expresión resultante resulta muy sencilla:

$$I_{c,q}^j = C_j \omega_c^j P_{c,q}^j \frac{\Delta\Omega}{4\pi} \varepsilon(\lambda_{c,q}^j) \cos ec(\varphi_1) \rho d \int_{\lambda_{\min}^j}^{\lambda_{c,abs.}^j} \frac{\tau_c^j(\lambda)}{\rho_j} I_o(\lambda) d\lambda$$

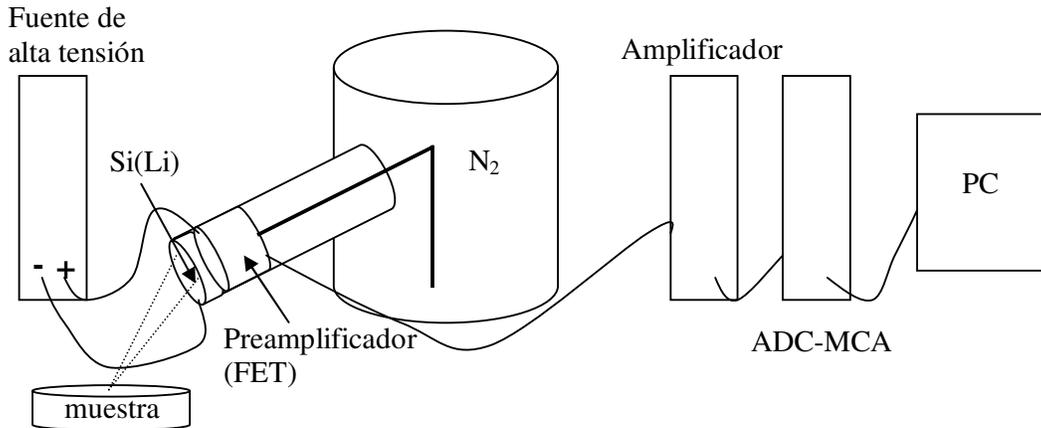
Por otra parte, si entre la fuente de rayos x y la muestra o entre la muestra y el detector hay aire (o algún otro gas), es necesario tener en cuenta la atenuación correspondiente.

Hay que notar que para el cálculo de la intensidad fluorescente se ha despreciado totalmente cualquier tipo de efecto doble o superior; por ejemplo, fotones primarios que sufren una dispersión Compton o Rayleigh y luego absorción fotoeléctrica, o fotones característicos que sufren una dispersión Compton o Rayleigh antes de abandonar la muestra y llegan al detector. En particular, no se ha tenido en cuenta un efecto importante denominado fluorescencia secundaria y que consiste en que un fotón incidente produce efecto fotoeléctrico en un átomo de un elemento i , que al decaer radiativamente genera un fotón característico, que a su vez, produce fluorescencia en el elemento j de interés.

Sistemas de detección de fotones

Sistemas dispersivos en energía (EDS)

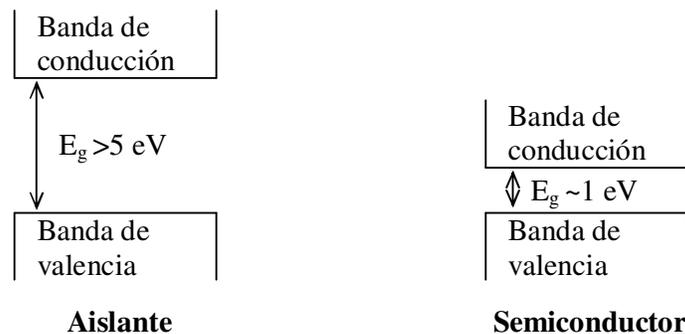
Fueron desarrollados en 1968 por Fitzgerald, Keil y Heinrich. Estos sistemas son capaces de discriminar los fotones incidentes según su energía. A continuación se muestra un esquema de un EDS.



Detector de Si(Li)

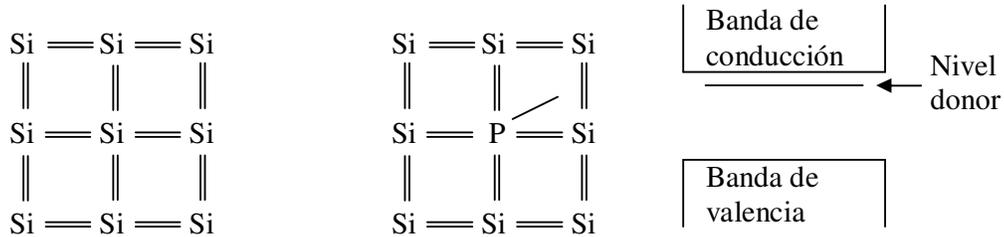
El detector de rayos x es básicamente un material cristalino, que suele ser silicio dopado con litio –Si(Li)—, pero que también puede ser de germanio. Estos detectores de radiación se conocen como detectores de estado sólido. A continuación describiremos los procesos que ocurren en este tipo de detectores, particularizando para el caso de los detectores de Si(Li).

El silicio puro es un semiconductor. En este tipo de materiales, la separación energética E_g entre la banda de valencia (última capa no completa) y la de conducción es del orden de 1 eV. Esta energía es demasiado grande como para que los electrones de la banda de valencia “salten” a la de conducción para temperaturas bajas; por lo tanto su resistencia eléctrica es altísima ($\sim 10^5 \Omega \cdot \text{cm}$). Algo similar ocurre con un aislante, aunque en este caso, el salto energético entre las dos bandas es mayor que 5 eV:



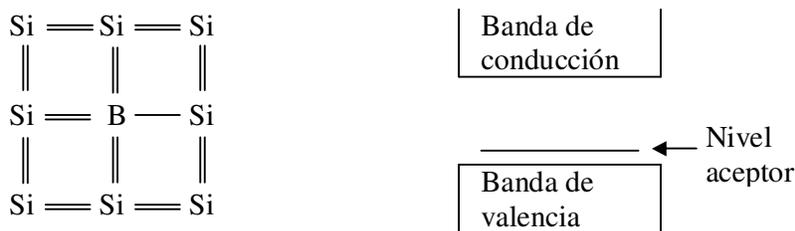
Cuando un fotón incidente entrega su energía a un electrón de la banda de valencia, éste sí puede saltar a la banda de conducción y moverse libremente por el cristal. Esta carga es colectada mediante la aplicación de un campo eléctrico externo. Este efecto es mucho más probable en el caso de los semiconductores como el Si o el Ge que en el caso de los aislantes.

El problema es que el silicio se encuentra contaminado con impurezas, lo que cambia totalmente sus características de conducción. El silicio tiene valencia 4, es decir, tiene cuatro electrones en la banda de valencia; si la impureza tiene valencia 5, como en el caso del fósforo, uno de sus electrones está débilmente ligado, creándose un nivel energético adicional, muy próximo a la banda de conducción:



El nivel adicional creado se denomina “donor”, ya que un electrón en el mismo puede “donarse” fácilmente a la banda de conducción. Estos semiconductores, por su parte, se llaman *tipo n* (de negativo). En un semiconductor tipo n, a la menor fluctuación térmica un electrón pasa a la banda de conducción; entonces, si se aplica un campo eléctrico externo a través del cristal, se colecta carga por los extremos aunque no ingrese ningún fotón. Entonces, estos materiales donde la resistividad no es muy alta, no pueden ser usados como detectores de radiación debido a la importante corriente de pérdida que presentan ante la aplicación de un campo eléctrico.

Si la impureza tiene valencia 3 (por ejemplo boro), hay una vacancia similar al hueco que dejaría un electrón si saltara a la banda de conducción, pero con una energía levemente mayor (algo más inestable).



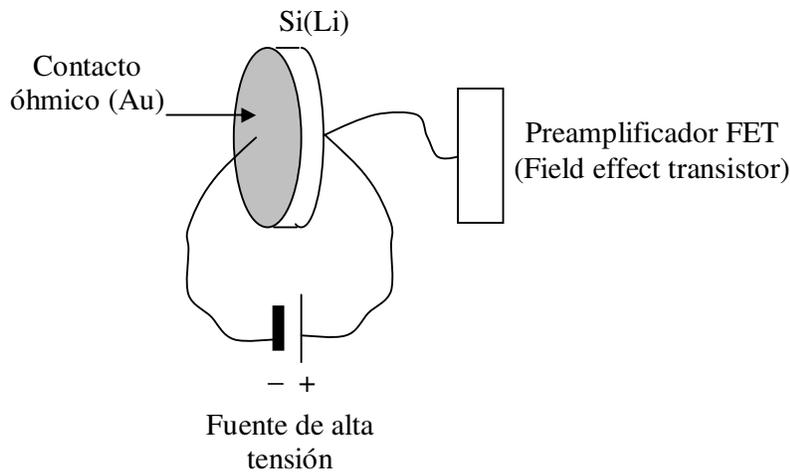
Estos son conductores de *tipo p* (de positivo). A la menor fluctuación térmica, un electrón salta de la banda de conducción al nivel “aceptor”, dejando un hueco. Al aplicar un campo externo este hueco puede desplazarse por la red, actuando como un portador de carga libre.

Ninguno de estos materiales sirve como detector, ya que debido a su baja resistividad, presentan corrientes de pérdida importantes que enmascararían la detección de cualquier fotón que incida sobre él. Lo que se hace es compensar impurezas tipo p con impurezas tipo n. Por ejemplo, si el material (Si) tiene impurezas tipo p como el boro, se le difunde

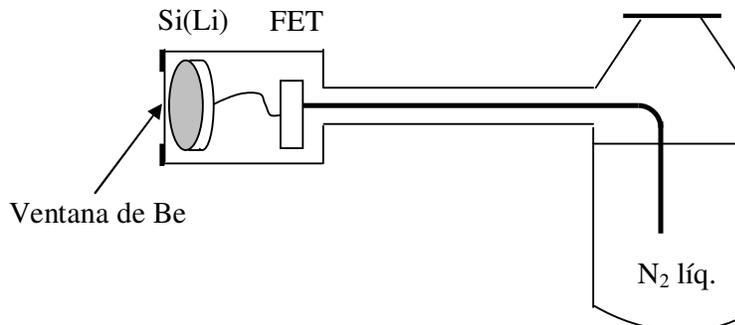
Li, que es tipo n, por un extremo del cristal. Este proceso se realiza a alta temperatura y aplicando una diferencia de potencial. Después de este procedimiento, queda una zona “compensada”, donde los niveles aceptores del B se llenan con los electrones sobrantes del Li; esa zona adquiere una alta resistividad, comparable a la del hipotético material puro. Este tipo de materiales se denomina juntura p-i-n.

De esta manera, ante la ausencia de radiación y para una temperatura convenientemente baja (77 K), la corriente de pérdida es despreciable al aplicar un campo eléctrico externo. Cuando un fotón ingresa al cristal, el proceso más frecuente de absorción es el fotoeléctrico. El átomo de silicio ionizado emite un fotoelectrón y luego un fotón característico o un electrón Auger. Estos electrones, a su vez, depositan su energía en el cristal creando pares electrón-hueco, que son libres de moverse por él y son colectados en los contactos óhmicos adosados al cristal.

Preamplificador



El preamplificador es un transistor de efecto de campo (FET), cuya función es transformar el pulso de carga que entrega el cristal cuando incide un fotón, en un pulso de voltaje. Para radiación incidente con energía entre 1 y 10 keV se crean entre 260 y 2600 pares electrón-hueco, colectándose una carga del orden de 1000 e⁻, es decir, del orden de 10⁻¹⁶ C. La magnitud de este pulso de carga es proporcional a la energía del fotón incidente. La ganancia del FET es del orden de 10¹³ V/C, por lo tanto, si el pulso de entrada es de 10⁻¹⁶ C, el pulso de salida es del orden del mV. Estos pulsos pequeños deben ser amplificados para su posterior procesamiento; por lo tanto debe reducirse todo lo posible el ruido electrónico antes de la amplificación; para ello, el FET se mantiene a 77 K al igual que el cristal. Por otra parte el cristal se mantiene al vacío para evitar la contaminación y de paso, el vacío constituye un excelente aislante térmico.

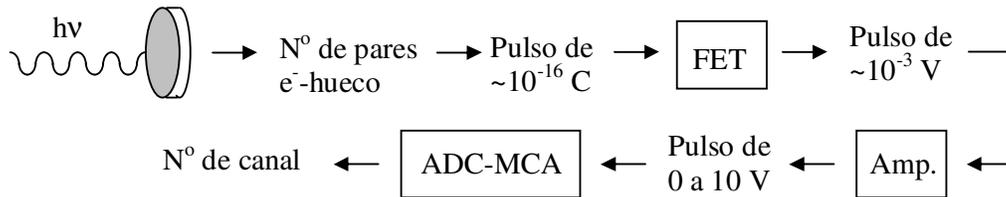


Amplificador

Los pulsos de salida del FET (\sim mV) son amplificados unas mil veces por el amplificador, es decir que los pulsos de salida de este último son del orden de los V (típicamente entre 0 y 10 V). La forma de los pulsos está caracterizada por la constante de tiempo del amplificador: es necesario procesar los pulsos rápidamente para poder registrar un nuevo fotón.

ADC-MCA

El ADC (conversor analógico digital) convierte cada pulso del amplificador en un número, mientras que el MCA (analizador multicanal) asigna cada uno de estos números o pulsos digitalizados, a un canal. De esta manera, el número de canal se relaciona con el número que el ADC ha asignado al pulso, que a su vez está dado por el voltaje con que sale del amplificador (0-10 V), que se relaciona con el pulso que sale del preamplificador (\sim mV), que es proporcional al pulso de carga colectado en el cristal de Si(Li) ($\sim 10^{-16}$ C), que viene dado por el número de pares electrón-hueco generados, que es proporcional a la energía del fotón incidente.



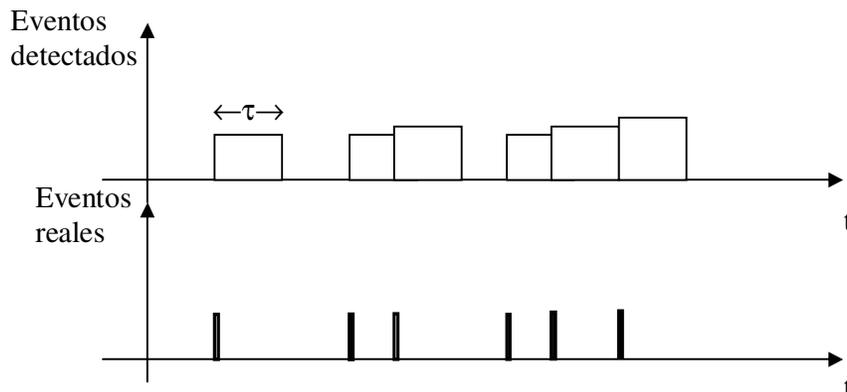
La relación lineal existente entre la energía $h\nu$ del fotón incidente y el número de canal se obtiene efectuando una calibración.

Tiempo muerto

Inmediatamente después de la llegada de un fotón al detector transcurre un tiempo hasta que el sistema de detección termina de procesarlo. Este lapso se denomina tiempo muerto τ . Si llega otro fotón al detector en un instante $t < \tau$ después de haber llegado el primer fotón, no será detectado.

Según sean los componentes electrónicos de la cadena de adquisición, existen dos tipos posibles de tiempo muerto:

- Extensible o paralizable*: La llegada de un fotón antes de τ vuelve a bloquear el sistema y se reinicia la cuenta.



En el ejemplo de la figura, el número de eventos reales (fotones que llegan el detector) es 6, pero el número de eventos detectados es sólo 3. Vemos que el número de eventos detectados está dado por el número de intervalos entre eventos reales con $\Delta t > \tau$. Los eventos reales llegan aleatoriamente, entonces, los intervalos entre ellos siguen una distribución de Poisson:

$$p(T)dT = ne^{-nT} dT$$

donde $p(T)dT$ es la probabilidad de encontrar un intervalo entre eventos reales que dure un tiempo entre T y $T+dT$ y n es la tasa de eventos reales.

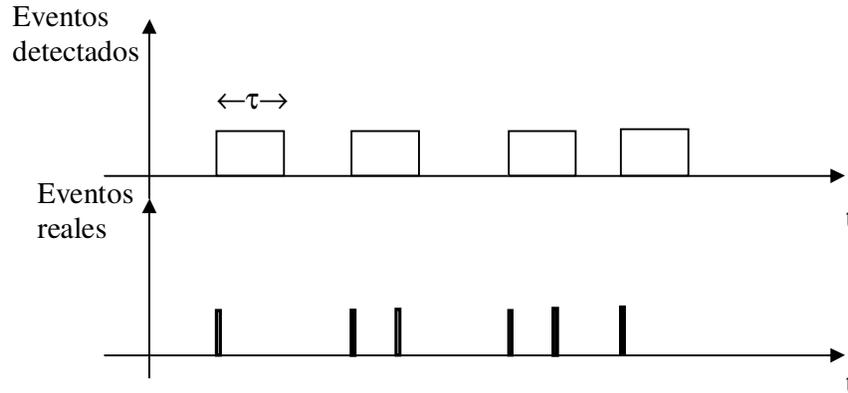
La probabilidad de que un intervalo dure un tiempo mayor que τ está dada por

$$P(\tau) = \int_{\tau}^{\infty} p(T) dT = \int_{\tau}^{\infty} ne^{-nT} dT = e^{-nT} \Big|_{\tau}^{\infty} = e^{-n\tau}$$

Luego, la tasa de eventos detectados será el producto de esta probabilidad por la tasa de eventos reales:

$$m = ne^{-n\tau} \quad (15)$$

- b) No extensible o paralizabile: Durante un período τ siguiente a la llegada de un fotón, el sistema no recibe nada y la llegada de un nuevo fotón es simplemente ignorada sin producir ningún efecto en la cadena de detección.



Considerando el ejemplo anterior, en este caso se detectan 4 fotones en lugar de 3; esto se debe a que el sistema “no se enteró” de la llegada del quinto fotón y este evento ni siquiera bloqueó su funcionamiento. Vemos que la fracción de tiempo en que el detector está inactivo es $m\tau$. Entonces la tasa de cuentas perdidas será, por un lado, $nm\tau$ y por otro, $n-m$. Entonces:

$$n - m = nm\tau \quad \Rightarrow \quad n = \frac{m}{1 - m\tau} ,$$

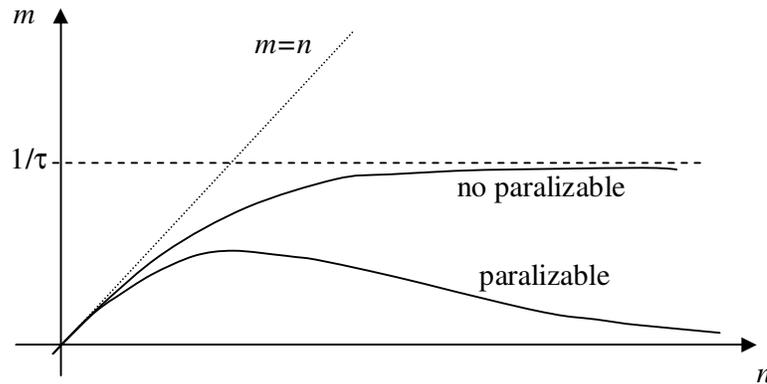
o bien:

$$m = \frac{n}{1 + n\tau} \quad (16)$$

Si la tasa de eventos reales es baja ($n \ll 1/\tau$), la ec. (15) puede aproximarse por

$$m = n(1 - n\tau)$$

y la ec. (16) también (mediante el desarrollo en serie de la función exponencial). Es decir, para bajo conteo ambos tipos de tiempo muerto se comportan similarmente:

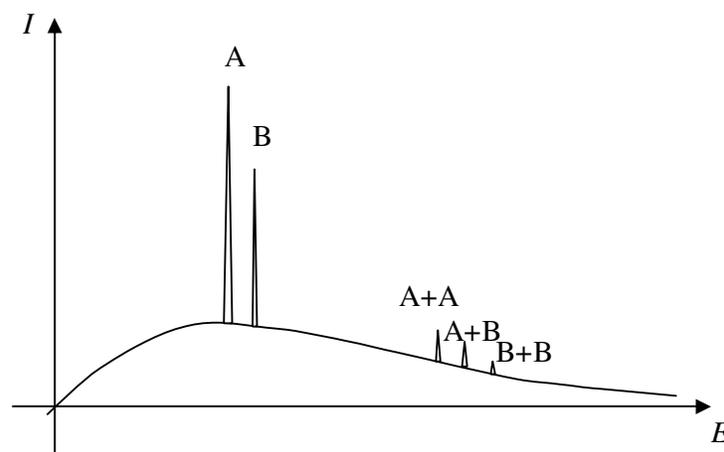


Estos tipos de tiempo muerto son modelos idealizados. Según sea el sistema de detección, se aplica mejor uno u otro. Dentro de límites razonables, el efecto del tiempo muerto es una disminución de la tasa de eventos detectados independiente de la energía. Entonces, multiplicando por un factor a todo el espectro adquirido se obtiene el espectro "real". Es importante conocer ese factor cuando se hace un análisis con patrones.

Picos suma

Si dos fotones arriban a l detector "al mismo tiempo", es decir, un segundo fotón llega mientras se está comenzando a detectar el primero (*rise time*), el sistema interpreta los dos fotones como un único fotón de energía igual a la suma de los fotones reales. Si, por ejemplo, la muestra emite dos picos intensos A y B, el espectrómetro puede interpretar que hay un pico A, un pico B (los picos "padre") y tres picos suma, que se corresponden a la llegada simultánea de dos fotones A, de dos fotones B o de un fotón de cada tipo.

Los picos suma sólo son visibles cuando la tasa de conteo es alta y los picos padre son muy intensos.



Pico de escape

Cuando se escapa del detector un fotón característico de Si, producto del decaimiento hacia una vacancia creada por radiación incidente de energía $h\nu$, el pulso detectado corresponde a una energía $h\nu - \text{SiK}\alpha$, lo cual genera en el espectro un pequeño pico con esa energía. Sólo las líneas con energías mayores que la de excitación de la capa K del silicio (en el caso de los detectores de Si(Li)) tienen asociado un pico de escape. La intensidad del pico de escape relativa al pico padre disminuye con $h\nu$, ya que al tratarse de fotones cada vez más penetrantes, el efecto fotoeléctrico se produce cada vez más adentro del detector, con lo que disminuye la probabilidad de escape del fotón característico.

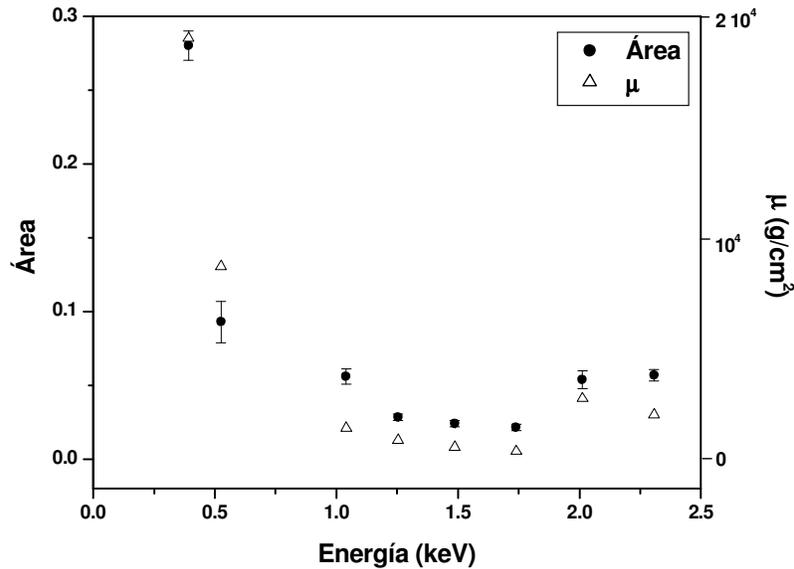
Pico de fluorescencia de Si

Es un efecto complementario al anterior (y en general, menos importante). Ocurre cuando un fotón de energía $h\nu$ es absorbido cerca del borde de la zona activa del detector y es el fotoelectrón el que escapa, con $E = h\nu - \text{SiK}$, mientras que el fotón característico, de energía $\text{SiK}\alpha$, es la única “parte” del fotón incidente que es colectada. El efecto se manifiesta en el espectro como un pequeño pico espurio en la energía $\text{SiK}\alpha$.

Colección incompleta de cargas y asimetría de picos.

Las impurezas y defectos en la estructura cristalina del silicio pueden actuar como “trampas” para huecos y electrones en su viaje hacia los electrodos. Si tardan más en liberarse de esas trampas (por excitación térmica) que el tiempo de colección para todas las cargas producidas por la llegada de un fotón, la carga colectada será algo menor y por consiguiente, la energía también.

El efecto global es que los picos pueden presentar una cola hacia la zona de bajas energías. Este efecto es más notable cuando hay más sitios de atrapamiento, lo que ocurre en la zona de mayor concentración de impurezas, que tiene lugar en la primera región del detector, ubicada entre la región activa y la capa muerta y que constituye una región parcialmente activa. Cuando los pares electrón-hueco son generados dentro de la región activa (casi libre de trampas), los electrones, bajo la influencia del campo eléctrico aplicado, se moverán hacia el ánodo, mientras que los huecos se dirigirán al cátodo, a través de la zona parcialmente activa, con una alta probabilidad de atrapamiento. El atrapamiento de huecos, sin embargo, casi no afecta la altura del pulso colectado, debido a que éste se forma principalmente por los electrones (su movilidad dentro del semiconductor es alrededor del doble de la movilidad de los huecos). Por otro lado, cuando los portadores de carga son generados en la capa parcialmente activa, tanto electrones como huecos deben atravesarla, con alta probabilidad de atrapamiento; en este caso el pulso colectado es menor que el esperado. Entonces, si los fotones son muy eficientemente colectados en la primera región del detector, los picos son más asimétricos, es decir, que habrá una correlación entre la asimetría del pico y el coeficiente de atenuación del silicio.



En la figura se observa esta correlación entre el área de la parte asimétrica de picos característicos de distinta energía (normalizada al área total) y el coeficiente de atenuación $\mu(\text{Si})$.

Eficiencia

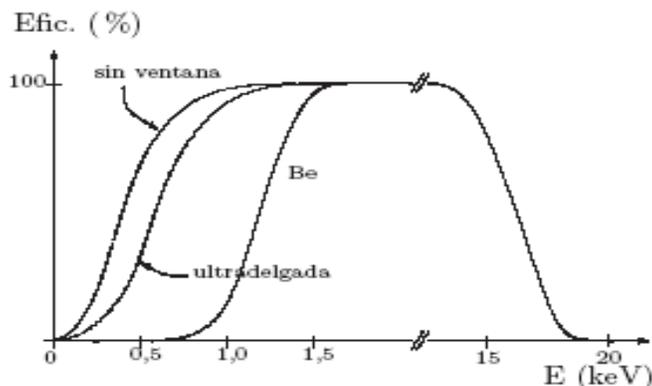
Se define la eficiencia ε de un detector como

$$\varepsilon = \frac{n^{\circ} \text{ de fotones detectados}}{n^{\circ} \text{ de fotones que llegan al detector}}$$

A veces se le llama eficiencia intrínseca, para diferenciarla de la eficiencia total, que es el producto de ε por $\Delta\Omega/(4\pi)$, donde $\Delta\Omega$ es el ángulo sólido subtendido por el detector. Esta eficiencia total representa el número de fotones detectados sobre el número de fotones *emitidos* por la fuente:

$$\varepsilon' = \frac{n^{\circ} \text{ de fotones detectados}}{n^{\circ} \text{ de fotones emitidos}} = \varepsilon \frac{\Delta\Omega}{4\pi}$$

La eficiencia intrínseca es una función de la energía del fotón que cumple que $\varepsilon \leq 1$. En particular, es considerablemente menor que uno para energías “grandes”, tales que los fotones atraviesan la zona activa del detector sin interactuar y para energías “pequeñas”, tales que los fotones son atenuados antes de llegar a la zona activa del detector. Antes de la zona activa del detector están: la ventana (Be, Formvar, etc.), el contacto metálico (Au o Al) y la capa muerta, (Si) que es una zona del cristal no apta para la detección debida a efectos de superficie. La siguiente figura muestra el comportamiento de la eficiencia intrínseca en función de la energía de los fotones para tres detectores de Si(Li) distintos.



Resolución

Si ϵ es la energía media necesaria para crear un par electrón-hueco, el número medio $\langle N \rangle$ de estos pares producidos por un fotón de energía E será $\langle N \rangle = E / \epsilon$. Parte de la energía del fotón es disipada en colisiones no ionizantes (agitación térmica, agitación colectiva de la red, etc.). Si sólo una pequeña parte de la energía E fuera a parar a colisiones ionizantes, éstas ocurrirían aleatoriamente; entonces, la desviación estándar σ de $\langle N \rangle$ sería $\sigma = \langle N \rangle^{1/2}$; por otro lado, si toda la energía E se destinara a colisiones ionizantes, no habría fluctuaciones en el número de pares creados y sería $\sigma = 0$. La realidad está entre estos dos extremos, de manera que:

$$\sigma = \sqrt{F \langle N \rangle} ,$$

donde el factor de Fano F es una medida de cuan aleatoriamente ocurren las colisiones ionizantes. Típicamente, $F \approx 0,1$ para detectores de Si(Li).

En una distribución gaussiana el ancho a la mitad de la altura FWHM se relaciona con σ mediante la expresión $FWHM = 2,355 \sigma$. Entonces, el ancho en energía a la mitad de la altura de un pico estará dado por:

$$\Delta E_{stat} = \epsilon FWHM = 2,355 \epsilon \sigma = 2,355 \epsilon \sqrt{F \langle N \rangle} = 2,355 \epsilon \sqrt{FE / \epsilon} = 2,355 \sqrt{\epsilon FE}$$

Vemos que la estadística en la producción de pares electrón-hueco conduce a picos con un ancho creciente con la energía E del fotón característico. Otras fuentes de incerteza o pérdida de resolución energética son la corriente de pérdida en el detector el ruido térmico en el preamplificador. Estas dos fuentes no dependen de E , sino que son fuentes de ruido aleatorio que debe sumarse en cuadratura con la contribución debida a la estadística de las ionizaciones:

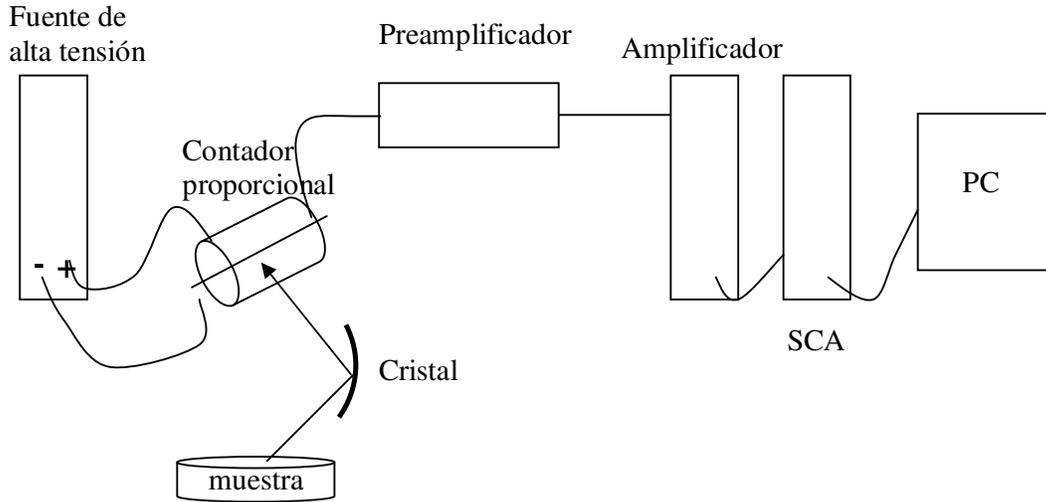
$$\Delta E^2 = \Delta E_n^2 + \Delta E_{stat}^2 = \Delta E_n^2 + 2,355^2 \epsilon FE ,$$

donde el subíndice n se refiere al ruido electrónico.

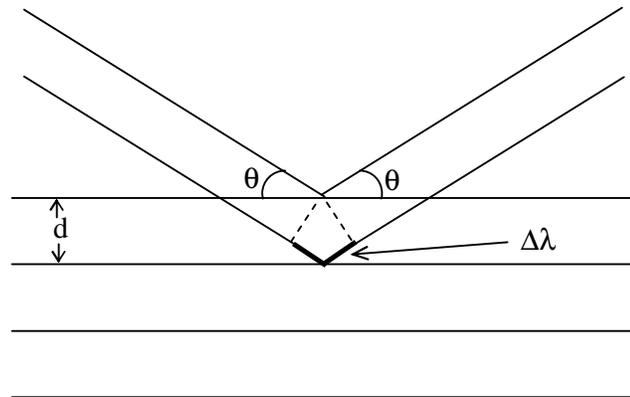
Sistemas dispersivos en longitud de onda (WDS)

Estos sistemas poseen una resolución mucho menor (es decir, mucho mejor) que los EDS, pero no registran todos los picos al mismo tiempo, sino secuencialmente. Los rayos x procedentes de la fuente inciden sobre un cristal en el cual se produce reflexión de Bragg en un ángulo relacionado con la longitud de onda λ de la radiación incidente. La resolución típica de un sistema EDS es de alrededor de 150 eV para la línea $FeK\alpha$,

mientras que para los sistemas WDS puede estar entre 5 y 10 eV para la misma energía, dependiendo del cristal analizador.



En la figura anterior se muestra un esquema de un espectrómetro WDS. El cristal se utiliza como un “sintonizador de longitudes de onda”.

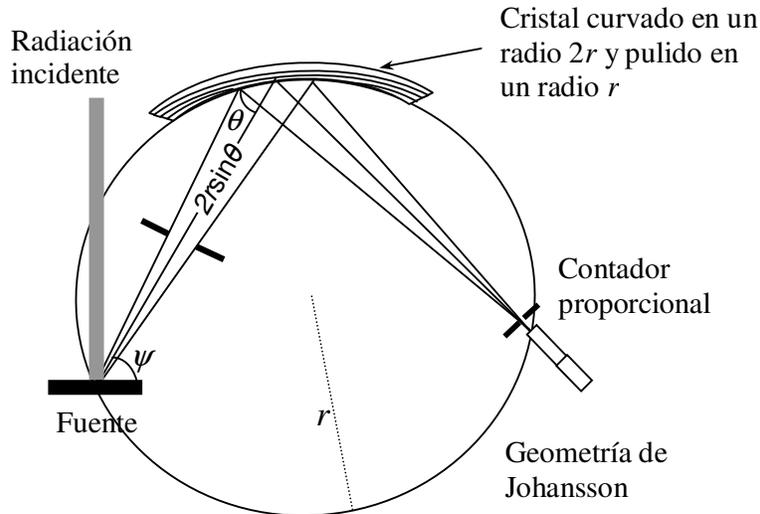


Consideremos un haz de rayos x paralelos que incide sobre la superficie de un cristal perfecto formando con ella un ángulo θ , como se muestra en la figura. La reflexión de estos rayos en distintos planos del cristal formará interferencia constructiva sólo cuando lleguen en fase, es decir, cuando la diferencia de camino entre ellos difiera en un número entero de longitudes de onda. La diferencia de camino entre rayos reflejados en planos sucesivos está dada por $\Delta\lambda=2d \text{ sen}\theta$, donde d es la separación entre planos. La interferencia constructiva se da cuando $\Delta\lambda=n\lambda$, con n natural. Luego, para un dado ángulo de incidencia, se reflejan las longitudes de onda que satisfacen la condición de Bragg:

$$n\lambda = 2d \text{ sen}\theta.$$

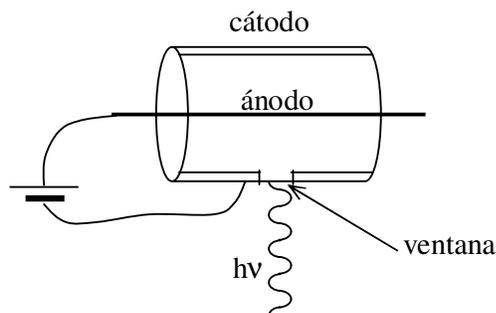
La reflexión de orden 1 ($n=1$) es mucho más intensa que las de orden superior.

Entonces, el cristal actúa como un sintonizador que refleja cada λ en un ángulo diferente. La adquisición del espectro se va haciendo al girar el cristal, de a “una” longitud de onda por vez. Existen distintos tipos de montaje instrumental; usualmente se mantiene fuente, cristal y detector en el perímetro de un círculo, llamado círculo de Rowland.



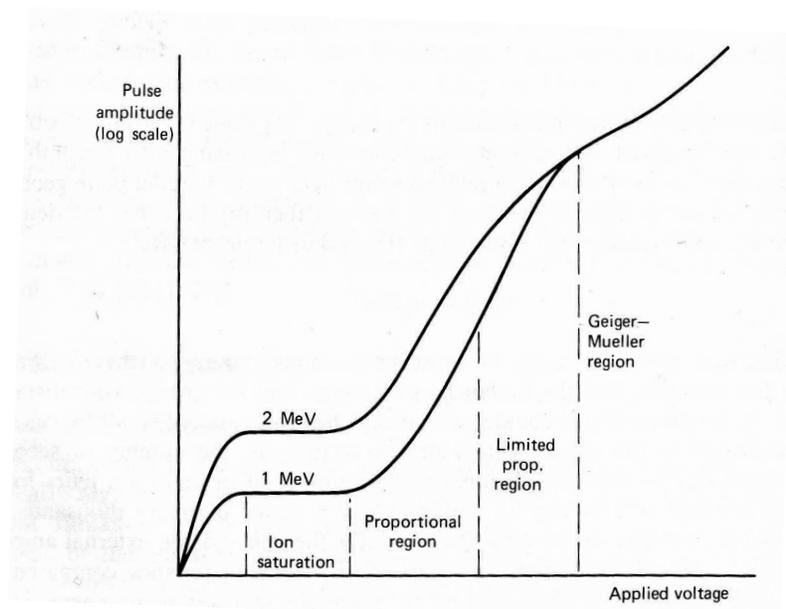
El cristal suele curvarse en un radio r para aumentar la zona donde se cumple la condición de Bragg y así mejorar la eficiencia de colección. Esta disposición se conoce como geometría de Johann. Cuando el radio de curvatura del cristal es $2r$, pero está pulido en un radio r , el ángulo de Bragg se mantiene igual para todo punto del cristal en el plano de Rowland; esta configuración se denomina geometría de Johansson.

El detector es un contador proporcional. Éste consiste en un cilindro metálico que contiene un gas adecuado y un ánodo concéntrico. Se establece una diferencia de potencial entre el ánodo y la carcasa, con lo cual funciona de manera similar al detector de Si(Li), salvo que en vez de crearse pares electrón-hueco, se crean pares iónicos.



El gas utilizado suele ser Ar, Xe o una mezcla de Ar con CH_4 . Se requiere entre 25 y 30 eV para crear un par iónico; entonces, un fotón de 1 keV produce alrededor de 35 pares iónicos, mientras que en un detector de Si(Li) se producirían casi 10 veces más portadores de carga. Esto significa que la incerteza o resolución ΔE es mucho mayor para los contadores proporcionales que para los detectores de Si(Li); de todas maneras, en este caso el detector se utiliza sólo como contador, ya que el cristal se encarga de

discriminar cada longitud de onda. Según sea el voltaje aplicado, este tipo de detector reacciona de manera distinta.



Parte 2: Partículas cargadas

Generalidades

Las partículas cargadas pueden clasificarse en livianas y pesadas. Dentro del primer grupo se encuentran los electrones y positrones; partículas de igual masa en reposo m_0 y carga $-e$ y $+e$ respectivamente. Algunos autores les llaman electrones a ambas, distinguiendo entre positrones (de carga $+e$) y negatrones (de carga $-e$). Por otro lado están las partículas pesadas, entre las cuales se incluyen los protones, las partículas α , los mesones, etc.

Vamos a considerar que las partículas incidentes son “rápidas”, es decir, su energía cinética es mucho mayor que la correspondiente a la agitación térmica. Consideraremos sólo las interacciones de tipo coulombiano: ionización, dispersión, excitación, pérdidas por radiación.

Tipos de interacción

Las interacciones entre partículas cargadas y la materia se clasifican según la pérdida de energía del proyectil en: 1. inelásticas (cuando el proyectil pierde una fracción considerable de energía) y 2. elásticas (cuando el proyectil no pierde energía o pierde una fracción despreciable de su energía). Por otra parte, el centro dispersor puede ser: a) un electrón atómico o b) un núcleo atómico.

1. a) Colisiones inelásticas con electrones atómicos.

La partícula incidente cede energía al electrón atómico produciendo su excitación o su ionización. Además sufre una pequeña deflexión que en general es de alrededor de $0,1^\circ$ ó menos. Este es el mecanismo predominante de pérdida de energía.

2. a) Colisiones elásticas con electrones atómicos.

Sólo son probables si la energía del proyectil es menor que la menor energía de excitación del electrón blanco; por lo tanto, esto sólo ocurre para electrones con energías menores que los 100 eV. No veremos este efecto en detalle ya que no estamos particularmente interesados en ese rango de energías. Como los electrones ligados no son excitados, el átomo participa como un todo en la conservación de **E** y **P**.

1. b) Colisiones inelásticas con núcleos.

La partícula incidente pasa “cerca” del núcleo y siempre es deflectada; algunas veces pierde energía emitiendo un fotón (Bremsstrahlung), raras veces excitando algún nucleón. En estos últimos casos se trata entonces de interacciones inelásticas.

2. b) Colisiones elásticas con núcleos.

El proyectil se refleja sin irradiar ni excitar el núcleo. Sólo pierde la energía necesaria para la conservación de **P** del sistema. Si las partículas incidentes son electrones, este tipo de colisión es muy probable y el proyectil prácticamente no pierde energía, ya que por la relación de masas entre el proyectil y el blanco se trata de un caso análogo al del choque de una pelota contra una pared. La deflexión más probable está entre 2° y 5° .

Colisiones inelásticas con electrones atómicos (1.a)

En estos procesos parte de la energía de los electrones incidentes es transferida a los electrones ligados de los átomos, que pueden abandonar el átomo dejándolo ionizado. La energía transferida puede ir desde algunas fracciones de eV, hasta la energía cinética T del electrón incidente, dependiendo del tipo de proceso (excitación de fonones, plasmones, electrones secundarios, ionización de capas profundas, etc.).

Teoría clásica: dispersión de Rutherford

Vamos a suponer que una partícula con carga $-ze$ y masa m_1 interactúa coulombianamente con un electrón de carga $-e$ y masa m_2 , inicialmente en reposo. Supondremos que la energía cinética T de la partícula incidente es muy grande comparada con la energía de ligadura E_c del electrón dispersante: $\frac{1}{2} m_1 v_1^2 \ll E_c$, de manera que podemos suponerlo libre reduciendo el problema al de un choque elástico (en el sentido de que se conserva la energía entre la partícula incidente y el electrón blanco).

Choque elástico (se conservan \mathbf{P} y E)

A continuación se explicita la nomenclatura utilizada para describir la interacción:

	Antes	Después
Sistema laboratorio	$m_1: \mathbf{v}_1; \quad m_2: \mathbf{v}_2=0$	$m_1: \mathbf{v}'_1; \quad m_2: \mathbf{v}'_2$
Sistema centro de masa	$m_1: \mathbf{v}_{10}; \quad m_2: \mathbf{v}_{20}$	$m_1: \mathbf{v}'_{10}; \quad m_2: \mathbf{v}'_{20}$

Por la definición de la velocidad del centro de masa, \mathbf{v}_{CM} , puede escribirse:

$$\bar{\mathbf{v}}_1 = \bar{\mathbf{v}}_{10} + \bar{\mathbf{v}}_{CM} \Rightarrow \bar{\mathbf{v}}_{10} = \bar{\mathbf{v}}_1 - \frac{m_1 \bar{\mathbf{v}}_1 + m_2 \bar{\mathbf{v}}_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_2 (\bar{\mathbf{v}}_1 - \bar{\mathbf{v}}_2)}{m_1 + m_2}$$

$$\bar{\mathbf{v}}_2 = \bar{\mathbf{v}}_{20} + \bar{\mathbf{v}}_{CM} \Rightarrow \bar{\mathbf{v}}_{20} = \bar{\mathbf{v}}_2 - \frac{m_1 \bar{\mathbf{v}}_1 + m_2 \bar{\mathbf{v}}_2}{m_1 + m_2} = -\frac{m_1 (\bar{\mathbf{v}}_1 - \bar{\mathbf{v}}_2)}{m_1 + m_2}$$

$$\text{Sea } \bar{\mathbf{v}} = \bar{\mathbf{v}}_1 - \bar{\mathbf{v}}_2 \Rightarrow \bar{\mathbf{v}}_{10} = \frac{m_2 \bar{\mathbf{v}}}{m_1 + m_2} ; \quad \bar{\mathbf{v}}_{20} = -\frac{m_1 \bar{\mathbf{v}}}{m_1 + m_2}$$

En el sistema centro de masa $\mathbf{v}_{CM}=0$; por lo tanto, para el momento del sistema se cumple que $\mathbf{P}_0=0$ (antes del choque). Entonces, por conservación de \mathbf{P} :

$$m_1 \bar{\mathbf{v}}_{10} + m_2 \bar{\mathbf{v}}_{20} = 0 \Rightarrow \bar{\mathbf{v}}_{10} = -\frac{m_2}{m_1} \bar{\mathbf{v}}_{20} \quad \Rightarrow \quad v_{10} = \frac{m_2}{m_1} v_{20} , \quad (17)$$

donde con v se indica el módulo de la velocidad.

La energía del sistema antes del choque está dada por:

$$E = \frac{1}{2} m_1 v_{10}^2 + \frac{1}{2} m_2 v_{20}^2 = \frac{1}{2} m_1 \frac{m_2^2}{m_1^2} v_{20}^2 + \frac{1}{2} m_2 v_{20}^2 = \frac{1}{2} m_2 v_{20}^2 \left(1 + \frac{m_2}{m_1} \right) = E \quad (18)$$

Después del choque el momento del sistema en el sistema centro de masa es:

$$\bar{\mathbf{P}}'_0 = m_1 \bar{\mathbf{v}}'_{10} + m_2 \bar{\mathbf{v}}'_{20} = 0 \quad (\text{por conservación de } \mathbf{P}); \text{ por lo tanto,}$$

$$\vec{v}'_{10} = -\frac{m_2}{m_1} \vec{v}'_{20} \quad (19)$$

mientras que para los módulos se cumple que

$$v'_{10} = \frac{m_2}{m_1} v'_{20} \quad (20)$$

La energía del sistema después del choque está dada por:

$$E = \frac{1}{2} m_1 v'^2_{10} + \frac{1}{2} m_2 v'^2_{20} = \frac{1}{2} m_1 \frac{m_2^2}{m_1^2} v'^2_{20} + \frac{1}{2} m_2 v'^2_{20} = \frac{1}{2} m_2 v'^2_{20} \left(1 + \frac{m_2}{m_1} \right) = E \quad (21)$$

Por la conservación de E, al comparar las ecs. (18) y (21) se obtiene que

$$v_{20} = v'_{20}$$

Análogamente, comparando las ecs. (17) y (20) se observa que

$$v_{10} = v'_{10}$$

Sea \hat{n}_0 el versor de \vec{v}'_{10} :

$$\vec{v}'_{10} = v'_{10} \hat{n}_0 = v_{10} \hat{n}_0 \Rightarrow \vec{v}'_{10} = \frac{m_2 v \hat{n}_0}{m_1 + m_2};$$

además, por la ec. (19):

$$\vec{v}'_{20} = -\frac{m_1}{m_2} \vec{v}'_{10} \Rightarrow \vec{v}'_{20} = -\frac{m_1 v \hat{n}_0}{m_1 + m_2}$$

Podemos relacionar las velocidades en ambos sistemas después del choque:

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}'_{10} + \vec{v}_{CM} = \frac{m_2 v \hat{n}_0}{m_1 + m_2} + \frac{m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2}{m_1 + m_2} \quad y$$

$$\vec{v}'_2 = \vec{v}'_{20} + \vec{v}_{CM} = -\frac{m_1 v \hat{n}_0}{m_1 + m_2} + \frac{m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2}{m_1 + m_2}.$$

Definiendo $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ y teniendo en cuenta que cuando el blanco está inicialmente

en reposo $\vec{v}_2 = m_2 \vec{P}_2 = 0$ (y por lo tanto $\vec{v} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2 = \vec{v}_1$) podemos escribir para los momentos en el sistema laboratorio:

$$\vec{P}'_1 = m v \hat{n}_0 + \frac{m_1}{m_1 + m_2} m_1 \vec{v};$$

$$\vec{P}'_2 = -m v \hat{n}_0 + m \vec{v}$$

Estas últimas dos ecuaciones pueden visualizarse gráficamente en el siguiente círculo de radio mv :

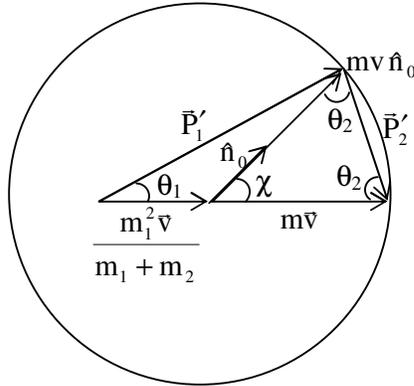


Figura 15. Diagrama de la colisión en los sistemas laboratorio y centro de masa.

En este esquema θ_1 es el desvío que sufre la partícula incidente en el sistema laboratorio y θ_2 indica la dirección en que sale disparada la partícula blanco respecto de la dirección de incidencia (en el sistema laboratorio). La dirección de incidencia está dada por la dirección de $\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 // \mathbf{v}_{10}$. Entonces χ es el ángulo entre \mathbf{v}_{10} y \mathbf{v}'_{10} , es decir, el desvío que sufre el proyectil en el sistema centro de masa.

Considerando el triángulo de la derecha,

$$\chi + 2\theta_2 = \pi \Rightarrow \theta_2 = \pi/2 - \chi/2 ;$$

Además, por el teorema del seno:

$$\frac{\text{sen } \chi}{P'_2} = \frac{\text{sen } \theta_2}{m v} \Rightarrow P'_2 = m v \frac{\text{sen } \chi}{\text{sen } \theta_2} = m v \frac{\text{sen } \chi}{\cos \chi/2} = m v 2 \text{sen } \chi/2 ;$$

por lo tanto:

$$v'_2 = \frac{2m_1 v}{m_1 + m_2} \text{sen } \chi/2 \quad (22)$$

El problema de dos partículas de masas m_1 y m_2 que interactúan puede describirse como el movimiento de una única partícula de masa $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ en un potencial central $U(r)$, con $r = |\vec{r}| = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, donde con \vec{r}_i se indica la posición de la partícula i .

Entonces vamos a considerar el problema equivalente de una única partícula de masa m moviéndose en un potencial central $U(r)$ cuyo centro, que coincide con el centro de masa del sistema de masas m_1 y m_2 , está en reposo, como se indica en la fig. 16.

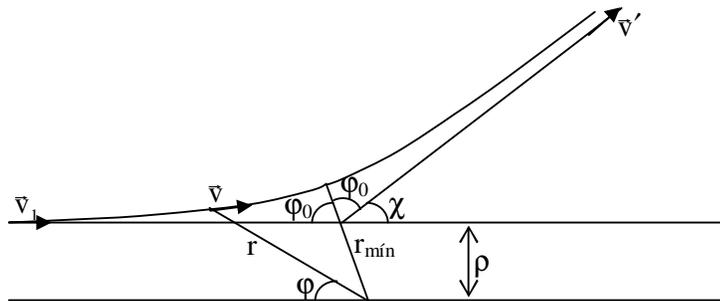


Figura 16. Dispersión en un campo central.

Para el vector \mathbf{v}' podemos escribir:

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v}'_1 - \mathbf{v}'_2 = \frac{\bar{\mathbf{P}}'_1}{m_1} - \frac{\bar{\mathbf{P}}'_2}{m_2} = \frac{m}{m_1} v \hat{\mathbf{n}}_0 + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \bar{\mathbf{v}} + \frac{m}{m_2} v \hat{\mathbf{n}}_0 - \frac{m}{m_2} \bar{\mathbf{v}} ;$$

por lo tanto,

$$\mathbf{v}' = mv \hat{\mathbf{n}}_0 \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)$$

y entonces queda claro que la dirección de \mathbf{v}' es la de $\hat{\mathbf{n}}_0$; esto nos dice que el ángulo χ del problema de un cuerpo ilustrado en la fig. 16 es igual al ángulo χ del problema de dos cuerpos en el sistema centro de masa mostrado en la fig. 15.

Cada posición de la trayectoria de la partícula queda determinada por las coordenadas r y φ , como se muestra en la figura

Para la velocidad podemos escribir:

$$\dot{\mathbf{r}} = \dot{\mathbf{r}}_1 - \dot{\mathbf{r}}_2 = \bar{\mathbf{v}}_1 - \bar{\mathbf{v}}_2 = \bar{\mathbf{v}}$$

Mucho antes de la colisión puede hacerse la aproximación $|\bar{\mathbf{v}}| = |\bar{\mathbf{v}}_1| \equiv v_\infty$. Puesto que el potencial es central, se conserva en impulso angular \mathbf{L} ; luego:

$$\mathbf{L} = \mathbf{mr} \times \mathbf{v} = mrv \sin\varphi \hat{\mathbf{k}} = mv_\infty \rho \hat{\mathbf{k}} = L \hat{\mathbf{k}} ;$$

Por otra parte, expresando en coordenadas polares $\bar{\mathbf{v}} = (\dot{r} \hat{\mathbf{e}}_r + r\dot{\varphi} \hat{\mathbf{e}}_\varphi)$,

donde $\hat{\mathbf{e}}_r$ es la dirección del vector \mathbf{r} y $\hat{\mathbf{e}}_\varphi$ es el versor normal, sobre el plano del movimiento, con sentido hacia los φ crecientes, podemos escribir para el impulso angular:

$$\mathbf{L} = mr\dot{\mathbf{r}} \times (\dot{r} \hat{\mathbf{e}}_r + r\dot{\varphi} \hat{\mathbf{e}}_\varphi) = mr^2\dot{\varphi} \hat{\mathbf{k}} \quad \text{con lo cual, } L = mr^2\dot{\varphi} \quad \Rightarrow \quad \dot{\varphi} = \frac{L}{mr^2} \quad (23)$$

Para la energía mecánica del sistema puede escribirse:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + U(r) = \frac{1}{2}m(\dot{r} \hat{\mathbf{e}}_r + r\dot{\varphi} \hat{\mathbf{e}}_\varphi)^2 + U(r) = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) + U(r)$$

Reemplazando en esta última expresión el valor de $\dot{\varphi}$ dado en ec.(23):

$$E = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + U(r) , \quad (24)$$

de donde puede despejarse

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = \sqrt{\frac{2}{m} \left(E - U - \frac{L^2}{2mr^2} \right)} \quad (25)$$

Por otra parte,

$$d\varphi = \frac{d\varphi}{dt} \frac{dt}{dr} dr = \frac{\dot{\varphi}}{\dot{r}} dr = \frac{L}{mr^2\dot{r}} dr$$

Reemplazando el valor de \dot{r} obtenido en ec. (25):

$$d\varphi = \frac{L dr}{mr^2 \sqrt{\frac{2}{m} \left(E - U - \frac{L^2}{2mr^2} \right)}} \quad (26)$$

Integrando la ec. (26) desde la distancia r_{\min} de máxima proximidad al centro dispersor hasta el infinito, se obtiene el ángulo φ_0 asociado a dicha distancia:

$$\varphi_0 = \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{L dr / r^2}{\sqrt{2m(E - U) - L^2 / r^2}} \quad (27)$$

De acuerdo con la ley de Coulomb la expresión para $U(r)$ viene dada por

$$U(r) = \frac{kze^2}{r} \equiv \frac{\alpha}{r},$$

Donde $\alpha = kze^2$ y k vale 1 en el sistema cgs y $8,988 \cdot 10^9 \text{ Nm}^2/\text{C}^2$ en el MKS. Recordamos que la unidad de carga en el cgs es la ues (unidad electrostática de carga), mientras que en el MKS es el Coulomb (C) y que $1 \text{ C} = 2,998 \cdot 10^9 \text{ ues}$. De aquí en adelante trabajaremos en el sistema cgs, donde $k=1$.

Reemplazando la expresión particular de $U(r)$ en la ec. (27):

$$\varphi_0 = \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{L dr / r^2}{\sqrt{2mE - 2m\alpha/r - L^2 / r^2}}$$

Si hacemos el cambio de variable $u=1/r$ y completamos cuadrados, la integral puede escribirse:

$$\varphi_0 = -L \int \frac{du}{\sqrt{2mE + \frac{m^2 \alpha^2}{L^2} - \left(\frac{m\alpha}{L} + uL \right)^2}} = -L \int \frac{du}{\sqrt{1 - \left(\frac{m\alpha}{L} + uL \right)^2 \frac{L^2}{2mE + \frac{m^2 \alpha^2}{L^2}}}}$$

Ahora introducimos un nuevo cambio de variable:

$$b = \frac{\frac{m\alpha}{L} + uL}{\sqrt{2mE + \frac{m^2 \alpha^2}{L^2}}}; \text{ con lo cual: } db = \frac{L du}{\sqrt{2mE + \frac{m^2 \alpha^2}{L^2}}}$$

Entonces,

$$\varphi_0 = -\int \frac{db}{\sqrt{1-b^2}} = \arccos b = \arccos \left(\frac{\frac{m\alpha}{L} + \frac{L}{r}}{\sqrt{2mE + \frac{m^2 \alpha^2}{L^2}}} \right)_{r_{\min}}^{\infty};$$

Es decir,

$$\varphi_0 = \arccos \left(\frac{\frac{m\alpha}{L}}{\sqrt{2mE + \frac{m^2 \alpha^2}{L^2}}} \right) - \arccos \left(\frac{\frac{m\alpha}{L} + \frac{L}{r_{\min}}}{\sqrt{2mE + \frac{m^2 \alpha^2}{L^2}}} \right) \quad (28)$$

Vamos ahora a calcular r_{\min} a partir de la expresión para la energía dada en la ec. (24):

$$\frac{1}{2} m \dot{r}^2 = E - \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{\alpha}{r}$$

$$r = r_{\min} \Rightarrow \dot{r} = 0 \Rightarrow 0 = E r_{\min}^2 - \frac{L^2}{2mr_{\min}^2} - \alpha r_{\min} ;$$

por lo tanto:

$$r_{\min} = \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 2EL^2/m}}{2E} \quad (29)$$

Llamando I al argumento del segundo arccoseno de la ec. (28) y sustituyendo la expresión para r_{\min} se obtiene:

$$I \sqrt{2mE + \frac{m^2 \alpha^2}{L^2}} = \frac{m\alpha}{L} + \frac{L2E}{\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 2EL^2/m}} = \frac{m\alpha(\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 2EL^2/m}) + 2EL^2}{L(\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 2EL^2/m})} ;$$

luego:

$$\begin{aligned} I &= \frac{m\alpha^2 + m\alpha\sqrt{\alpha^2 + 2EL^2/m} + 2EL^2}{L\sqrt{2mE + \frac{m^2 \alpha^2}{L^2}} \alpha + L\sqrt{\alpha^2 + 2EL^2/m} \sqrt{2mE + \frac{m^2 \alpha^2}{L^2}}} \\ &= \frac{m\alpha^2 + \alpha L\sqrt{\frac{m^2 \alpha^2}{L^2} + 2mE} + 2EL^2}{\alpha L\sqrt{2mE + \frac{m^2 \alpha^2}{L^2}} + \frac{L^2}{m} \left(\frac{m^2 \alpha^2}{L^2} + 2mE \right)} = \frac{m\alpha^2 + \alpha L\sqrt{\frac{m^2 \alpha^2}{L^2} + 2mE} + 2EL^2}{\alpha L\sqrt{2mE + \frac{m^2 \alpha^2}{L^2}} + \alpha^2 m + 2EL^2} = 1 \end{aligned}$$

Por lo tanto, de la ec. (28) se obtiene:

$$\cos \varphi_0 = \frac{m\alpha/L}{\sqrt{2mE + \frac{m^2 \alpha^2}{L^2}}}$$

Vamos ahora a reemplazar L y E en términos de la velocidad v_∞ que trae la partícula de masa m mucho antes del choque ($E = \frac{1}{2} m v_\infty^2$; $L = m v_\infty \rho$):

$$\cos \varphi_0 = \frac{\frac{m\alpha}{m v_\infty \rho}}{\sqrt{m^2 v_\infty^2 + \frac{m^2 \alpha^2}{m^2 v_\infty^2 \rho^2}}} = \frac{\frac{\alpha}{v_\infty \rho}}{m v_\infty \sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{m^2 v_\infty^4 \rho^2}}} = \frac{\frac{\alpha}{m v_\infty^2 \rho}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{m v_\infty^2 \rho} \right)^2}}$$

Recordando que

$$\operatorname{tg} \varphi_0 = \sqrt{\frac{1}{\cos^2 \varphi_0} - 1} ,$$

podemos escribir:

$$\operatorname{tg} \varphi_0 = \frac{1}{\alpha / (m v_\infty^2)} \Rightarrow \rho = \frac{\alpha}{m v_\infty^2} \operatorname{tg} \varphi_0 \quad (30)$$

Como puede verse en la fig. 16, $2\varphi_0 + \chi = \pi$; luego, $\varphi_0 = \pi/2 - \chi/2$. Entonces,

$$\operatorname{tg} \varphi_0 = \frac{\operatorname{sen}(\pi/2 - \chi/2)}{\operatorname{cos}(\pi/2 - \chi/2)} = \frac{\operatorname{cos}(\chi/2)}{\operatorname{sen}(\chi/2)} ;$$

por lo tanto, reemplazando en la ec. (30):

$$\rho = \frac{\alpha}{m v_\infty^2} \operatorname{cotg}(\chi/2) \quad (31)$$

Sección eficaz

Abordemos el concepto de sección eficaz desde un punto de vista distinto al considerado en la página 3. Sea dN el número de partículas que son dispersadas por unidad de tiempo con un ángulo entre χ y $\chi+d\chi$. Si el haz incidente contiene n partículas que por unidad de tiempo atraviesan una sección de área unitaria; la intensidad del proceso de interacción estará dada por:

$$d\sigma = \frac{dN}{n} \quad (32)$$

Esta interpretación es equivalente a pensar que *una* partícula incide por unidad de tiempo en un blanco con n centros dispersores por unidad de área: cambiando el sistema de referencia es como si estos n centros fueran proyectiles que van a impactar contra *la* partícula incidente.

Puesto que para cada parámetro de impacto ρ hay un único ángulo de desvío χ , es decir, $\rho(\chi)$ es una función biunívoca, el número de partículas dispersadas entre χ y $\chi+d\chi$ es también el número de partículas que inciden con ρ entre ρ y $\rho+d\rho$. Este número dN es el producto del área de la corona comprendida por la densidad n del haz incidente:

$$dN = 2\pi n \rho \, d\rho ;$$

sustituyendo en la ec. (32) se obtiene:

$$d\sigma = 2\pi \rho \, d\rho \Rightarrow d\sigma = 2\pi \rho(\chi) \left| \frac{d\rho}{d\chi} \right| d\chi \quad (33)$$

El módulo surge debido a que la sección eficaz es una magnitud positiva y la función $\rho(\chi)$ puede ser decreciente (y usualmente lo es). Utilizando la ec. (31) se tiene que:

$$\frac{d\rho}{d\chi} = \frac{\alpha}{2m v_\infty^2} \frac{-\operatorname{sen}^2(\chi/2) - \operatorname{cos}^2(\chi/2)}{\operatorname{sen}^2(\chi/2)} = -\frac{\alpha}{2m v_\infty^2} \frac{1}{\operatorname{sen}^2(\chi/2)} ;$$

sustituyendo esta expresión en la ec. (33):

$$d\sigma = \pi \left(\frac{\alpha}{mv_{\infty}^2} \right)^2 \frac{\cos(\chi/2)}{\sin^3(\chi/2)} d\chi \Rightarrow d\sigma = \pi \left(\frac{\alpha}{mv_{\infty}^2} \right)^2 \frac{2d(\sin \chi/2)}{\sin^3(\chi/2)} \quad (34)$$

Resulta conveniente expresar la sección eficaz en términos de la energía $Q=m_2v'^2/2$ transferida a la partícula dispersante, que en nuestro caso estaba inicialmente en reposo (en el sistema laboratorio).

Recordando la ec. (22) y teniendo en cuenta que la velocidad relativa v debe considerarse mucho antes del choque ($v=v_{\infty}$):

$$Q = \frac{1}{2} m_2 \frac{4m_1^2 v_{\infty}^2}{(m_1 + m_2)^2} \sin^2 \chi/2 \Rightarrow Q = \frac{2m^2}{m_2} v_{\infty}^2 \sin^2 \chi/2 \quad (35)$$

Entonces,

$$dQ = \frac{4m^2}{m_2} v_{\infty}^2 \sin \chi/2 d(\sin \chi/2) \Rightarrow d(\sin \chi/2) = \frac{m_2}{4m^2 v_{\infty}^2} \frac{dQ}{\sin \chi/2}$$

Sustituyendo esta última expresión en la ec. (34):

$$d\sigma = 2\pi \left(\frac{\alpha}{mv_{\infty}^2} \right)^2 \frac{m_2}{4m^2 v_{\infty}^2} \frac{dQ}{\sin^4(\chi/2)}, \quad (36)$$

pero por la ec. (35) tenemos que:

$$\sin^2 \chi/2 = \frac{m_2}{2m^2 v_{\infty}^2} Q,$$

entonces, reemplazando en (36):

$$d\sigma = 2\pi \frac{\alpha^2}{m_2 v_{\infty}^2} \frac{dQ}{Q^2}$$

Vemos que esta expresión no depende de la masa de la partícula incidente. En nuestro caso, $\alpha=ze^2$; $v_{\infty}=v_1$ y $m_2=m_0$ es la masa del electrón en reposo; por lo tanto:

$$d\sigma = 2\pi \frac{z^2 e^4}{m_0 v_1^2} \frac{dQ}{Q^2} \left[\frac{\text{cm}^2}{e^-} \right] \quad (37)$$

La ec. (37) da la sección eficaz diferencial clásica (de Rutherford), es decir, $d\sigma(Q)$ da la probabilidad de que la partícula incidente pierda una energía entre Q y $Q+dQ$ cuando se encuentra con un electrón por cm^2 .

Si la partícula incidente es un electrón, $z=1$. Vemos, a partir de la ec. (37), que son más probables las colisiones “blandas”, es decir, aquéllas en las que la pérdida de energía es pequeña.

Consideremos ahora un proyectil que atraviesa un espesor ds en un medio con NZ electrones por cm^3 (N es el número de átomos por unidad de volumen). La pérdida de energía experimentada por la partícula incidente al interactuar con los electrones atómicos será:

$$dT = NZ \int Q d\sigma(Q) ds ; \quad (38)$$

es decir, la pérdida de energía por unidad de camino recorrido será, de acuerdo con la ec. (37):

$$\frac{dT}{ds} = NZ 2\pi \frac{z^2 e^4}{m_0 v_1^2} \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} \frac{dQ}{Q} \Rightarrow \frac{dT}{ds} = NZ 2\pi \frac{z^2 e^4}{m_0 v_1^2} \ln\left(\frac{Q_{\max}}{Q_{\min}}\right) \quad (39)$$

Estudiemos cuál es el valor máximo Q_{\max} que puede tomar la energía transferida. Puede mostrarse (problema 1 de la guía 4) que:

$$Q = \frac{2\alpha^2}{m_0 v_1^2} \frac{1}{\rho^2 + (b/2)^2} , \quad (40)$$

donde el “diámetro de colisión” b representa la mínima distancia entre las partículas interactuantes en el caso de choque frontal. En general, el valor mínimo de r es el dado por la ec. (29); si en dicha ecuación consideramos una colisión frontal, se cumple que $L=0$; por lo tanto, $b=\alpha/E$; es decir,

$$b = \frac{2\alpha}{m v_1^2}$$

La máxima transferencia de energía se da precisamente en el caso de choque frontal; la ec. (40) en este caso particular se escribe:

$$Q_{\max} = \frac{2\alpha^2}{m_0 v_1^2} \frac{1}{(b/2)^2} = \frac{2\alpha^2}{m_0 v_1^2} \frac{m^2 v_1^4}{\alpha^2} = \frac{2m_0 m_1^2 v_1^2}{(m_0 + m_1)^2}$$

Si la partícula incidente es un electrón, $m_1=m_0$ y se obtiene que

$$Q_{\max} = \frac{1}{2} m_0 v_1^2 = T ,$$

Como era de esperar.

El gran número de colisiones blandas que predice la ec. (37) hace que la expresión para la pérdida de energía por unidad de camino dada en (39) diverja cuando Q_{\min} es muy pequeña, lo cual no está de acuerdo con la realidad. Esta limitación era previsible, ya que hemos supuesto que el electrón atómico (blanco) es libre, es decir que $Q \gg E_c$. Para describir adecuadamente las colisiones blandas, donde no se cumple que $Q \gg E_c$, es necesario atacar el problema desde el punto de vista cuántico.

Desarrollos basados en la teoría cuántica

Los principales aportes al estudio de las interacciones inelásticas de partículas cargadas con electrones atómicos desde el punto de vista cuántico fueron producidos en los comienzos de la década de 1930 por el inglés Sir Nevill Mott, el danés Christian Möller, el alemán Hans Albrecht Bethe (premio nobel de física en 1967) y el suizo Felix Bloch (premio nobel de física en 1952).

Es conveniente en este contexto dividir las colisiones en duras y blandas, según sea la transferencia de energía. Se consideran duras aquéllas en la que el electrón atómico

puede considerarse libre (como en el formalismo clásico). Es decir, si $Q \gg E_c$ se trata de colisiones duras.

De la conservación de la energía y el momento surge que (ver problema 2 de la guía 4) la máxima energía transferible es:

$$Q_{\text{máx}} = T \frac{1 + 2m_1 c^2 / T}{1 + (m_0 + m_1)^2 c^2 / (2m_0 T)}$$

donde la energía cinética T de la partícula incidente está dada por:

$$T = m_1 \gamma c^2 - m_1 c^2 = \frac{m_1 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} - m_1 c^2 ,$$

con $\beta = v_1/c$. Vemos que si la partícula incidente es un electrón:

$$Q_{\text{máx}} = T \frac{1 + 2m_0 c^2 / T}{1 + 4m_0^2 c^2 / (2m_0 T)} = T ,$$

como en el formalismo clásico.

La pérdida de energía para colisiones duras puede escribirse como

$$\frac{dT_H}{ds} = NZ \int Q d\sigma_H = NZ \int_H^{Q_{\text{máx}}} Q \frac{d\sigma_H}{dQ} dQ ,$$

donde $\frac{d\sigma_H}{dQ}$ es la sección eficaz diferencial para las colisiones duras y H es un valor de

Q arbitrario a partir del cual las colisiones pueden considerarse duras; es decir, a partir del cual el electrón atómico puede considerarse libre: $H \gg E_c$. Las colisiones blandas son aquellas para las que $Q_{\text{mín}} < Q < H$, donde $Q_{\text{mín}}$ es del orden de las menores energías de excitación de los electrones atómicos, ya que desde el punto de vista cuántico no puede transferirse una cantidad de energía menor que esa.

$$\frac{dT_S}{ds} = NZ \int_{Q_{\text{mín}}}^H Q \frac{d\sigma_S}{dQ} dQ$$

La sección eficaz diferencial para colisiones blandas $\frac{d\sigma_S}{dQ}$ se obtiene a partir de la teoría

de perturbaciones aplicando la primera aproximación de Born, que es una aproximación en la solución asintótica de la ecuación de Schrödinger para la onda dispersada (mucho después de la colisión). Para llegar a la solución aproximada debe hacerse la hipótesis de que la partícula incidente (considerada como una onda plana) en todo momento tiene una energía cinética mucho mayor que el potencial dispersor $U(r)$ (supuesto radial). Entonces, esta aproximación funciona bien para potenciales débiles y energías de incidencia altas, lo que resulta en energías transferidas Q pequeñas. Análogamente a lo visto para el proceso de creación de pares, la condición $T \gg U$ conduce a la condición $zZ/(137 \beta) \ll 1$. Debe quedar claro que una cosa es Q pequeña (colisiones blandas) y otra muy distinta es β pequeña (no vale la primera aproximación de Born).

La pérdida total de energía por unidad de camino para este tipo de interacciones estará dada por

$$\frac{dT}{ds} = \frac{dT_H}{ds} + \frac{dT_S}{ds} , \quad (41)$$

pero como las colisiones duras son mucho menos probables que las blandas, se suele hacer la aproximación

$$\frac{dT}{ds} = NZ \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} Q \frac{d\sigma_s}{dQ} dQ ,$$

como si todas las colisiones fueran blandas. A continuación trataremos por separado ambos tipos de colisiones.

Colisiones duras para electrones incidentes

Cuando un electrón de energía cinética T colisiona con otro entregándole una energía Q , el resultado observable es dos electrones con energías cinéticas Q y $T-Q$, pero es imposible saber cuál de ellos era el electrón incidente. Se “define” arbitrariamente el electrón incidente como el de mayor energía. Esto significa que el máximo valor posible de Q es $Q_{\max}=T/2$.

Según la expresión clásica, dada en el a ec. (37), la sección eficaz sería

$$d\sigma = 2\pi \frac{e^4}{m_0 v_1^2} \frac{dQ}{Q^2}$$

Como en este caso las partículas interactuantes son indistinguibles, a la probabilidad de que una partícula adquiriera una energía Q (y que la otra quede con $T-Q$), hay que agregarle la probabilidad de que se transfiera una energía $T-Q$ y que la otra partícula quede con $T-(T-Q)=Q$; entonces:

$$d\sigma = 2\pi \frac{e^4}{m_0 v_1^2} \left(\frac{dQ}{Q^2} + \frac{dQ}{(T-Q)^2} \right) = 2\pi \frac{e^4}{m_0 v_1^2} \left(\frac{(T-Q)^2 + Q^2}{Q^2 (T-Q)^2} \right) dQ ;$$

es decir,

$$d\sigma = 2\pi \frac{e^4}{m_0 v_1^2} \frac{dQ}{Q^2} \left(\frac{T}{T-Q} \right)^2 \left[1 - 2\frac{Q}{T} + 2\left(\frac{Q}{T} \right)^2 \right] \text{ cm}^2 / \text{electrón} \quad (42)$$

Esta expresión sigue siendo una sección eficaz clásica para $Q < T/2$, es decir, para $Q < T/2$, mientras que vale cero para $Q \geq T/2$. Para obtener la sección eficaz total σ hay que integrar la ec. (42) sólo hasta $T/2$.

Para tener en cuenta efectos cuánticos y relativistas, Möller calculó $d\sigma$ a partir de la teoría de Dirac del electrón, despreciando la ligadura del electrón blanco. El resultado obtenido con este tratamiento es:

$$d\sigma = \frac{2\pi e^4}{m_0 v_1^2} \frac{dQ}{Q^2} \left(\frac{T}{T-Q} \right)^2 \left\{ 1 - \left[3 - \left(\frac{T}{T+m_0 c^2} \right)^2 \right] \frac{Q}{T} \left(1 - \frac{Q}{T} \right) + \left(\frac{Q}{T+m_0 c^2} \right)^2 \left(1 - \frac{Q}{T} \right)^2 \right\} \quad (43)$$

Puede verse que para $Q \ll T$, la expresión entre llaves tiende a la unidad; es decir, en el límite de las colisiones blandas la expresión cuántica (43) tiende a la expresión clásica (42) (ver fig. 17). De todas maneras en ese límite ambas expresiones son incorrectas, ya

que no vale más la hipótesis de electrón libre para el blanco, suposición hecha tanto en el formalismo clásico de Rutherford como en el cuántico relativista de Mott. Para estudiar las colisiones blandas debe hacerse un tratamiento diferente.

Figura 17. Sección eficaz de Möller (ec. 43) relativa a la expresión clásica (ec. 42).

Como dijimos, en las colisiones duras $Q \gg E_c$; entonces, dentro de este tipo de interacciones podemos considerar las que correspondan a una energía de ligadura muy pequeña (siempre que Q sea suficientemente grande); este es el caso de la excitación de plasmones y de la generación de electrones secundarios.

Excitación de plasmones. Especies metálicas, tales como aluminio o cobre, tienen electrones poco ligados y no pueden ser atribuidos a un átomo específico. Estos electrones forman parte de un "mar" o "gas" de electrones libres el cual rodea a los iones. El movimiento de electrones energéticos en este mar de electrones libres puede provocar la generación de ondas (plasmones). Debido a la regularidad de la estructura cristalina, la energía de estas ondas tiende a tomar un valor específico. Para el caso del aluminio la excitación de un plasmón involucra una transferencia de alrededor de 15 eV del electrón incidente al gas de electrones libres en el sólido.

Excitación de electrones secundarios. La dispersión inelástica de los electrones incidentes en un semiconductor o aislador puede promover el movimiento de electrones de la banda de valencia a la de conducción con energía suficiente para que continúen moviéndose a través del sólido. Este proceso también puede ocurrir directamente en los electrones de la banda de conducción de un metal. Estos electrones, inicialmente ligados son llamados electrones secundarios y se propagan perdiendo su energía en choques inelásticos. Si cuando alcanzan la superficie, todavía tienen energía suficiente para traspasar la barrera superficial de energía, escapan del sólido. La mayoría de estos electrones tienen energías menores que 10 eV; por este motivo los que abandonan la muestra son generados muy cerca de la superficie, aportando información detallada de su topografía. Estos electrones secundarios conforman la principal señal que se utiliza en microscopía electrónica de barrido.

Colisiones blandas

En este contexto se sigue utilizando la primera aproximación de Born, válida para potencial débil en comparación con la energía cinética del proyectil. El formalismo de las colisiones blandas es particularmente útil para el estudio de ionización de capas atómicas internas, ya que la energía transferida es del orden de las energías de

ionización de dichas capas, situación en la que la probabilidad de ionización es importante. H. Bethe desarrolló el problema sin consideraciones relativistas, inicialmente para el átomo de hidrógeno y luego lo extendió a otros átomos. Para el hidrógeno utilizó un potencial coulombiano entre el electrón atómico y el núcleo y dos términos perturbativos: uno entre la partícula incidente y el núcleo y otro entre la partícula incidente y el electrón atómico. Para otros átomos con $Z > 1$, el primer término perturbativo está asociado a la interacción entre la partícula incidente y el núcleo junto con $Z-1$ electrones atómicos.

Ionización de capas atómicas internas. El resultado obtenido por Bethe para la sección eficaz de ionización de la capa atómica c es:

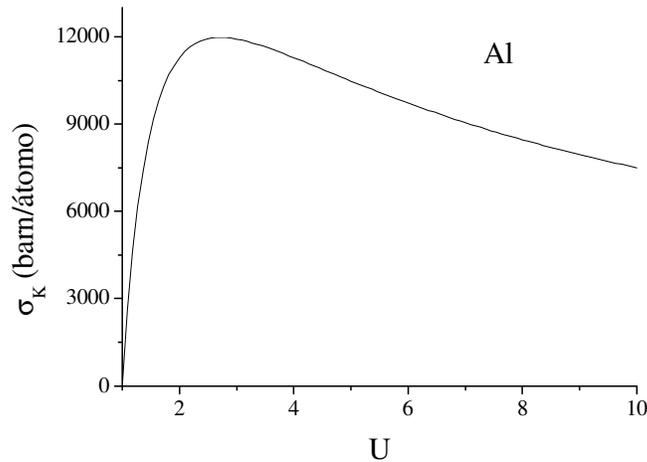


Figura 18. Sección eficaz de ionización por impacto de electrones para la capa K del aluminio en función del sobrevoltaje.

$$\sigma_c = \frac{a \ln(bT/E_c)}{TE_c} \quad , \quad (44)$$

donde a y b son constantes y E_c es la energía de ligadura del electrón. En la fig. 18 puede verse un gráfico de esta sección eficaz de ionización para la capa K del aluminio en función del sobrevoltaje $U=E/E_c$. Puede verse que para $U=1$ la sección eficaz cae abruptamente a cero; esto se debe a que para energías menores la partícula incidente no es capaz de arrancar el electrón ligado. La curva de σ_c en función de U tiene para todos los elementos y capas atómicas internas un máximo que en general está alrededor de $U=2,5$.

Una vez que se produce una interacción de este tipo, el átomo queda en un estado excitado. El decaimiento de este estado va acompañado por la emisión de un rayo x característico o un electrón Auger (o ambos, en el caso menos probable de efecto Auger radiativo).

Para la pérdida de energía por unidad de camino Bethe obtuvo:

$$\frac{dT_s}{ds} = NZ 4\pi \frac{z^2 e^4}{m_0 v_1^2} \ln \left(\frac{k m_0 v_1^2}{I} \right) \quad (45)$$

En esta expresión, que tiene en cuenta la pérdida de energía por interacciones con todas las capas atómicas, k es una constante que vale 2 para partículas pesadas y $\sqrt{1/2}$ para electrones y positrones. La cantidad I se denomina potencial medio de ionización y está relacionada con la Q_{\min} transferible: I es la media geométrica de todas las energías de ionización y excitación de los electrones ligados. Existen distintas expresiones para el potencial medio de ionización. En primera aproximación puede decirse que I es proporcional a Z . Además puede verse que I depende de T , ya que si $T > E_c$, la capa c debe incluirse para tomar el promedio de las energías de excitación y ionización, mientras que si $T < E_c$, no debe tenerse en cuenta; esto se conoce como efecto de capas.

El propio Bethe más adelante introdujo una corrección relativista para tener en cuenta evaluar correctamente la interacción de electrones de alta energía; con este agregado la ec. (45) para electrones adopta la forma:

$$\frac{dT_s}{ds} = NZ 2\pi \frac{z^2 e^4}{m_0 v_1^2} \left\{ \ln \left[\frac{2m_0 v_1^2 H}{I^2 (1-\beta^2)} \right] - \beta^2 \right\} \quad (46)$$

donde H es la energía de transferencia de corte, por encima de la cual se considera que las colisiones son duras.

Uno de los procesos más frecuentes por los cuales un electrón que atraviesa un medio material pierde energía en colisiones blandas es la excitación de fonones.

Excitación de fonones. Una gran parte de la energía transferida a un sólido por los electrones incidentes, se realiza a través de colisiones con pequeñas pérdidas de energía (< 1 eV) que producen oscilaciones en la red cristalina (fonones), este fenómeno se manifiesta como un calentamiento del material. Este efecto reviste importancia en microscopía electrónica, donde un haz de electrones se hace incidir sobre la muestra a estudiar, debido al daño térmico que puede producirse en la misma. Si la muestra es extensa, la región donde los electrones transfieren su energía está en contacto con una gran área de la materia que la rodea, de tal manera que existe una buena conductividad térmica, aun en el caso de muestras no metálicas. El incremento de la temperatura en el punto de impacto del haz de electrones es de unos pocos grados Celsius (caso típico de los microscopios de barrido para una corriente del haz de 1 nA). Para muestras delgadas o altas corrientes (> 1 μ A) en muestras extensas no conductoras, el incremento de temperatura puede llegar a varios centenares de grados Celsius. Las ondas acústicas que resultan de la conversión de la energía térmica depositada mientras el haz de electrones barre un área, pueden ser detectadas con un transductor. Este fenómeno constituye la base de la "microscopía de ondas térmicas" (TWM).

Pérdida de energía para partículas livianas

Como habíamos visto en la ec. (41), la pérdida de energía por colisiones inelásticas con electrones debe calcularse teniendo en cuenta tanto las colisiones blandas como las duras. Si bien las colisiones blandas son mucho más probables, alrededor de la mitad de la energía de la partícula incidente se pierde en unas pocas colisiones duras mientras que el resto, en un gran número de colisiones blandas. Puesto que la ec. (43) conduce a una

expresión complicada para $\frac{dT_H}{ds}$ y que extender la ec. (46) desarrollada para colisiones blandas hasta $H=Q_{m\acute{a}x}=T/2$, produce un error similar a las incertezas en las teorías (~5%), usualmente se hace esta última aproximación, de manera que:

$$\frac{dT}{ds} \cong \frac{dT_S}{ds} \Big|_{H=T/2} = NZ 2\pi \frac{z^2 e^4}{m_0 v_1^2} \left\{ \ln \left[\frac{m_0 v_1^2 T}{I^2 (1-\beta^2)} \right] - \beta^2 \right\} \quad (47)$$

para todas las colisiones (duras y blandas) que tienen lugar cuando la partícula incidente recorre un camino ds . Asumir esto es suficientemente exacto para electrones y positrones no extremadamente relativistas, donde el espín y el signo de la carga producen efectos observables. En particular, para electrones no relativistas la ec. (47) se reduce a:

$$\frac{dT}{ds} = NZ 2\pi \frac{e^4}{m_0 v_1^2} \ln \left(\frac{2T^2}{I^2} \right) = NZ 4\pi \frac{e^4}{m_0 v_1^2} \ln \left(\frac{m_0 v_1^2}{\sqrt{2} I} \right), \quad (48)$$

que es la ec. (45) para electrones y positrones. En un trabajo posterior Bethe y Ashkin muestran que la constante k de la ec. (45) para electrones y positrones debería valer $\frac{1}{2}\sqrt{e/2}$ (donde e es la base de los logaritmos naturales) en lugar de $\sqrt{1/2}$. Con esta corrección, teniendo en cuenta que $N=N_A\rho/A$ (donde N_A es el número de Avogadro, ρ es la densidad del material y A su peso atómico), la expresión para la pérdida de energía en ionizaciones y excitaciones queda:

$$\frac{dT}{ds} = 7,85 \cdot 10^4 \frac{Z\rho}{AT} \ln \left(\frac{1,166T}{I} \right) \text{ keV/cm} \quad (49)$$

Utilizar expresiones como la ec. (49) para describir el frenado de una partícula cargada supone hacer una aproximación por la cual se considera que en lugar de interactuar de manera discreta las partículas van perdiendo su energía en forma continua. Esto se conoce como aproximación de pérdida continua de energía o CSDA (*continuous slowing down approximation*).

Existen algunas definiciones de interés biológico relacionadas con las ionizaciones producidas por un electrón que atraviesa un medio material; en primer lugar, cabe señalar que en el contexto biológico se suele llamar *transferencia lineal de energía* o LET, por sus siglas en inglés, a la pérdida de energía en ionizaciones-excitaciones por unidad de camino (lineal). La pérdida de energía en radiación de frenado se excluye de esta definición ya que se pretende considerar sólo la energía depositada en el entorno de la trayectoria del electrón.

Por otro lado, se denomina *ionización específica*, I.E., al número de pares iónicos creados por longitud de camino recorrido. Esta magnitud depende del medio material y del tipo de partícula incidente; por ejemplo, la I.E. para una partícula alfa en agua es del orden de 100 veces mayor que para un electrón en el mismo medio. Típicamente la I.E. se expresa en keV/mm. La energía ϖ necesaria para crear un par iónico, queda determinada por:

$$\varpi = \frac{LET}{I.E.}; \quad [\varpi] = \frac{eV}{n^\circ \text{ de pares creados}}$$

Por ejemplo: $\varpi_{aire} \cong 33,7 \text{ eV/par}$.

Colisiones elásticas de electrones y positrones con núcleos (2.b)

La partícula incidente sólo cede una pequeñísima cantidad de energía al núcleo para que se conserve el impulso del sistema. Para todo efecto práctico se puede considerar que el proyectil sólo se refleja, sin perder energía (hay que tener en cuenta que la masa M del núcleo es mucho mayor que la masa m_0 de la partícula incidente).

Teoría clásica

La dispersión del electrón o positrón incidente se produce por interacción coulombiana con la carga del núcleo atómico (dispersión Rutherford). Como resultado de esta interacción, el electrón es desviado de su trayectoria un ángulo $\theta_{\text{elás}}$ que puede tomar cualquier valor comprendido entre 0 y π radianes, pero con un valor más probable entre 2° y 5° . Esto quiere decir que en la mayoría de los choques elásticos con núcleos el proyectil continúa casi en la dirección de incidencia, pero hay unos pocos donde puede desviarse fuertemente de su trayectoria.

En la ec. (34) para la sección eficaz diferencial en términos de ángulo de desvío podemos hacer la aproximación $m \cong m_1$, ya que en este caso, $m = m_1M/(m_1+M)$ y $M \gg m_1$. Además, v_∞ es v_1 y el sistema centro de masa prácticamente coincide con el sistema laboratorio, de manera que el ángulo χ es casi coincidente con el ángulo de dispersión θ_2 de la partícula incidente en el sistema laboratorio, que llamaremos θ por simplicidad. Con estas consideraciones en mente la ec. (34) toma la forma

$$d\sigma = \pi \left(\frac{\alpha}{m_1 v_1^2} \right)^2 \frac{2d(\text{sen } \theta/2)}{\text{sen}^3(\theta/2)} \quad (50)$$

La sección eficaz para dispersiones elásticas para ángulos mayores que un ángulo arbitrario θ se obtiene integrando la ec. (50):

$$\begin{aligned} \sigma(\geq \theta) &= \pi \left(\frac{\alpha}{m_1 v_1^2} \right)^2 \int_{\theta}^{\pi} \frac{2d(\text{sen } \theta/2)}{\text{sen}^3(\theta/2)} = -\pi \left(\frac{\alpha}{m_1 v_1^2} \right)^2 \text{sen}^{-2}(\chi/2) \Big|_{\theta}^{\pi} \\ \therefore \sigma(\geq \theta) &= \pi \left(\frac{\alpha}{m_1 v_1^2} \right)^2 [\text{cosec}^2(\theta/2) - 1] = \pi \left(\frac{\alpha}{m_1 v_1^2} \right)^2 \cot^2(\theta/2) \end{aligned}$$

O bien, en términos del diámetro de la colisión $b = \frac{2\alpha}{mv_1^2} \cong \frac{2\alpha}{m_1 v_1^2}$:

$$\sigma(\geq \theta) = \frac{\pi b^2}{4} \cot^2(\theta/2) \quad (51)$$

Si las velocidades no son relativistas es $m_1 = m_0$ y recordando que en este caso $\alpha = kZe^2$ la expresión de Rutherford dada en la ec. (51) adopta la forma más familiar

$$\sigma(> \theta) = 1,628 \cdot 10^{-20} \frac{Z^2}{T^2} \cot^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \text{ cm}^2 / \text{átomo} \quad (52)$$

donde la energía cinética T del electrón incidente está dada en keV.

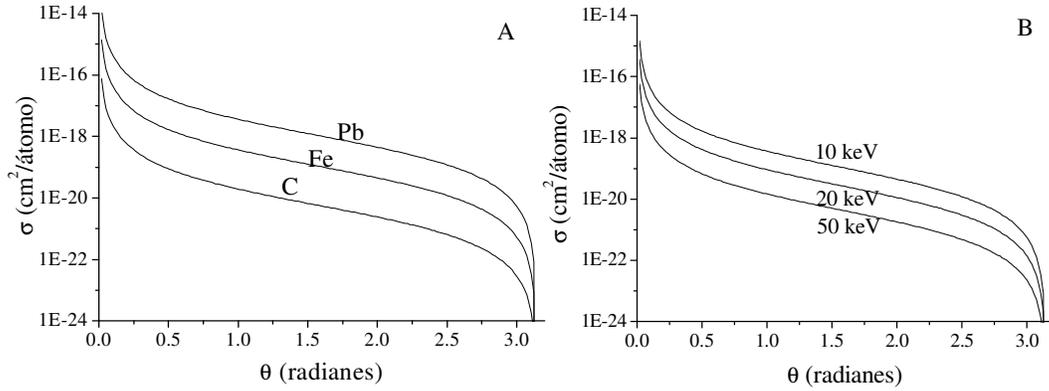


Figura 19. Sección eficaz de dispersión elástica con núcleos. A: para C, Fe y Pb a 10 keV; B: para Fe a 10, 20 y 50 keV.

En la figura 19 se observan gráficos correspondientes a la ec. (51) en escala semi-logarítmica. Estas gráficas revelan una fuerte dependencia del ángulo de dispersión θ con Z y T , ya que la sección eficaz σ crece con el cuadrado de Z y decrece con el cuadrado de T . También se puede observar que, cuanto más pequeño es el ángulo de dispersión, la sección eficaz crece más abruptamente.

Si la velocidad de la partícula incidente es relativista, $v_1 = \beta c$ y $m_1 = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}}$, la ec. (50)

se escribe:

$$d\sigma = \pi \frac{\alpha^2}{m_1^2 v_1^4} \frac{2d(\sin \theta/2)}{\sin^3(\theta/2)} = \pi \frac{\alpha^2 (1-\beta^2)}{m_0^2 \beta^4 c^4} \frac{\cos(\theta/2)}{\sin^3(\theta/2)} d\theta$$

$$\therefore d\sigma = \pi \frac{k^2 Z^2 e^4 (1-\beta^2)}{m_0^2 \beta^4 c^4} \frac{\cos(\theta/2)}{\sin^3(\theta/2)} d\theta \quad (53)$$

Integrando la ec. (50) entre θ y π se obtiene:

$$\sigma(\geq \theta) = \pi k^2 Z^2 \left(\frac{e^2}{m_0 c^2} \right)^2 \frac{1-\beta^2}{\beta^4} \cot^2 g^2(\theta/2),$$

que es la versión relativista de la ec. (51). Por otra parte, la sección eficaz diferencial (ec. 53) puede expresarse en términos del ángulo sólido

$$d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta = 4\pi \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) d\theta :$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k^2 Z^2}{4} \left(\frac{e^2}{m_0 c^2} \right)^2 \frac{(1-\beta^2)}{\beta^4} \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \quad (54)$$

Teoría cuántica

Desde este punto de vista los electrones o positrones no son partículas que viajan por una trayectoria determinada con un parámetro de impacto ρ definido, sino que pueden

representarse con una onda sin ubicación definida. La mecánica clásica resulta una buena aproximación cuando el principio de incerteza de Heisemberg no impone ninguna condición apreciable sobre la posibilidad de observar las trayectorias individuales con instrumentos perfectos o ideales.

Consideremos el siguiente experimento (ver fig. 20): un haz de partículas cargadas (de carga $-ze$) incide sobre una pantalla con una rendija cuya ubicación está asociada al parámetro de impacto de los proyectiles que la atraviesan, respecto de un núcleo que actúa como centro dispersor. Se pretende medir el impulso P transferido al núcleo por uno de esos proyectiles y el parámetro de impacto correspondiente $\rho=x$.

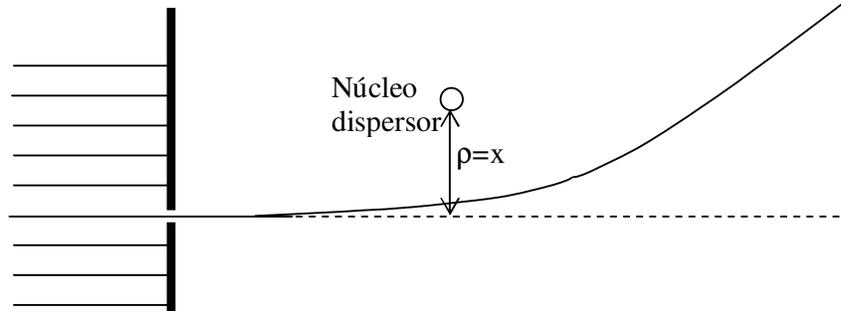


Figura 20. Experimento ideal: dispersión de una partícula cargada por un núcleo.

Si los instrumentos son ideales, se tiene que la incerteza en la determinación de P y de x es sólo de tipo cuántico: $\Delta P \Delta x = \hbar$. Vamos a considerar el caso particular de una deflexión muy pequeña, que puede obtenerse ubicando la rendija lejos del núcleo (x es grande). En este caso, el momento transferido es esencialmente en la dirección de x : $P \cong P_x$. Clásicamente,

$$P = \bar{F} \Delta t ,$$

donde Δt es el tiempo durante el cual puede considerarse que actúa la fuerza de interacción \bar{F} promediada “durante” la interacción, la cual puede ser aproximada por:

$$\bar{F} = \frac{zZe^2}{x^2}$$

En realidad, actúa una fuerza variable durante todo el tiempo, pero estamos considerando que fuera del intervalo Δt es despreciable. Este intervalo está asociado al tramo de trayectoria donde la interacción es más intensa, el cual dependerá de la distancia x . Asumiendo que la fuerza efectiva \bar{F} actúa durante el intervalo efectivo Δt mientras la partícula incidente recorre un tramo de longitud $2x$ centrado en el punto de máximo acercamiento, será $\Delta t = 2x/v_1$ y entonces podemos escribir:

$$P \cong 2 \frac{zZe^2}{xv_1}$$

Si toleramos una incerteza en P del 100% debida al principio de incertidumbre, la incerteza mínima en la determinación de x a la que se podrá aspirar con instrumentos ideales será:

$$(\Delta x)_{\text{mín}} = \frac{\hbar}{\Delta P} = \frac{\hbar}{P} \cong \frac{\hbar v_1 x}{2zZe^2},$$

o bien:

$$\left(\frac{\Delta x}{x}\right)_{\text{mín}} \cong \frac{\hbar c}{e^2} \frac{\beta}{2zZ} = \frac{137\beta}{2zZ}$$

Para que la incertidumbre cuántica no perturbe (demasiado) la determinación de x y la aproximación clásica tenga validez, la incerteza mínima para la determinación del parámetro de impacto debería ser pequeña; es decir, para que el formalismo clásico sea aplicable debería cumplirse que

$$\left(\frac{\Delta x}{x}\right)_{\text{mín}} \ll 1,$$

o sea:

$$\frac{2zZ}{137\beta} \gg 1 \quad (55)$$

La desigualdad (55) corresponde a la dispersión de partículas lentas por núcleos pesados. La mayoría de las situaciones de interés escapan a este dominio de validez de la física clásica y es necesario realizar un tratamiento cuántico. Afortunadamente en la mayoría de los casos se cumple que

$$\frac{2zZ}{137\beta} \ll 1,$$

es decir, puede aplicarse la primera aproximación de Born. Mott, aplicando la teoría cuántica relativista del electrón de Dirac en la primera aproximación de Born, obtuvo la sección eficaz diferencial $d\sigma/d\Omega$ en términos de una serie infinita. Posteriormente, McKinley y Feshbach partiendo de la expresión “exacta” de Mott, obtuvieron la siguiente expresión analítica aproximada:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Mott}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Ruth}} \left\{ 1 - \beta^2 \sin^2(\theta/2) \pm \pi\beta \frac{Z}{137} [1 - \sin(\theta/2)] \sin(\theta/2) \right\}, \quad (56)$$

donde $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Ruth}}$ es la sección eficaz diferencial clásica de Rutherford dada en la ec.

(54); los signos \pm corresponden a electrones y positrones, respectivamente. Esto último nos dice que la sección eficaz de Mott es algo mayor para electrones que para positrones. La ec. (56) se aproxima a la sección eficaz clásica en el límite de bajas velocidades y deflexiones pequeñas.

Para partículas incidentes que pasan por fuera de la capa K se produce un apantallamiento del campo del núcleo y las deflexiones son reducidas (o eliminadas). Por otra parte, proyectiles de muy alta energía, que tienen colisiones más frontales, a veces atraviesan parte del núcleo, por lo que el campo se reduce y las deflexiones son menores que si se considera al núcleo como una carga puntual.

Es importante mencionar que las secciones eficaces consideradas se refieren a dispersión simple, es decir, una única interacción por vez. El estudio conjunto de un número pequeño de dispersiones se denomina dispersión plural y es de difícil

tratamiento; sin embargo, el estudio de un gran número de dispersiones como si fueran una sola es abordable utilizando herramientas de la estadística y constituye lo que se denomina dispersión múltiple. La dispersión múltiple es esencial en simulaciones Monte Carlo, como se verá más adelante.

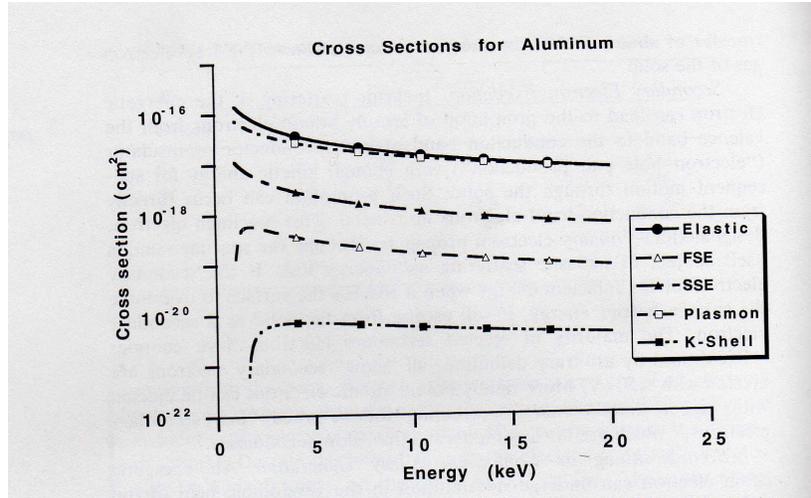


Figura 21. Secciones eficaces en función de la energía incidente para dispersión elástica con núcleos y varios procesos inelásticos en aluminio: plasmones, electrones secundarios con energías mayores que 50 eV (FSE) y menores que 50 eV (SSE) y ionizaciones de la capa atómica más interna (capa K).

En la fig. 21 se comparan las secciones eficaces integrales de los distintos procesos estudiados hasta aquí. Debe notarse que el eje de las ordenadas está en escala logarítmica, lo que indica una gran diferencia de probabilidad de que ocurran los distintos tipos de interacción.

Deflexiones debidas a colisiones inelásticas de electrones y positrones con electrones (1.a)

Teoría clásica

Hasta aquí, al referirnos a las colisiones inelásticas con electrones atómicos, nos hemos centrado en la energía transferida en la interacción; en esta sección estudiaremos la desviación angular que este tipo de interacciones ocasiona en la trayectoria de la partícula incidente. Como ya se dijo, se supone el electrón blanco como si fuera libre, es decir, $T_1 \gg E_c$. Puesto que vamos a considerar sólo electrones y positrones como partículas incidentes, el diagrama ilustrado en la fig. 15 adopta la forma particular que se muestra en la fig. 16.

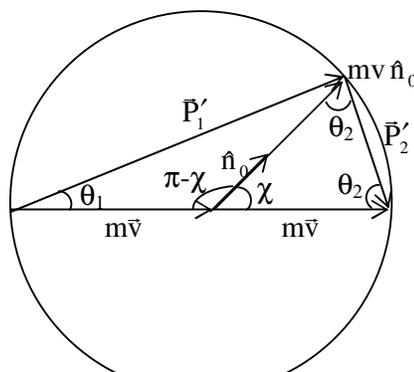


Figura 16. Diagrama de la colisión de dos partículas de igual masa $m_0 = 2m$ en los sistemas laboratorio y centro de masa. La partícula 2 está inicialmente en reposo en el sistema laboratorio.

Puede verse claramente que:

$$2\theta_1 + \pi - \chi = \pi \Rightarrow \theta_1 = \chi/2 \quad \text{y} \quad \theta_1^{\text{máx}} = \chi_{\text{máx}}/2 = \pi/2 ;$$

$$2\theta_2 + \chi = \pi \Rightarrow \theta_2 = \pi/2 - \chi/2 \quad \text{y} \quad \theta_2^{\text{máx}} = \pi/2$$

y por lo tanto, $\theta_2 = \pi/2 - \theta_1$

Entonces:

$$\frac{d\sigma}{d\theta_1} = \frac{d\sigma}{d\chi} \frac{d\chi}{d\theta_1} = 2 \frac{d\sigma}{d\chi}$$

Teniendo en cuenta la ec. (34):

$$\frac{d\sigma}{d\theta_1} = 2\pi \left(\frac{\alpha}{m v_\infty^2} \right)^2 \frac{\cos(\theta_1)}{\text{sen}^3(\theta_1)} ,$$

o bien, recordando que en este caso $\alpha = e^2$ (en el sistema cgs), que $m = m_0/2$ y que $v_\infty = v_1$:

$$\frac{d\sigma}{d\theta_1} = 8\pi \left(\frac{e^2}{m_0 v_1^2} \right)^2 \frac{\cos(\theta_1)}{\text{sen}^3(\theta_1)} \quad (57)$$

En términos del diferencial de ángulo sólido $d\omega = 2\pi \text{sen}\theta_1 d\theta_1$ alrededor del ángulo de dispersión θ_1 del sistema laboratorio, la ec. (57) se escribe:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = 4 \left(\frac{e^2}{m_0 v_1^2} \right)^2 \frac{\cos(\theta_1)}{\text{sen}^4(\theta_1)} \quad (58)$$

La sección eficaz de dispersión hacia ángulos mayores que un ángulo arbitrario θ se obtiene integrando la ec. (57):

$$\begin{aligned} \sigma(>\theta) &= 8\pi \left(\frac{e^2}{m_0 v_1^2} \right)^2 \int_\theta^{\pi/2} \frac{\cos(\theta_1)}{\text{sen}^3(\theta_1)} d\theta_1 = -8\pi \left(\frac{e^2}{m_0 v_1^2} \right)^2 \frac{1}{2\text{sen}^2(\theta_1)} \Big|_\theta^{\pi/2} \\ \therefore \sigma(>\theta) &= 4\pi \left(\frac{e^2}{m_0 v_1^2} \right)^2 \cot^2 \theta \end{aligned} \quad (59)$$

Teoría cuántica

A partir de un tratamiento cuántico, considerando las propiedades de simetría requeridas para la función de onda en el caso de partículas idénticas Mott obtuvo:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = 4 \left(\frac{e^2}{m_0 v_1^2} \right)^2 \cos(\theta_1) \left[\frac{1}{\sin^4(\theta_1)} + \frac{1}{\cos^4(\theta_1)} + \left\{ \begin{array}{c} 0 \\ -1 \end{array} \right\} \frac{1}{\sin^2(\theta_1) \cos^2(\theta_1)} \right] \quad (60)$$

donde la expresión entre llaves vale 0 para positrones y -1 para electrones (caso de partículas indistinguibles) incidentes.

Vemos que para dispersiones a ángulos pequeños (y para positrones, no tan pequeños), la expresión de cuántica de Mott (ec. 60) se aproxima a la clásica de Rutherford (ec. 58). La ec. (60) es no relativista; para considerar efectos relativistas es necesario retomar la fórmula de Möller (ec. 43) en términos de la energía transferida Q expresándola en función del ángulo de dispersión mediante la ec. (35).

Las ecs. (58) y (60) dan la sección eficaz de dispersión electrónica por electrón; para expresarla "por átomo" hay que multiplicar por el número Z de electrones que tiene cada átomo; por lo tanto:

$$\left(\frac{d\sigma_{el}}{d\omega} \right)_{\text{át}} \propto Z \left(\frac{e^2}{m_0 v_1^2} \right)^2 ; \quad (61)$$

mientras que, como vimos en las ec. (54) y (56), en primera aproximación:

$$\left(\frac{d\sigma_{nuc}}{d\Omega} \right)_{\text{át}} \propto Z^2 \left(\frac{e^2}{m_0 v_1^2} \right)^2 \quad (62)$$

En las ecs. (61) y (62), σ_{el} y σ_{nuc} indican las secciones eficaces de dispersiones por electrones y por núcleos, respectivamente. En el tratamiento de dispersiones múltiples se suele tener en cuenta la dispersión por electrones reemplazando Z^2 por $Z^2 + Z$ en la ec. (62).

Interacciones inelásticas con núcleos atómicos: Bremsstrahlung (1.b)

Cuando los electrones incidentes interactúan con el campo coulombiano del núcleo, se ven acelerados, lo que puede dar como resultado la emisión de un fotón, cuya energía dependerá de la intensidad de la interacción. Esta radiación es conocida como Bremsstrahlung o radiación de frenado. Los fotones originados en este frenado en los campos de los núcleos tienen un espectro continuo de energía (desde cero hasta la energía del electrón incidente).

Teoría clásica

Toda partícula cargada acelerada, de masa m_1 y carga $-ze$ emite radiación con una amplitud proporcional a la magnitud de la aceleración. La intensidad I de esta radiación es, a su vez, proporcional al cuadrado de la amplitud; luego:

$$I \propto \left(\frac{F}{m_1} \right)^2 \propto \left(\frac{zZe^2}{m_1} \right)^2$$

Como la intensidad de la radiación es proporcional a la inversa del cuadrado de la masa de la partícula incidente, para proyectiles con la misma carga (en valor absoluto) a mayor masa corresponderá una radiación mucho menos intensa. Por ejemplo, para un mesón, de masa $\sim 200 m_0$, la intensidad de la radiación es alrededor de 40000 veces menor que la correspondiente a un electrón; mientras que para un protón la intensidad es del orden de un millón de veces menor. Por este motivo, mediante el bombardeo a un material con protones (emisión de rayos x inducida por protones, PIXE) se obtienen espectros prácticamente sin el fondo debido a Bremsstrahlung que resulta mediante bombardeo con electrones (microanálisis con sonda de electrones, EPMA).

Una partícula cargada puede emitir en cada deflexión una energía E entre 0 y la energía cinética inicial T .

$$I \propto \left(\frac{F}{m_1} \right)^2 \propto \left(\frac{zZe^2}{m_1} \right)^2$$

A partir de ahora consideraremos sólo el Bremsstrahlung producido por electrones incidentes.

Teoría cuántica

El electrón es considerado como una onda plana que incide sobre el campo del núcleo. Esta onda se dispersa y existe una pequeña probabilidad de que se emita un fotón. La onda (electrón) dispersada interactúa, en esos casos, no sólo con el campo del núcleo, sino también con el fotón emitido. Hans Albrecht Bethe y Walter Heinrich Heitler en 1934 estudiaron el problema a partir de la teoría de Dirac en la primera aproximación de Born ($zZ/137\beta \ll 1$).

Tanto los resultados obtenidos por Bethe y Heitler como los predichos por la física clásica prevén el mismo orden de magnitud para la sección eficaz de Bremsstrahlung σ_{rad} :

$$\sigma_{\text{rad}} \sim \frac{Z^2}{137} \left(\frac{e^2}{m_0 c^2} \right)^2$$

Sin embargo, la sección eficaz diferencial en energía clásica es muy diferente de la expresión de Bethe-Heitler. Ambos tratamientos predicen demasiadas emisiones de baja energía, pero los resultados clásicos predicen aun más radiación de baja energía que los fotones predichos por la teoría cuántica: según la teoría clásica cada deflexión produce necesariamente un fotón. La similitud en las secciones eficaces integradas indica que a pesar de la diferencia en la distribución en energía, el número total de fotones que se obtiene mediante ambos tratamientos es similar.

En una colisión radiativa la conservación del impulso se produce entre tres partículas: el electrón incidente, el núcleo y el fotón emitido. Por este motivo, un fotón de cualquier energía $h\nu$ (entre 0 y T) puede ser emitido en cualquier dirección, a diferencia de lo que ocurre con los fotones dispersados por efecto Compton, donde sólo intervienen (en primera aproximación) dos partículas.

La expresión obtenida por Bethe y Heitler para la sección eficaz diferencial en energía es la siguiente:

$$d\sigma_{\text{rad}} = \sigma_0 B Z^2 \frac{T + m_0 c^2}{T} \frac{d(h\nu)}{h\nu}, \quad (63)$$

donde

$$\sigma_0 = \frac{1}{137} \left(\frac{e^2}{m_0 c^2} \right)^2 = \frac{1}{137} r_0^2$$

Figura 17. Coeficiente B de la ec. (63) para la sección eficaz diferencial de Bremsstrahlung según evaluaciones numéricas de Bethe y Heitler.

y B es una función adimensional de T, Z y hν, cuyo valor varía entre 0 y 20, como puede verse en la fig. 17. En esta figura se observa que para el caso no relativista ($T \ll m_0 c^2$), B casi no depende de la energía del fotón emitido. Hay que tener en cuenta que para el extremo $h\nu \rightarrow T$ falla la primera aproximación de Born para el electrón después de la colisión, ya que su energía es muy pequeña; por lo tanto la validez de esa porción del gráfico es limitada. Por otra parte, experimentalmente se observa que B depende de hν menos de lo que indica la fig. 17.

Es importante mencionar que la ec. (63) diverge para fotones de energías muy bajas; esta divergencia lleva a una sobreestimación del número de fotones de Bremsstrahlung emitidos en bajas energías.

Pérdida de energía por unidad de camino y sección eficaz total

La pérdida de energía por unidad de camino en colisiones radiativas puede obtenerse a partir de la sección eficaz diferencial en forma análoga a como se hizo en la ec. (38) para colisiones con electrones atómicos:

$$\left(\frac{dT}{ds} \right)_{\text{rad}} = N \int h\nu d\sigma_{\text{rad}}(h\nu)$$

$$\therefore \left(\frac{dT}{ds} \right)_{\text{rad}} = N\sigma_0 Z^2 (T + m_0 c^2) \int_0^1 B d\left(\frac{h\nu}{T} \right), \quad (64)$$

donde N es el número de átomos por unidad de volumen. Definiendo el promedio \bar{B} como la integral de la ec. (64),

$$\left(\frac{dT}{ds} \right)_{\text{rad}} = N\sigma_0 Z^2 (T + m_0 c^2) \bar{B} \quad (65)$$

La sección eficaz total de Bremsstrahlung se define como la fracción de la energía total del electrón ($T+m_0c^2$) que es emitida como radiación por unidad de camino atravesado, dividida por el número de átomos del blanco por unidad de volumen. Queda claro entonces que, según esta definición:

$$\sigma_{\text{rad}} \neq \int d\sigma_{\text{rad}} ;$$

en cambio:

$$\sigma_{\text{rad}} = \frac{1}{T + m_0 c^2} \left(\frac{dT}{ds} \right)_{\text{rad}} \frac{1}{N} = Z^2 \bar{B} \sigma_0 \quad (66)$$

Como puede observarse a partir de la ec. (66), la expresión para σ_{rad} está dada fundamentalmente si se conoce la expresión para \bar{B} . Existen distintos dominios según los cuales varía la forma funcional aproximada para esta última: no relativista, moderadamente relativista, altamente relativista y ultra relativista. Para el caso no relativista:

$$\sigma_{\text{rad}} = \frac{16}{3} Z^2 \sigma_0 ,$$

$$\text{es decir, } \bar{B} = \frac{16}{3} .$$

Es necesario aclarar que la teoría de Bethe-Heitler debe corregirse por fallas en la primera aproximación de Born cuando $h\nu \rightarrow T$ (como ya se dijo antes) y además esta teoría no considera el apantallamiento de los electrones atómicos más internos cuando el electrón incidente pasa a mayor distancia del núcleo que el radio de la órbita de aquéllos. Por otra parte, este tratamiento tampoco contempla el tamaño finito del núcleo en colisiones frontales de alta energía.

Bremsstrahlung observado en blancos delgados

Consideremos el siguiente experimento: un haz de electrones monoenergético y colimado incide perpendicularmente sobre una lámina de material. Esta lámina es muy delgada, de manera que casi no hay deflexión de la trayectoria de los electrones, casi no hay pérdida de energía en ionizaciones y excitaciones y a lo sumo hay una emisión radiativa por electrón.

Los resultados que se observan en el espectro de fotones de Bremsstrahlung emitido confirman, a grandes rasgos, la teoría de Bethe-Heitler:

1. La intensidad $\left(\frac{dI}{dh\nu}\right)_\theta$ emitida en una dirección particular θ con energía entre $h\nu$ y $h\nu+d(h\nu)$ no depende de $h\nu$ y cae abruptamente para $h\nu=T$ (ver fig. 18).

Esta intensidad es proporcional al número de fotones emitidos con energía entre $h\nu$ y $h\nu+d(h\nu)$ y también a la energía $h\nu$ de cada uno de estos fotones, es decir, según la teoría (ec. 63):

$$\left(\frac{dI}{dh\nu}\right) \propto h\nu \left(\frac{d\sigma_{\text{rad}}}{dh\nu}\right) = \sigma_0 B Z^2 \frac{T + m_0 c^2}{T}$$

Como B casi no depende de $h\nu$ y decae a 0 para $h\nu=T$, a la teoría sólo habría que agregarle que además de cumplirse en forma integral para todas las direcciones, es válida para cada ángulo de emisión θ por separado.

2. Para electrones no relativistas la intensidad emitida con energía entre $h\nu$ y $h\nu+d(h\nu)$ decrece como $1/T$.

Figura 18. Intensidad irradiada por intervalo de frecuencia en función de la frecuencia para electrones de 45 keV incidiendo normalmente sobre un blanco delgado de oro, a distintos ángulos de emisión medidos a partir de la dirección de incidencia.

Según la ec. (63):

$$\frac{dI}{dh\nu} \propto h\nu \frac{d\sigma_{\text{rad}}}{dh\nu} \cong \sigma_0 B Z^2 \frac{m_0 c^2}{T},$$

la teoría predice adecuadamente los resultados experimentales, los cuales también en este caso se verifican para cada ángulo por separado.

3. La forma de la distribución espectral no depende del número atómico. Esto también está bien considerado en la teoría si se desprecia la débil dependencia de B con Z , ya que Z^2 aparece como un factor global de la distribución.

4. Para valores muy bajos de T la radiación se emite perpendicularmente al plano de movimiento del electrón. A medida que crece T , la radiación tiende a ser emitida hacia adelante. Por este motivo, en blancos delgados el espectro continuo es anisotrópico, es decir, su intensidad tendrá una marcada dependencia angular. Sin embargo, en un blanco grueso las colisiones elásticas “desordenan” la dirección de las trayectorias y la radiación de frenado es casi isotrópica.

5. La radiación de frenado está parcialmente polarizada: el vector campo eléctrico tiende a apuntar en la dirección del electrón incidente.

Bremsstrahlung en blancos gruesos

La radiación de frenado en blancos gruesos tiene lugar un gran número de situaciones de interés; por ejemplo, en la generación del espectro en un tubo de rayos x, en el frenado de electrones utilizados en terapia con radiaciones, o en un experimento de microscopía electrónica, donde los rayos x producidos dentro de la muestra dan lugar a la técnica cuantitativa de microanálisis con sonda de electrones.

Pérdida de energía por unidad de camino

La generación de Bremsstrahlung es uno de los mecanismos de pérdida de energía de los electrones que atraviesan un material; para diferenciar la pérdida de energía en radiación de frenado por longitud de camino recorrido de la cantidad análoga causada

por ionizaciones y excitaciones, llamaremos $\left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{rad}}$ a la primera y $\left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{ion}}$ a la segunda.

La energía promedio emitida en eventos de Bremsstrahlung cuando un electrón recorre al camino ds es:

$$dT_{\text{rad}} = \left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{rad}} ds = \left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{rad}} \frac{dT}{dT/ds} = \left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{rad}} \frac{dT}{\left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{rad}} + \left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{ion}}} \quad (67)$$

La energía total promedio irradiada por electrón de energía cinética inicial T, hasta que se frena completamente está dada por:

$$I = \int dT_{\text{rad}} = \int_0^T \frac{\left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{rad}}}{\left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{rad}} + \left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{ion}}} dT \quad (68)$$

Para energías moderadas ($T < 100$ keV) se cumple que $\left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{rad}} \ll \left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{ion}}$; con lo cual la

ec. (68) puede escribirse:

$$I = \int dT_{\text{rad}} = \int_0^T \frac{(dT/ds)_{\text{rad}}}{(dT/ds)_{\text{ion}}} dT$$

Utilizando la ec. (65) para electrones no relativistas:

$$\left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{rad}} = N \frac{16}{3} \sigma_0 Z^2 m_0 c^2$$

y reescribiendo la ec. (48) en términos de T:

$$\left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{ion}} = \frac{NZ 2\pi e^4}{T} \ln\left(\frac{\sqrt{2}T}{I}\right),$$

puede obtenerse una expresión para la energía promedio total irradiada por electrón:

$$I = \int_{E_c}^T \frac{8 T \sigma_0 Z m_0 c^2}{3 \pi e^4 \ln(\sqrt{2T/I})} dT = KZ f(T, Z), \quad (69)$$

donde la función f depende suavemente de Z a través del potencial medio de ionización. Vemos entonces, que I no depende de N , es decir, es independiente de la densidad y que en primera aproximación es proporcional al número atómico.

Distribución en energías o espectral

Como vimos en la fig. 18, la energía de los fotones irradiados por Bremsstrahlung en un blanco delgado tiene una distribución uniforme entre 0 y la energía cinética inicial T_1 (ver fig. 19 a). Podemos pensar que un blanco grueso se compone de muchos blancos delgados de espesor Δs , de manera que la máxima energía cinética de los electrones que ingresan al segundo blanco (ver fig. 19 b) es $T_2 = T_1 - \Delta T$, donde ΔT es la energía perdida por los electrones en el primer blanco delgado (y en cada uno de los subsiguientes, como se muestra en la fig. 19 c).

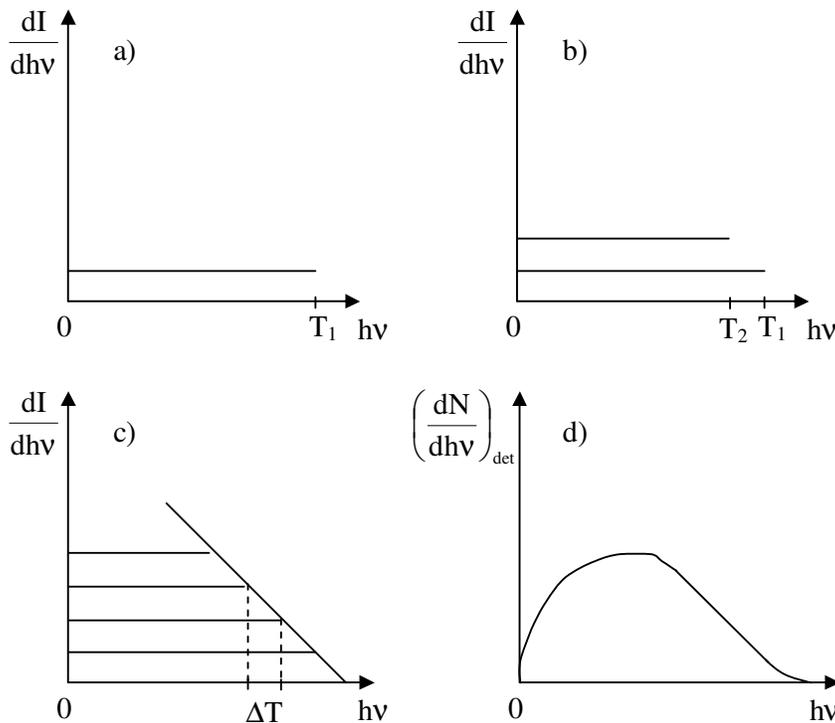


Figura 19. Ilustración cualitativa de cómo se forma el espectro de Bremsstrahlung en un blanco grueso. a), b) y c): distribución energética de la energía generada por radiación de frenado dentro del material; d) distribución energética de los fotones detectados.

El espectro esbozado como una línea recta en la fig. 19 c) es sólo una construcción cualitativa; falta tomar en consideración, por ejemplo, que sólo los electrones que inciden en el primer blanco son monoenergéticos. Luego su distribución se hace cada vez más ancha. Kirkpatrick (1946) obtuvo, a partir de la ec. (67) y la expresión no

relativista de $\left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{rad}}$ basada en la teoría de Sommerfeld, la siguiente fórmula para la distribución espectral:

$$\frac{dI}{dh\nu} = \text{cte } Z(\nu_{\text{máx}} - \nu) , \quad (70)$$

donde $h\nu_{\text{máx}}$ corresponde a la energía cinética de los electrones incidentes. La ec. (70), coincidente con el gráfico cualitativo de la fig. 19 c), vale para energías menores que $h\nu_{\text{máx}}$; para energías mayores la distribución es obviamente nula. Ya en 1923, H. Kramers había obtenido una expresión análoga a la ec. (70) basándose en una aproximación clásica para σ_{rad} y utilizando la expresión para la pérdida de energía por unidad de camino de Thomson y Widdington ($T_0^2 - T^2 = \text{cte } \rho \Delta s$).

La distribución de los fotones $\frac{dN}{dh\nu}$ se relaciona con la distribución de la energía irradiada mediante:

$$\frac{dN}{dh\nu} = \frac{1}{h\nu} \frac{dI}{dh\nu}$$

El espectro experimental en número de fotones se ilustra cualitativamente en la fig. 19 d), donde se debe considerar que se trata del espectro detectado; es decir, hay efectos de absorción en el material y de eficiencia de la detección, que hacen que la intensidad decaiga a cero para bajas energías.

Integrando la ec. (70) se tiene el total de energía irradiada por el electrón:

$$I = \text{cte } Z \int_0^{\nu_{\text{máx}}} (\nu_{\text{máx}} - \nu) d\nu = \text{cte } Z \left(\nu_{\text{máx}}^2 - \frac{\nu_{\text{máx}}^2}{2} \right) ;$$

es decir,

$$I = KZT^2 , \quad (71)$$

que está de acuerdo con la ec. (69).

La distribución espectral suele darse en función de la longitud de onda λ en lugar de la energía $h\nu$:

$$\frac{dI}{d\lambda} = \frac{dI}{dh\nu} \frac{dh\nu}{d\lambda} = \text{cte } Z(\nu_{\text{máx}} - \nu) \left(-\frac{hc}{\lambda^2} \right) ;$$

entonces, sustituyendo $\nu=c/\lambda$:

$$\frac{dI}{d\lambda} = aZ \frac{1}{\lambda^2} \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_{\text{mín}}} \right) \text{ para } \lambda \geq \lambda_{\text{mín}} = \frac{c}{\nu_{\text{máx}}} = \frac{12,398}{T[\text{keV}]} \text{ \AA} \quad (72)$$

Figura 20. Espectro continuo de un tubo de rayos x. Influencia de a) el voltaje de excitación y b) el número atómico del blanco.

La fig. 20 a) muestra el espectro continuo de rayos x (Bremsstrahlung) proveniente de un tubo de rayos x, a distintos voltajes de excitación, es decir, para distintos valores de la energía cinética T de los electrones incidentes. Puede verse claramente como aumenta el área bajo el espectro a medida que aumenta T , lo cual está de acuerdo con la expresión para la integral I (ec. 71). También se observa cómo se va desplazando el máximo λ_0 de la distribución hacia valores mayores de λ (ec. 72). Queda como ejercicio demostrar que $\lambda_0 = \frac{3}{2} \lambda_{\min} = \frac{3}{2} \frac{12,398}{T[\text{keV}]}$, lo que concuerda con el comportamiento de los espectros experimentales. En la fig. 20 b) se ilustra cómo el espectro modifica su intensidad proporcionalmente al número atómico del blanco como se desprende de la ec. (72). Lo mismo ocurre cuando se aumenta la intensidad de corriente (número de electrones incidentes por unidad de tiempo), que también actúa como un factor de escala global.

Comparación de los distintos tipos de interacción entre electrones y átomos

Para efectuar una comparación entre los distintos tipos de colisión estudiados consideraremos electrones no relativistas, es decir, con $T < 0,1$ MeV, lo que corresponde a $\beta < 0,5$. Vamos a usar que

$$4\pi \left(\frac{e^2}{m_0 c^2} \right)^2 = 4\pi r_0^2 = 1,00 \times 10^{-24} \text{ cm}^2 = 1 \text{ barn}$$

Ionización-excitación

Vamos a definir σ_{ion} como la fracción de energía cinética T perdida en ionizaciones o excitaciones por unidad de camino atravesado dividida por el número de átomos por unidad de volumen del blanco:

$$\sigma_{\text{ion}} = \frac{1}{NT} \left(\frac{dT}{ds} \right)_{\text{ion}}$$

Esta expresión incluye los efectos combinados de todas las capas atómicas, a diferencia de la ec. (44), que sólo se refiere a la capa atómica c . Reemplazando la expresión dada en la ec. (48):

$$\sigma_{\text{ion}} = \frac{2\pi e^4 Z}{T^2} \ln(\sqrt{2T/I}) = \frac{8\pi e^4 Z}{m_0^2 \beta^4 c^4} \ln(\sqrt{2T/I}) \text{ cm}^2 / \text{átomo} ,$$

o bien:

$$\sigma_{\text{ion}} = \frac{2Z}{\beta^4} \ln(\sqrt{2T/I}) \quad \text{barn/átomo}$$

Dispersión elástica por núcleos

Consideraremos las dispersiones a ángulos mayores que $\pi/2$ o retrodispersiones. A partir de la ec. (51), evaluando el diámetro de la colisión b y haciendo $\theta=\pi/2$ se obtiene:

$$\sigma_{\text{nuc}} (\geq \pi/2) = \frac{\pi e^4 Z^2}{m_0^2 \beta^4 c^4} \cot^2(\pi/4) \quad \text{cm}^2 / \text{átomo} ,$$

es decir:

$$\sigma_{\text{nuc}} (\geq \pi/2) = \frac{Z^2}{4\beta^4} \quad \text{barn/átomo}$$

Dispersión por electrones

Puesto que después de la colisión el proyectil y el blanco son indistinguibles, vamos a contabilizar todos los electrones dispersados, que son el doble de las partículas incidentes. Recordando que $\theta_2 = \pi/2 - \theta_1$, la ec. (59) adaptada para incluir los dos electrones dispersados se escribe:

$$\sigma(>\theta) = 4\pi \left(\frac{e^2}{m_0 v_1^2} \right)^2 (\cot^2 \theta + \tan^2 \theta) \quad \text{cm}^2 / \text{electrón} ,$$

o bien,

$$\sigma(>\theta) = 4\pi Z \left(\frac{e^2}{m_0 v_1^2} \right)^2 (\cot^2 \theta + \tan^2 \theta) \quad \text{cm}^2 / \text{átomo}$$

En este caso, como el mayor ángulo de dispersión es $\pi/2$ y no hay retrodispersiones, vamos a considerar las dispersiones a ángulos mayores que $\pi/4$ como una medida del efecto. Evaluando la expresión anterior en $\theta=\pi/4$ se obtiene:

$$\sigma_{\text{el}} (> \pi/4) = \frac{2Z}{\beta^4} \quad \text{barn/átomo}$$

Bremsstrahlung

Para poder comparar en igualdad de condiciones con σ_{ion} , redefinimos la sección eficaz de ionización de Bremsstrahlung como la fracción de energía *cinética* perdida en radiación por unidad de camino atravesado dividida por el número de átomos del blanco por unidad de volumen:

$$\sigma'_{\text{rad}} = \frac{1}{NT} \left(\frac{dT}{ds} \right)_{\text{rad}} = \frac{T + m_0 c^2}{T} \sigma_{\text{rad}} \cong \frac{m_0 c^2}{T} \sigma_{\text{rad}}$$

$$\therefore \sigma'_{\text{rad}} \cong \frac{32}{3} \frac{1}{137} \left(\frac{e^2}{m_0 c^2} \right)^2 \frac{Z^2}{\beta^2} \text{ cm}^2 / \text{átomo} ,$$

o bien:

$$\therefore \sigma'_{\text{rad}} \cong \frac{8}{3\pi} \frac{1}{137} \frac{Z^2}{\beta^2} \text{ barn} / \text{átomo}$$

En la siguiente tabla, a través de las secciones eficaces respectivas en barn/átomo, se da una idea de la probabilidad de que cada tipo de interacción ocurra en aire y en plomo para electrones de 100 keV.

	σ_{ion}	$\sigma_{\text{nuc}}(>\pi/2)$	$\sigma_{\text{el}}(>\pi/4)$	σ'_{rad}
Dependencia	Z/β^4	Z^2/β^4	Z/β^4	Z^2/β^2
Aire (Z=7,31)	1700	150	230	1,3
Pb (Z=82)	13700	20000	2600	170

Lo primero que puede observarse es que todos los efectos son más intensos en plomo, debido a su alto número atómico, es decir, el núcleo de este elemento posee una carga eléctrica muy grande y un gran número de electrones. Por otro lado, se ve que la probabilidad de pérdida de energía en ionizaciones es mucho más grande que mediante Bremsstrahlung. Además queda claro que para números atómicos altos las desviaciones se deben casi exclusivamente a dispersiones con núcleos, mientras que para números atómicos bajos, las contribuciones de los electrones y de los núcleos al desvío de la trayectoria del electrón incidente son comparables.

Frenado de electrones en blancos gruesos

Cuando una partícula cargada atraviesa un medio material va sufriendo todos los tipos de colisiones estudiados, por las cuales va cambiando de dirección y perdiendo energía hasta detenerse, formando parte de la estructura del material. Si la energía del proyectil es 1 MeV, sufrirá alrededor de 10000 colisiones hasta detenerse.

Camino libre medio

El camino libre medio ℓ representa la distancia que recorre un electrón dentro del material entre dos eventos. El camino libre medio ℓ_i para una interacción tipo i es inversamente proporcional al número de centros dispersores por unidad de volumen e inversamente proporcional a la sección eficaz σ_i correspondiente:

$$\ell_i = \frac{1}{\sigma_i n_{Ci} / V} \quad (73)$$

Por ejemplo, si se trata de alguna interacción con núcleos atómicos, el número de centros dispersores por unidad de volumen coincide con el número de átomos N por unidad de volumen:

$$n_{Ci}/V = N/V = N_{\text{mol}} N_A/V = m/A N_A/V = N_A \rho/A$$

donde N_{mol} se refiere al número de moles, el número de Avogadro N_A es el número de átomos o moléculas presentes en un mol de sustancia, A es el peso atómico, que expresado en gramos coincide con la masa de un mol y ρ es la densidad del material. Entonces, reemplazando en la ec. (73) de camino libre medio se obtiene:

$$\ell_i = \frac{A}{\sigma_i N_A \rho}$$

El camino libre medio total ℓ que tiene en cuenta todos los posibles tipos de eventos puede encontrarse considerando cada uno de ellos por separado:

$$\frac{1}{\ell} = \frac{\sigma N_A \rho}{A} = \frac{N_A \rho}{A} \sum_i \sigma_i = \sum_i \frac{N_A \rho \sigma_i}{A} = \sum_i \frac{1}{\ell_i}$$

Pérdida de energía por unidad de camino

Como ya se ha dicho, para $T < 100$ keV se cumple que $\left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{rad}} \ll \left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{ion}}$, con lo cual

se puede hacer la aproximación $\frac{dT}{ds} \cong \left(\frac{dT}{ds}\right)_{\text{ion}}$ en estos casos. Entonces, expresando la

ec. (49) como pérdida de energía por camino másico ρs , se puede escribir:

$$\frac{dT}{d\rho s} = 7,85 \cdot 10^4 \frac{Z}{AT} \ln\left(\frac{1,166T}{I}\right) \text{ keV} \times \text{cm}^2 / \text{g}$$

Puesto que $Z/A \sim 0,5$ (salvo para el hidrógeno) y teniendo en cuenta que la dependencia con Z a través del potencial medio de ionización I es débil, se puede afirmar que la pérdida de energía por unidad de camino másico prácticamente no depende del número atómico.

Volumen de interacción

Los procesos de dispersión elástica e inelástica a que están sometidos los electrones incidentes en una muestra gruesa, producen efectos combinados. La dispersión elástica provoca una desviación importante de los electrones de su trayectoria original, produciendo después de múltiples interacciones, una difusión en el sólido.

La dispersión inelástica, en cambio, reduce progresivamente su energía hasta que son capturados en el sólido, limitando por lo tanto, el camino recorrido por el electrón dentro del material.

Los efectos combinados de ambas dispersiones, conducen a limitar la penetración del haz incidente en el sólido. Como resultado de esto, hay una región concreta donde los electrones interactúan depositando su energía y produciendo múltiples señales secundarias que pueden ser medidas. Esta región es conocida como "volumen de interacción".

Un conocimiento de la forma y tamaño de este volumen, como función de los parámetros que caracterizan a la muestra y al haz incidente, es vital para entender e interpretar fenómenos que ocurren en el microanálisis cuantitativo convencional y en las técnicas de imágenes composicionales.

Si bien la sección del haz de electrones que impacta en la muestra puede ser mucho menor que $1 \mu\text{m}$, el volumen de interacción puede ser de varios μm^3 como ocurre en los materiales de baja densidad y bajo número atómico. En este tipo de materiales, el volumen tiene forma de pera, mientras que en materiales de Z mayores tiene forma de esfera truncada por un plano, como puede verse en la figura 3. También se ve que a mayores valores de la energía del haz incidente E_0 , el volumen de interacción aumenta.

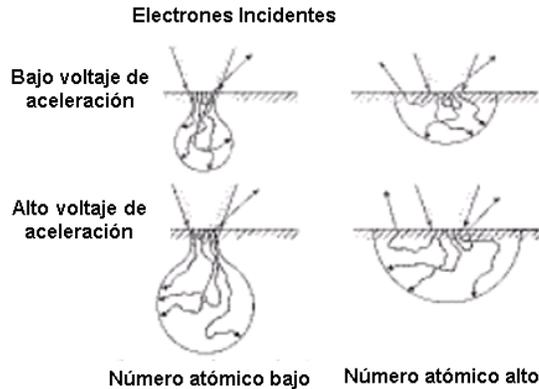


Figura 3. Volumen de interacción en una muestra de número atómico bajo y en otra de número atómico alto a distintas energías del haz incidente de electrones.

Simulación de la trayectoria de electrones por el método de Monte Carlo

La técnica de simulación de Monte Carlo es un método alternativo para obtener información detallada sobre los distintos procesos de interacción que tienen lugar cuando partículas cargadas o fotones atraviesan un medio material. El método de Monte Carlo es un sustituto de un experimento real, donde, a través de un algoritmo computacional, se simula paso a paso la trayectoria de las partículas cuyos efectos se desea estudiar. Dadas las coordenadas, dirección de viaje y energía de un electrón incidente, se "sortea" un camino libre, es decir, la distancia que recorrerá antes de interactuar, luego se "sortea" el tipo de interacción que tendrá, la energía que perderá en ella si se tratara de una colisión inelástica y el ángulo de dispersión; con esos parámetros determinados se continúa el proceso hasta que el electrón tiene una energía menor que cierto umbral prefijado. Los "sorteos" se hacen teniendo en cuenta la probabilidad de cada proceso, que se refleja en las respectivas secciones eficaces; es como si cada vez se tirara un dado cargado de acuerdo con la mayor o menor probabilidad correspondiente; por ejemplo, si se desea obtener el ángulo de una dispersión elástica por un núcleo, se "cargaría el dado" favoreciendo los ángulos menores, que son los más probables. En general, todos los parámetros relacionados a las dispersiones elásticas e inelásticas deben ser calculados mediante modelos físicos para obtener ángulos de dispersión, distancia entre choques y pérdidas de energía por unidad de camino acordes a lo que sucedería en un experimento real.

Lo que se ha intentado explicar en el párrafo anterior es lo que se conoce como simulación detallada, en la que cada efecto es considerado por separado; este tipo de simulación es el que da resultados más realistas, pero el tiempo de cálculo puede hacer que en muchos casos sea completamente inviable. Una solución a este problema es agrupar varias interacciones en una sola, para la cual la pérdida de energía y el ángulo de desvío se calculan en base a un promedio de esos parámetros en todas las

interacciones individuales que han sido agrupadas; esto se conoce como simulación condensada y es lo que se usa habitualmente.

Los principios básicos de la simulación de trayectorias con el método de Monte Carlo son los siguientes:

- Conociendo el camino recorrido por el electrón en un paso y la pérdida de energía por unidad de camino (debida a las dispersiones inelásticas), se puede calcular el decrecimiento de la energía en ese paso.
- Después de que el electrón viaja una distancia del orden del camino libre medio llega a una posición donde se produce un choque. Allí se elige (para el nuevo valor de energía) un nuevo ángulo de dispersión.
- Para elegir el valor de estas variables en cada paso, es necesario usar un generador de números al azar con factores de peso que respeten la distribución de probabilidad de cada una de ellas.
- Se repite el procedimiento anterior hasta que: a) la energía del electrón decrece a un valor prefijado, por debajo del cual, los procesos de interés (como ionización de una capa) no son activados, b) el electrón escapa de la muestra.
- Se puede calcular la distribución espacial de generación de señales secundarias (rayos x característicos, del continuo, electrones secundarios, etc.) usando las secciones eficaces adecuadas.

Un ejemplo de trayectorias individuales calculadas por Monte Carlo puede observarse en la figura 4. Las trayectorias individuales difieren mucho, una de otra, debido a la naturaleza aleatoria de los eventos de dispersión. A pesar de que una trayectoria simple sea simulada con buena aproximación, no es representativa del volumen de interacción. Se necesitan algunas centenas de trayectorias para poder visualizarlo, y más de 10.000 para tener resultados significativos desde el punto de vista estadístico.

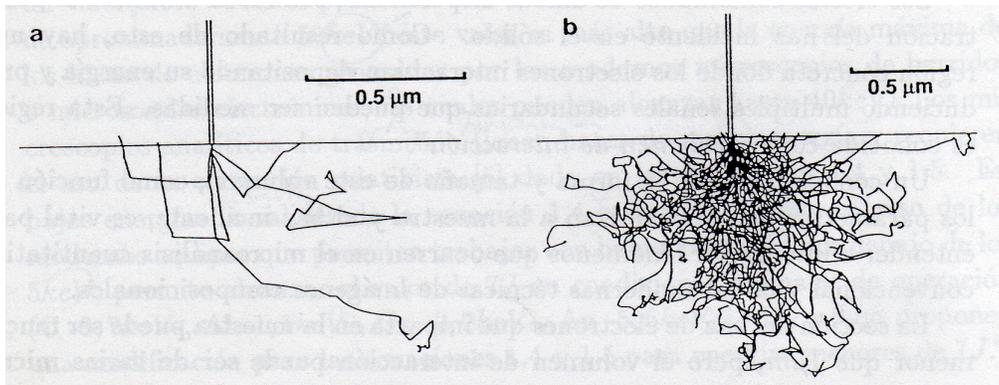


Figura 4. Simulación Monte Carlo de trayectorias de electrones de 20 keV que inciden perpendicularmente en una muestra de Fe. (a) dibujo de 5 trayectorias proyectadas sobre un plano; (b) dibujo de 100 trayectorias proyectadas, que dan una impresión visual del volumen de interacción.

En las siguientes secciones la simulación de Monte Carlo será usada para mostrar la dependencia del volumen de interacción con la energía, el número atómico y la geometría.

Influencia de E_0 , Z y el ángulo de incidencia sobre el volumen de interacción

Influencia de la energía de incidencia E_0

El tamaño del volumen de interacción es una función que depende fuertemente de la energía del haz de electrones que interactúa con la muestra. El volumen crece cuando crece la energía. Esto puede explicarse con las ecuaciones (1) y (2). Por un lado, la sección eficaz de dispersión elástica es inversamente proporcional al cuadrado de la energía ($\sigma_{\text{elás}} \propto 1/E^2$). Cuando la energía crece, decrece la probabilidad de una interacción elástica y el camino del electrón cerca de la superficie es más recto en la dirección de incidencia, es decir: el electrón penetra más profundamente antes de tener la primera interacción y de que los efectos acumulativos de múltiples dispersiones lo propaguen lateralmente. Por otro lado, la pérdida de energía por unidad de camino es inversamente proporcional a la energía ($dE/ds \propto 1/E$), es decir que cuando la energía crece el electrón puede penetrar más profundamente ya que pierde menos energía por unidad de camino. La dimensión lateral del volumen de interacción tiene la misma escala que en profundidad y su forma no cambia de manera significativa con la energía. Esto puede observarse en la figura 5.

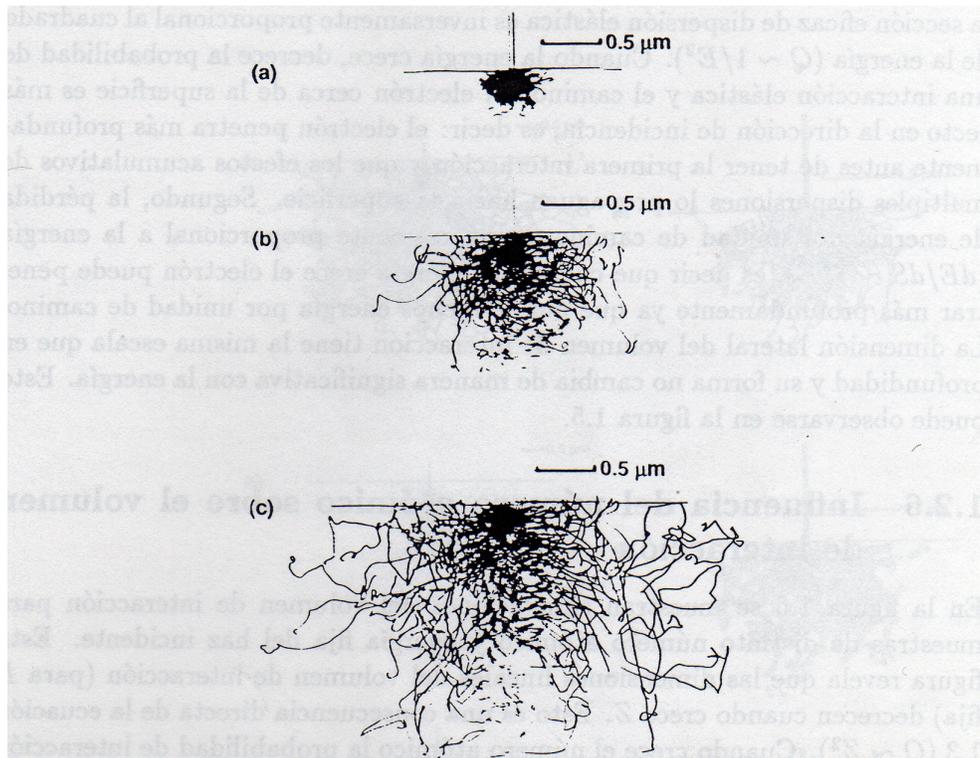


Figura 5. Simulación Monte Carlo del volumen de interacción producido por electrones con energías de 10, 20 y 30 keV en una muestra de Fe.

Influencia del número atómico Z

En la figura 6 se muestran simulaciones del volumen de interacción para dos muestras de distinto número atómico y energía fija del haz incidente. Esta figura revela que las dimensiones lineales del volumen de interacción (para E_0 fija) decrecen cuando crece Z . Esto es una consecuencia directa de la ecuación (1), donde se ve que $\sigma_{\text{elás}} \propto Z^2$. Cuando

crece el número atómico la probabilidad de interacción elástica crece y por lo tanto crece el número de deflexiones por unidad de camino. La trayectoria del electrón tiende a desviarse más rápido de la dirección inicial y por lo tanto penetra menos. Esto significa que en muestras de Z grandes el electrón se desvía más por unidad de camino que en muestras de Z menores; este comportamiento produce, a medida que disminuye Z , un aumento del volumen de interacción y su estiramiento hacia abajo dándole un característico aspecto de pera, mientras que para Z mayores adquiere la forma de esfera truncada por un plano.

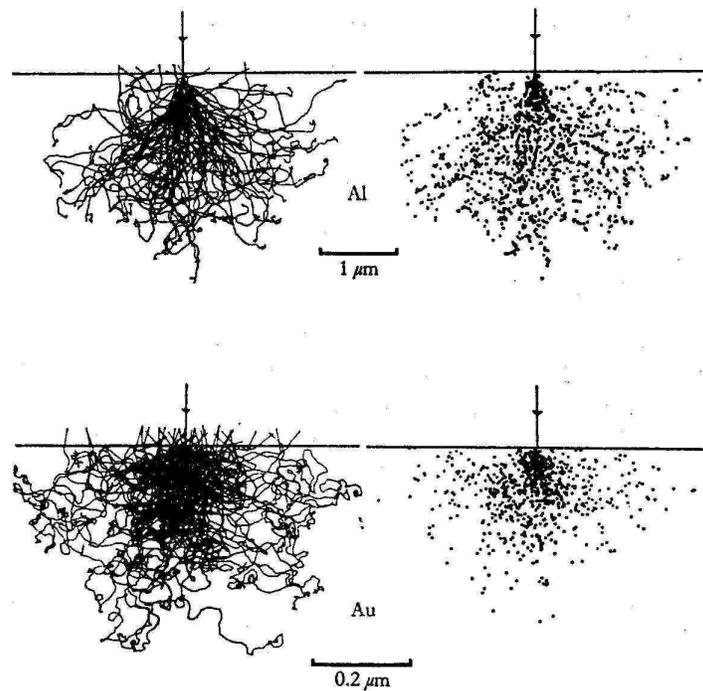


Figura 6. Simulación Monte Carlo del volumen de interacción producido por electrones en una muestra de Al y en otra de Au.

Influencia del ángulo de incidencia del haz de electrones

Cuando el haz comienza a apartarse de la dirección normal a la muestra el volumen de interacción muestra asimetrías que no están presentes en el caso de incidencia normal (fig. 7). Esto se debe a que cuando el haz incidente no es normal a la superficie de la muestra, al menos algunos electrones pueden propagarse cerca de la superficie y escapar de ella, a pesar de tener pequeños ángulos de dispersión.

Rango de los electrones

La trayectoria de los electrones incidiendo con una energía dada E_0 sobre un material de características y composición específicas, en un determinado ángulo, no está unívocamente determinada. Es decir, suponiendo que se puede hacer incidir un electrón con energía E_0 en un punto de una muestra y luego otro electrón con la misma energía y

exactamente en el mismo punto y con el mismo ángulo de incidencia, la trayectoria de ambas puede ser completamente diferente (de hecho, la probabilidad de que no lo sea es prácticamente nula). Esto se debe a que las trayectorias de los electrones dependen de procesos de interacción que están gobernados por la mecánica cuántica, que es de naturaleza probabilística. La mecánica clásica que describe el movimiento de cuerpos en la escala macroscópica (a la que estamos más acostumbrados), en cambio, es de naturaleza determinista. O sea que si los electrones que atraviesan un material fueran bolitas que ingresan en un fluido se podría predecir exactamente su trayectoria, pero ni los electrones son bolitas ni la materia es un fluido.

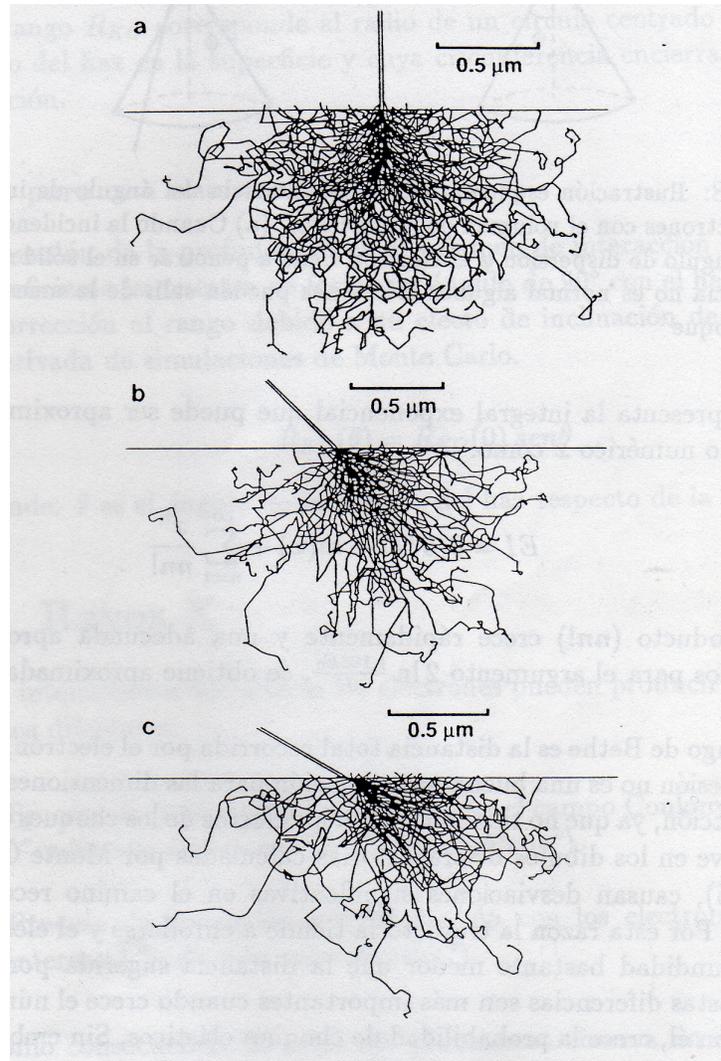


Figura 7. Simulación con Monte Carlo del volumen de interacción en función del ángulo de incidencia en una muestra de Fe para $E_0 = 20$ keV, (a) 0° , (b) 45° y (c) 60° .

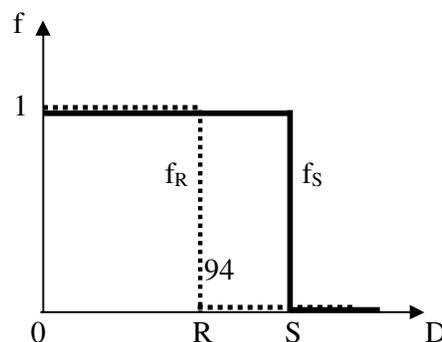


Figura 8. Fracción de electrones que llega a una cierta profundidad y que recorre un cierto camino en una aproximación determinista.

Si llamamos S a la longitud de camino recorrido por un electrón (en forma curvilínea o de línea poligonal) y R a la profundidad atravesada por ese electrón dentro del material, claramente será $S > R$. En una situación altamente idealizada (bolitas en un fluido) todos los electrones harían lo mismo. En la figura 8 se grafica la fracción de electrones f_R que, con esta hipótesis, alcanzaría una profundidad R y por otra parte, la fracción de electrones f_S que recorrería un camino S en función de la distancia D medida a partir de la superficie del material.

Observando la línea punteada, el gráfico simplemente dice que si se saca una foto del material durante el experimento, todos los electrones se van a encontrar a profundidades menores o iguales que R y ninguno se va a encontrar más allá. La línea continua nos dice que si medimos con un hilo a lo largo de cada trayectoria curvilínea, la posición de todos los electrones en esa foto va a corresponder a longitudes menores o iguales que S y ninguna a longitudes mayores.

La figura 9 muestra la situación real, es decir, teniendo en cuenta el aspecto probabilístico del problema por el cual las trayectorias de los electrones no son repetitivas, sino que están “desordenadas”, lo que se conoce como *straggling* (vagabundeo) de los electrones.

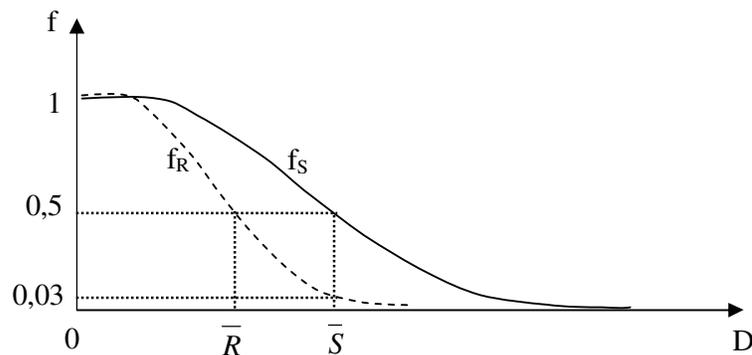


Figura 9. Fracción de electrones que llega a una cierta profundidad y que recorre un cierto camino en función de la distancia.

Se denomina rango medio, o simplemente rango, a la profundidad a la que llegan la mitad de los electrones antes de detenerse. En la figura 9 se ha indicado con el símbolo \bar{R} . Análogamente, se denomina camino medio recorrido \bar{S} al camino recorrido por la mitad de los electrones a lo largo de sus respectivas trayectorias justo antes de detenerse. En la figura puede verse que si bien la mitad de los electrones llegan a recorrer un camino de longitud \bar{S} , sólo una pequeña fracción (el 3%) llega a esa profundidad de la superficie.

En muchas aplicaciones en microscopía electrónica y microanálisis es útil tener una estimación numérica del volumen de interacción. Para obtener esta estimación se puede utilizar el concepto de rango de los electrones. La naturaleza compleja del volumen de interacción ha llevado a que existan en la literatura numerosas definiciones del rango de los electrones: rango de Bethe, rango máximo, rango experimental, rango de Kanaya-Okayama, etc. A continuación describiremos dos de estas definiciones: la de rango de Bethe y la de rango de Kanaya-Okayama.

Rango de Bethe

Si se conoce una expresión adecuada para la pérdida de energía por unidad de camino, dE/ds , la definición rigurosa para el camino recorrido (en promedio) por los electrones es:

$$\bar{S} = \left\langle \int ds \right\rangle = \int_{E_0}^0 \frac{1}{dE/ds} dE$$

Si en esta ecuación reemplazamos la expresión de Bethe para dE/ds dada en la ecuación (2), se obtiene el denominador *rango de Bethe*. Esta integral contiene la expresión $E/\ln(1,166E/J)$ por lo que no se puede resolver en forma analítica. Es necesario entonces, recurrir a una integración numérica.

El rango de Bethe es la distancia total recorrida por el electrón, sin embargo esta expresión no es una buena aproximación para las dimensiones del volumen de interacción, ya que la trayectoria puede ser sumamente tortuosa y el electrón alcanzar una profundidad bastante menor que la distancia obtenida mediante el rango de Bethe. Estas diferencias son más importantes cuando crece el número atómico ya que con él, crece la probabilidad de choques elásticos; sin embargo el rango de Bethe tiene importantes aplicaciones en el cálculo de generación de rayos x.

Rango de Kanaya-Okayama

Kanaya y Okayama (1972) consideraron los efectos combinados de las dispersiones elástica e inelástica para deducir la siguiente expresión, que se aproxima más a la profundidad del volumen de interacción:

$$R_{KO} (\mu m) = \frac{0,0276AE_0^{1,67}}{Z^{0,89} \rho}$$

donde la energía E_0 se expresa en keV, A en g/mol y ρ en g/cm³.

El rango R_{KO} corresponde al radio de un círculo centrado en el punto de impacto del haz en la superficie y cuya circunferencia encierra al volumen de interacción.

Rango para una muestra inclinada

La profundidad del volumen de interacción decrece cuando el haz de electrones no forma un ángulo de 90° con la superficie de la muestra. Una corrección al rango debido

a un efecto de inclinación de la muestra, ha sido deducida a partir simulaciones de Monte Carlo.

$$R_{KO}(\theta) = R_{KO}(0) \text{sen} \theta$$

Donde: θ es el ángulo de incidencia del haz respecto de la superficie.