

Interacción de las radiaciones ionizantes con la materia

José M. Fernández-Varea

Facultat de Física (FQA i ICC), Universitat de Barcelona.

Diagonal 645, ES-08028 Barcelona, Catalunya.

jose@fqa.ub.edu

ÍNDICE

Resumen

1. Introducción

- 1.1. Estructura atómica
- 1.2. Concepto de sección eficaz

2. Interacción de los fotones con la materia

- 2.1. Efecto fotoeléctrico
- 2.2. Dispersión Rayleigh
- 2.3. Dispersión Compton
- 2.4. Creación de pares electrón-positrón
- 2.5. Reacciones fotonucleares
- 2.6. Coeficientes de atenuación

3. Interacción de las partículas cargadas con la materia

- 3.1. Colisiones elásticas
- 3.2. Colisiones inelásticas
- 3.3. Emisión de radiación de frenado
- 3.4. Aniquilación del positrón
- 3.5. Dispersión elástica múltiple
- 3.6. Dispersión inelástica múltiple

4. Radiación fluorescente

- 4.1. Rayos x característicos
- 4.2. Electrones Auger

5. Interacción de los neutrones con la materia

- 5.1. Dispersión elástica
- 5.2. Dispersión inelástica. Reacciones nucleares

Agradecimientos

Apéndice A. Unidades atómicas

Referencias

Resumen

El objetivo de este tema es describir las interacciones que las radiaciones ionizantes experimentan al atravesar medios materiales. En la introducción se repasa brevemente la estructura atómica y el concepto de sección eficaz. Los mecanismos de interacción de fotones, partículas cargadas y neutrones con la materia se tratan en las siguientes secciones. En el caso de las partículas cargadas, se consideran tanto una descripción microscópica de los procesos de colisión como otra basada en teorías de dispersión múltiple.

En el texto se comentan modelos sencillos que describen razonablemente las principales características de los diversos mecanismos de interacción, pero también se mencionan formalismos más elaborados y realistas. Otra de las finalidades del texto es compilar tabulaciones actualizadas de secciones eficaces y otras cantidades relacionadas con ellas. Se remite al lector a bibliografía especializada donde profundizar en el conocimiento de estos temas de la física de radiaciones. Algunos libros dedicados a la interacción de las radiaciones ionizantes con la materia son los de Podgorsak [1], Turner [2] y Leroy y Rancoita [3].

1 Introducción

Se denominan radiaciones ionizantes aquellas que son capaces de liberar electrones ligados en orbitales atómicos o moleculares, para lo que se requieren energías superiores a unos 10 eV. En el caso de electrones, positrones y fotones nos limitaremos a tratar energías entre decenas de eV y centenares de MeV, mientras que para partículas cargadas pesadas consideraremos energías específicas comprendidas entre decenas de keV/u y centenares de MeV/u. Estos intervalos cubren holgadamente las energías empleadas en física médica, tanto en diagnóstico como en terapia, así como las de interés en radioprotección.

Estudiaremos la propagación e interacción de dichas radiaciones ionizantes con medios materiales constituidos por un número de átomos o moléculas por unidad de volumen igual a

$$\mathcal{N} = N_A \rho / A_w, \quad (1)$$

siendo ρ la densidad másica, $A_w = A m_u N_A$ la masa atómica o molecular y A el número másico; N_A es la constante de Avogadro y $m_u N_A \equiv 1$ g/mol.

Las ecuaciones de este tema están escritas en el sistema CGS, como es habitual en física atómica. Sin embargo, para realizar los cálculos es conveniente emplear el sistema de unidades atómicas, descrito en el apéndice A. Los valores numéricos de las constantes físicas fundamentales pueden encontrarse en la referencia [4].

1.1 Clasificación de las radiaciones ionizantes

Las radiaciones ionizantes se clasifican atendiendo en primer lugar a la carga eléctrica de las partículas (si son neutras o cargadas). La segunda característica relevante es la masa de las mismas (comparada con la masa del electrón).

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

A la radiación formada por partículas cargadas se la califica como *directamente ionizante*, mientras que se la denomina *indirectamente ionizante* si se trata de partículas neutras. Como veremos, la razón de esta nomenclatura reside en que la carga eléctrica determina el modo en que la radiación interactúa con la materia.

1.2 Estructura atómica básica

Como es bien sabido, el mundo atómico y subatómico se rige por las leyes de la mecánica cuántica. Consideremos una partícula no relativista de masa M que se mueve en un potencial central $V(r)$. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo,

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

permite que la función de onda de la partícula factorice en la forma

$$\psi_{\varepsilon \ell m_\ell}(\vec{r}) = \frac{P_{\varepsilon \ell}(r)}{r} Y_{\ell m_\ell}(\hat{r}), \quad (3)$$

donde $Y_{\ell m_\ell}(\hat{r})$ son los armónicos esféricos. Las funciones radiales reducidas $P_{\varepsilon \ell}(r)$ poseen expresiones analíticas si el potencial es de Coulomb [5], pero en general han de obtenerse resolviendo numéricamente la ecuación de Schrödinger radial [5, 6]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r) \right] P_{\varepsilon \ell}(r) = \varepsilon P_{\varepsilon \ell}(r). \quad (4)$$

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

$$\int_0^\infty P_{n\ell}^2(r) dr = 1. \quad (5)$$

Por otra parte, la ecuación de Schrödinger radial también posee soluciones con autovalores positivos, que describen partículas libres con energía cinética no relativista $\varepsilon = \frac{p^2}{2M} = \frac{1}{2}Mv^2$ (espectro continuo); v es la velocidad de la partícula y $p = Mv$ su momento lineal. La normalización de las funciones del continuo $P_{\varepsilon \ell}(r)$ es arbitraria. Además las $P_{\varepsilon \ell}(r)$ presentan un comportamiento asintótico de tipo

$$P_{\varepsilon \ell}(r) \sim \sin \left(kr - \ell \frac{\pi}{2} - \eta \ln(2kr) + \delta_\ell(k) \right) \quad \text{cuando } r \rightarrow \infty, \quad (6)$$

donde $k = p/\hbar = \sqrt{2M\varepsilon}/\hbar$ es el número de ondas y δ_ℓ el desfase. $\eta \equiv Z_\infty e^2/\hbar v$ es el parámetro de Sommerfeld, siendo $V(r) \rightarrow -Z_\infty e^2/r$ el comportamiento asintótico del potencial ($Z_\infty = 0$ para potenciales de corto alcance, $Z_\infty \neq 0$ para iones). Cuando $V(r) = 0$, además de $\eta = 0$ es $\delta_\ell = 0 \forall \ell$ y entonces las funciones de onda del continuo se reducen a las ondas planas

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

En mecánica cuántica relativista, la ecuación de Schrödinger debe sustituirse por la ecuación de Klein–Gordon si la partícula tiene espín 0 o la ecuación de Dirac si su espín es $\frac{1}{2}$. La ecuación de Dirac independiente del tiempo es

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

donde $\vec{\alpha}$ y β son las matrices de Dirac [5, 7]. Los autovalores y funciones de onda radiales reducidas se “etiquetan” con el número cuántico de momento angular relativista $\kappa = (\ell - j)(2j + 1)$, con $j = \ell \pm \frac{1}{2}$. En la referencia [8] se describe el aspecto que tienen las funciones de onda radiales reducidas, tanto ligadas como libres, que satisfacen la ecuación de Dirac radial (que reemplaza a la ecuación (4) en el caso de electrones y otras partículas de espín $\frac{1}{2}$).

Consideremos ahora el conjunto de los N electrones (masa m_e , carga $-e$) de un átomo de número atómico Z_2 . La función de onda atómica es $\Psi(q_1, \dots, q_N)$, donde la notación q_j indica las variables de posición \vec{r}_j y el espín $m_{s,j}$ de cada electrón. La función de onda satisface la ecuación de ondas independiente del tiempo

$$\mathcal{H}_A(q_1, \dots, q_N) \Psi(q_1, \dots, q_N) = E \Psi(q_1, \dots, q_N), \quad (9)$$

donde el hamiltoniano atómico \mathcal{H}_A contiene, además de las energías cinéticas (no relativistas) de los electrones, las energías potenciales electrostáticas atractivas electrón-núcleo y repulsivas electrón-electrón, es decir,

$$\mathcal{H}_A = \sum_{j=1}^N \frac{\vec{p}_j^2}{2m_e} + \sum_{j=1}^N \left(-\frac{Z_2 e^2}{r_j} \right) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}}. \quad (10)$$

La ecuación (9) con el hamiltoniano (10) no tiene solución exacta, y es necesario recurrir a aproximaciones que permitan simplificarla. Así, en el modelo de electrones independientes en un campo central se supone que todos los electrones se mueven en un potencial atómico promedio $V(r)$, elegido de modo que sea una buena aproximación a los potenciales electrostáticos de la ecuación (10), y entonces

$$\mathcal{H}_A = \sum_{j=1}^N \left[\frac{\vec{p}_j^2}{2m_e} + V(r_j) \right] \quad (11)$$

o bien, si partimos de una formulación relativista,

$$\mathcal{H}_A = \sum_{j=1}^N [c \vec{\alpha}_j \cdot \vec{p}_j + (\beta_j - 1)m_e c^2 + V(r_j)]. \quad (12)$$

En este contexto, los potenciales autoconsistentes de tipo Hartree–Fock–Slater (no relativista) [5] o Dirac–Hartree–Fock–Slater (relativista) constituyen un punto de partida razonable. Al haber reemplazado el hamiltoniano original por otro aproximado pero separable, la función de onda atómica se escribirá como un determinante de Slater construido con N orbitales de espín monoparticulares ψ_j ,

$$\Psi(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(q_1) & \dots & \psi_1(q_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(q_1) & \dots & \psi_N(q_N) \end{vmatrix}, \quad (13)$$

de modo que Ψ es una función de onda antisimétrica, como corresponde a un sistema de fermiones.

Que las funciones de onda atómicas se expresen como determinantes de Slater simplifica enormemente la evaluación (analítica o numérica) de elementos de matriz. Así en el caso de operadores a un cuerpo $\mathcal{F} = \sum_{j=1}^N f(\vec{r}_j)$ como los que nos encontraremos más adelante resulta que $\langle \Psi' | \mathcal{F} | \Psi \rangle$ se reduce a calcular elementos de matriz monoparticulares $\langle \psi' | f | \psi \rangle$. En particular $\langle \Psi' | \mathcal{F} | \Psi \rangle = 0$ si Ψ y Ψ' difieren en dos o más orbitales de espín monoparticulares. Además, como $V(r)$ es un potencial de campo central, ψ y ψ' factorizan en una parte radial y una parte angular (véase la ecuación (3) o su análoga relativista [8]). Esta propiedad simplifica a su vez el cálculo de $\langle \psi' | f | \psi \rangle$, que se reduce a únicamente integrales radiales (i.e. unidimensionales).

La figura 1 muestra la energía de ligadura experimental $U_{n\kappa}$ de las capas K, L1–L3 y M1–M5 de los átomos neutros. Una peculiaridad interesante de los potenciales autoconsistentes tipo Dirac–Hartree–Fock–Slater es que $|\varepsilon_{n\kappa}| \approx U_{n\kappa}$.

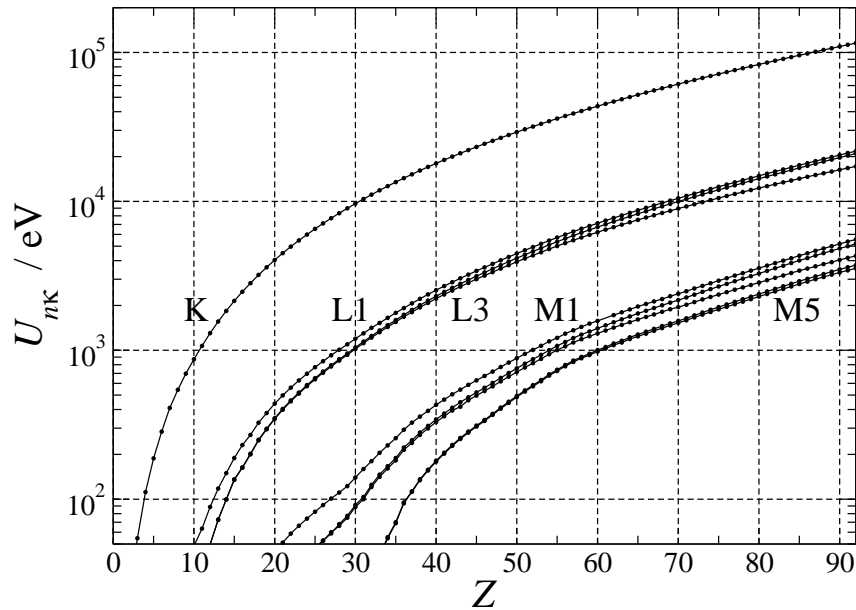


Figura 1: Energías de ionización experimentales de las capas K, L1–L3 y M1–M5 de los átomos neutros [9].

1.2.1 Interacción entre un átomo y la radiación incidente

Cuando un átomo se ve sometido a la influencia de la radiación incidente deben incluirse en \mathcal{H} términos adicionales con las energías de interacción entre el proyectil y los electrones atómicos. La correspondiente ecuación de Schrödinger (o Dirac) es difícil o imposible de resolver exactamente, por lo que hemos de recurrir a métodos aproximados. Con el fin de emplear teoría de perturbaciones, descomponemos el hamiltoniano en dos sumandos, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$, siendo la ecuación de Schrödinger con \mathcal{H}_0 resoluble y \mathcal{H}' la “perturbación”¹

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

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

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

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

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

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

El producto $b_{\lambda}^{\dagger} b_{\lambda}$ da el número de fotones en el modo λ .

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

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

¹Frecuentemente se incluyen en \mathcal{H}_0 aquellos términos que no dependen del proyectil mientras que \mathcal{H}' contiene las energías de interacción entre el proyectil y los electrones atómicos, pero existen otras maneras de descomponer \mathcal{H} .

Efectuando el acoplamiento mínimo² en la ecuación (11) podemos escribir

$$\mathcal{H}'_{\text{ph}} = \sum_{j=1}^N \frac{e}{m_e c} \vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{r}}_j) \cdot \vec{\mathbf{p}}_j + \sum_{j=1}^N \frac{e^2}{2m_e c^2} A^2(\vec{\mathbf{r}}_j) \equiv \mathcal{H}'_{\text{ph},1} + \mathcal{H}'_{\text{ph},2}. \quad (19)$$

En el caso relativista hemos de realizar el acoplamiento mínimo en la ecuación (12) y entonces

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

Por otro lado, cuando la radiación incidente es una partícula cargada (carga $Z_1 e$, masa M) tenemos que la perturbación es la interacción coulombiana (instantánea)

$$\mathcal{H}'_{\text{cp}} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_0} + \sum_{j=1}^N \left(-\frac{Z_1 e^2}{r_{0j}} \right) \equiv \mathcal{H}'_{\text{cp},1} + \mathcal{H}'_{\text{cp},2}, \quad (21)$$

siendo $\vec{\mathbf{r}}_0$ la posición de la partícula cargada. En esta expresión hemos omitido la *interacción transversal*, un efecto relativista causado por el intercambio de fotones virtuales [8].

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

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \varrho(E_f = E_i) \quad (22)$$

con

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

y donde $\varrho(E_f)$ es la densidad de estados finales. El primer sumando de M_{fi} es el término de primer orden, el sumatorio sobre estados intermedios $|n\rangle$ son las contribuciones de segundo orden, etc.

1.2.2 Otros modelos más sencillos

En ocasiones es posible entender cualitativamente, e incluso cuantitativamente, ciertos procesos de interacción de la radiación con la materia empleando una descripción clásica de los electrones atómicos. Así, podemos considerar que cada átomo (o molécula) neutro posee $N = Z_2$ electrones ligados armónicamente a una posición de equilibrio mediante fuerzas recuperadoras lineales. Supondremos que f_j de estos electrones tienen frecuencias angulares propias ω_j , verificándose que $\sum_j f_j = Z_2$. En el contexto de la mecánica cuántica esta relación se conoce como *regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn*, y los f_j se interpretan como intensidades de oscilador [5]. La dinámica de los electrones con frecuencia angular ω_j está gobernada por la segunda ley de Newton

$$m_e \ddot{\vec{\mathbf{r}}} + m_e \Gamma \dot{\vec{\mathbf{r}}} + m_e \omega_j^2 \vec{\mathbf{r}} = -e \vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}}, t), \quad (24)$$

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

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

²que consiste en reemplazar $\vec{\mathbf{p}}$ por $\vec{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \vec{\mathbf{A}}$ y \mathcal{H}_A por $\mathcal{H}_A - q\varphi$ (en nuestro caso $q = -e$ y $\varphi = 0$) [5, 7].

En otras situaciones, como por ejemplo en el caso de metales, es útil describir los electrones más débilmente ligados (los de conducción) como si constituyeran un gas de electrones libres y emplear en los cálculos la correspondiente función dieléctrica (compleja) $\epsilon(k, \omega) = \epsilon_1(k, \omega) + i\epsilon_2(k, \omega)$ dependiente del vector de ondas k y la frecuencia angular ω ; la magnitud relevante en este tipo de formalismos es la *función de pérdida de energía* $\text{Im}(-1/\epsilon) = \epsilon_2/(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)$.

Finalmente, cuando la energía de la radiación incidente es muy alta podemos despreciar las energías de ligadura y las distribuciones de velocidades de los Z_2 electrones del blanco, y describirlos como si estuvieran libres y en reposo. Las ecuaciones de conservación de la energía y el momento lineal permiten entonces estimar las energías y direcciones de salida más probables del proyectil y del blanco tras la colisión binaria.

1.3 El concepto de sección eficaz

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

$$\frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} = \frac{1}{\dot{\Phi}} \frac{\dot{N}}{dE' d\Omega}. \quad (26)$$

El último factor está directamente relacionado con la probabilidad de transición por unidad de tiempo dada por la regla de oro de Fermi, ecuación (22). Si integramos respecto del ángulo sólido y las energías obtenemos la sección eficaz total

$$\sigma = \int dE' \int d\Omega \frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega}, \quad (27)$$

que tiene dimensiones de superficie. Las secciones eficaces suelen expresarse en cm^2 o en barn ($1 \text{ b} \equiv 10^{-24} \text{ cm}^2$).

Podemos interpretar la sección eficaz diferencial como una densidad de probabilidad a partir de la relación

$$p(E', \theta) \equiv \frac{1}{\sigma} 2\pi \sin \theta \frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega}. \quad (28)$$

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

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

$$\lambda^{-1} = \mathcal{N} \sigma, \quad (29)$$

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

Las consideraciones anteriores son directamente generalizables si hay diversos mecanismos de interacción i . Así tendremos que

$$\sigma_{\text{T}} = \sum_i \sigma_i, \quad \lambda_{\text{T}}^{-1} = \sum_i \lambda_i^{-1}. \quad (30)$$

2 Interacción de los fotones con la materia

Los fotones carecen de masa en reposo y carga eléctrica. Por tanto su interacción con el material atravesado no es tan intensa como en el caso de partículas cargadas. Consideraremos la interacción

de fotones no polarizados de energía E con átomos neutros cuyo número atómico denotaremos por Z en esta sección al no haber posibilidad de confusión. En el intervalo de energías de interés, entre aproximadamente 0.1 keV y 1 GeV, los procesos de colisión dominantes son el efecto fotoeléctrico, la dispersión Rayleigh, el efecto Compton y la creación de pares electrón-positrón. Otros modos de interacción, tales como las reacciones fotonucleares, ocurren con probabilidades mucho menores [10] y son ignorados en numerosas situaciones prácticas.

En lo que sigue κ indicará la energía del fotón en unidades de $m_e c^2 \approx 511$ keV (la energía en reposo del electrón),

$$\kappa \equiv \frac{E}{m_e c^2}. \quad (31)$$

2.1 Efecto fotoeléctrico

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

2.1.1 La aproximación de Born (no relativista)

La aproximación de Born (no relativista) considera la perturbación $\mathcal{H}'_{\text{ph},1}$, ecuación (19), a primer orden, con la simplificación adicional de reemplazar la función de onda del fotoelectrón por una onda plana. Esta aproximación dará secciones eficaces razonables sólo si $\varepsilon_e \gg U_i$ de modo que se pueda despreciar la interacción coulombiana del fotoelectrón con el ión residual.

La sección eficaz diferencial de efecto fotoeléctrico del átomo de hidrógeno (y de iones hidrogenoides) en la aproximación de Born puede ser evaluada analíticamente. La expresión que se obtiene en el caso de fotones no polarizados es (véase por ejemplo [5])

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_e} = 2^{3/2} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \kappa^{-7/2} \frac{\sin^2 \theta_e}{[1 - (v_e/c) \cos \theta_e]^4} \approx 2^{3/2} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \kappa^{-7/2} \sin^2 \theta_e, \quad (32)$$

donde $\alpha \equiv e^2/\hbar c \approx 1/137$ es la constante de estructura fina de Sommerfeld. La proporcionalidad con $\sin^2 \theta_e$ indica que el fotoelectrón tiende a emitirse perpendicularmente a la dirección del fotón incidente. La sección eficaz total se obtiene integrando la sección eficaz diferencial (32) sobre todas las direcciones de emisión,

$$\sigma(E) = \int_{-1}^1 \frac{d\sigma}{d\Omega_e} 2\pi d(\cos \theta_e) = \frac{2^{9/2} \pi}{3} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \kappa^{-7/2}. \quad (33)$$

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

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

2.1.2 La aproximación dipolar eléctrica (no relativista)

En la aproximación dipolar eléctrica no relativista, el hamiltoniano de la interacción entre el campo de radiación electromagnética y el átomo es $\mathcal{H}'_{\text{ph},1}$, ecuación (19), pero haciendo la exponencial igual a 1 en la expresión del potencial vector, ecuación (18). Con estas simplificaciones, la relación de conmutación de Heisenberg permite reemplazar los valores esperados de los operadores $\vec{\mathbf{p}}_j$ por los de $\vec{\mathbf{r}}_j$. Empleando teoría de perturbaciones a primer orden, ecuaciones (22) y (23) con sólo el término $M_{fi}^{(1)}$, la sección eficaz de efecto fotoeléctrico se escribe

$$\sigma(E) = 4\pi^2 \alpha E \left| \left\langle \Psi_f \left| \sum_{j=1}^Z \vec{\mathbf{r}}_j \right| \Psi_i \right\rangle \right|^2, \quad (34)$$

donde Ψ_i y Ψ_f son las funciones de onda atómicas inicial y final, respectivamente. Éstas son aproximadas mediante determinantes de Slater y el operador es a un cuerpo, así que sólo estarán permitidas transiciones que involucren a un único electrón. El elemento de matriz se reduce entonces a $\langle \psi_f | \vec{\mathbf{r}} | \psi_i \rangle$, siendo ψ_i y ψ_f los orbitales de espín monoparticulares inicial (ligado) y final (libre), respectivamente, del electrón activo (el que efectúa la transición). En principio deberíamos efectuar un desarrollo en ondas parciales del orbital libre ψ_f . Sin embargo el carácter vectorial del operador $\vec{\mathbf{r}}$ impone la conocida regla de selección $\ell' = \ell \pm 1$, de manera que contribuyen a lo sumo dos ondas parciales. Las funciones radiales reducidas inicial, $P_{n\ell}(r)$, y final, $P_{\varepsilon_e \ell'}(r)$, del electrón activo se obtienen resolviendo numéricamente la ecuación de Schrödinger radial.

La expresión final para la sección eficaz de efecto fotoeléctrico de la capa activa es ($N_{n\ell}$ es el número de electrones de dicha capa) [11]

$$\sigma(E) = \frac{4\pi^2 \alpha}{3} N_{n\ell} (\varepsilon_e - \varepsilon_{n\ell}) \left[\frac{\ell}{2\ell+1} \mathcal{R}_{\ell-1}^2 + \frac{\ell+1}{2\ell+1} \mathcal{R}_{\ell+1}^2 \right] \quad (35)$$

(recordemos que $E = \varepsilon_e + U_{n\ell} \approx \varepsilon_e - \varepsilon_{n\ell}$), con las integrales radiales dadas por

$$\mathcal{R}_{\ell\pm 1}(\varepsilon_e) \equiv \int_0^\infty P_{\varepsilon_e, \ell\pm 1}(r) r P_{n\ell}(r) dr. \quad (36)$$

Las funciones de onda radiales reducidas ligadas y libres de los átomos de un electrón admiten expresiones analíticas. Cuando el estado inicial es el 1s la integral radial es

$$\left(\int_0^\infty P_{\varepsilon_e, 1}(r) r P_{10}(r) dr \right)^2 = 2^8 Z^{-4} \frac{a_0^3}{e^2} f(Ze^2/\hbar v_e) \quad (37)$$

con

$$f(x) = \left(\frac{x^2}{1+x^2} \right)^5 \frac{\exp[-4x \arctan(1/x)]}{1 - \exp(-2\pi x)}. \quad (38)$$

La figura 2 muestra las secciones eficaces de fotoionización, calculadas en la aproximación dipolar eléctrica, de las capas atómicas de diversos átomos ligeros [9].

2.1.3 Cálculos más exactos de la sección eficaz de efecto fotoeléctrico

Hoy en día los cálculos considerados más exactos son los realizados por Scofield, que incluyen todos los multipolos del campo de radiación así como efectos relativistas, lo cual es esencial para átomos pesados. Es decir, se trata \mathcal{H}'_{ph} , ecuación (20), a primer orden sin introducir simplificaciones adicionales. Estos resultados han sido incorporados a la base de datos EPDL '97 [12] y en el programa XCOM [13]. A modo de ejemplo, la figura 3 presenta las secciones eficaces de efecto fotoeléctrico para Al, Cu y Pb [13].

En un trabajo reciente, Sabbatucci y Salvat [14] han revisado los diversos esquemas de cálculo de secciones eficaces de efecto fotoeléctrico.

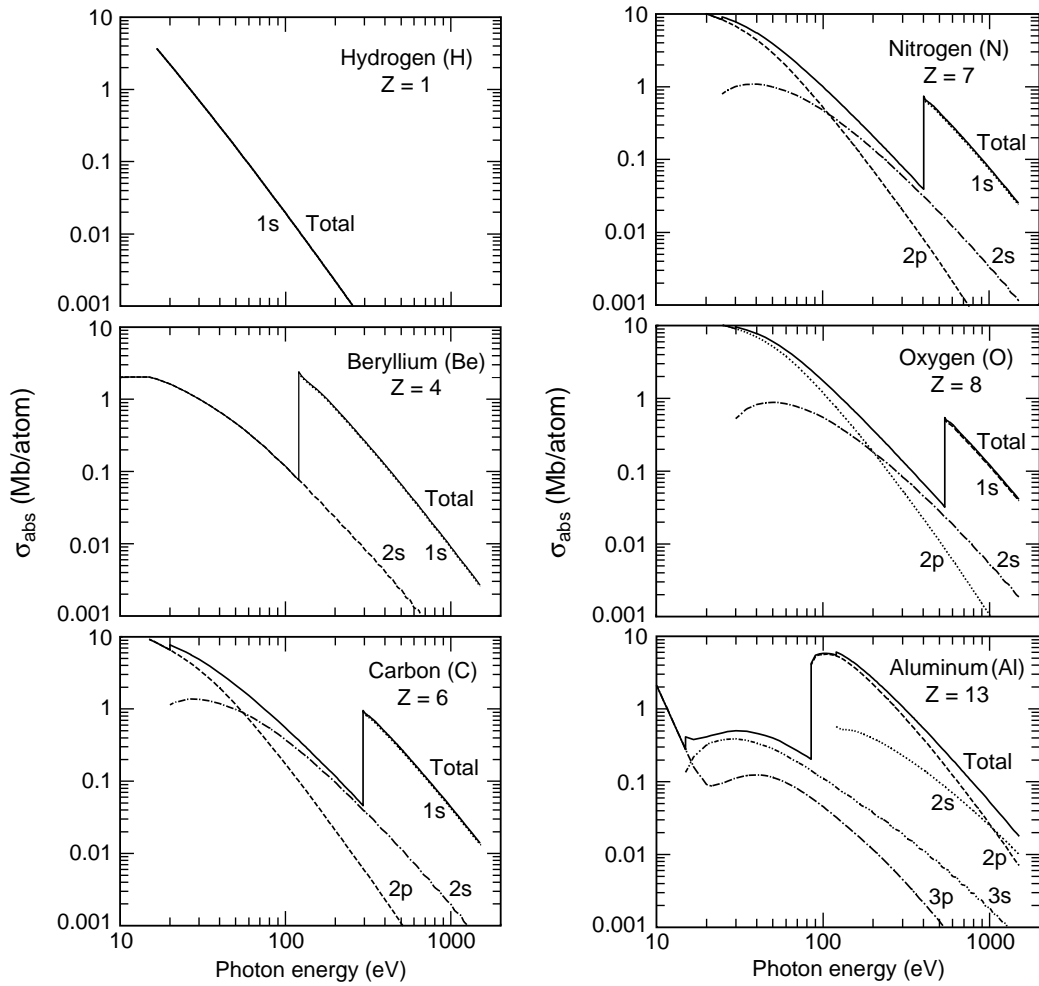


Figura 2: Secciones eficaces de efecto fotoeléctrico de las diversas capas de los átomos de H, Be, C, N, O y Al, calculadas en la aproximación dipolar eléctrica. (Figura tomada de la referencia [9].)

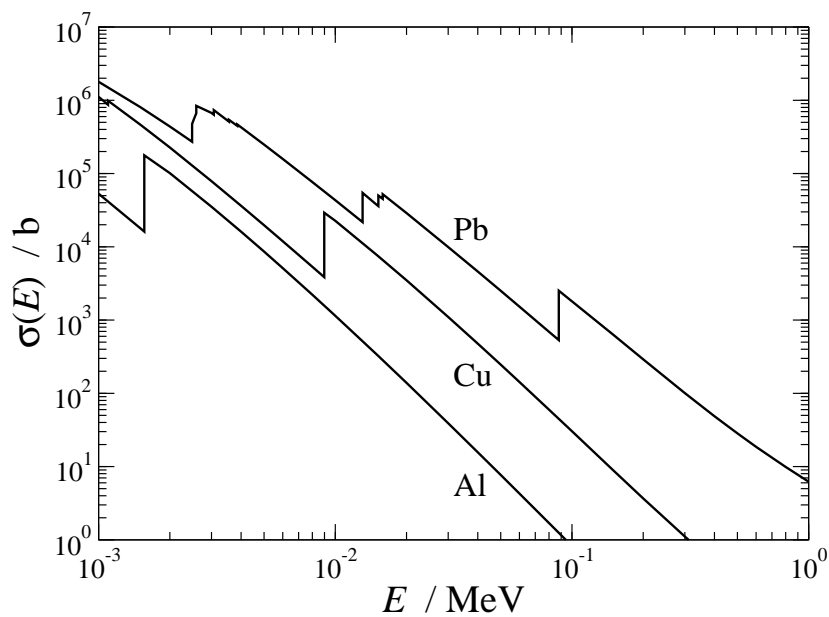


Figura 3: Secciones eficaces de efecto fotoeléctrico para Al, Cu y Pb [13].

2.2 Dispersión coherente o Rayleigh

La dispersión coherente o Rayleigh es el proceso por el cual un fotón es dispersado elásticamente por los electrones atómicos ligados, es decir, sin que el átomo blanco sea excitado. En consecuencia $\Psi_f = \Psi_i$ y las energías de los fotones incidente y dispersado son iguales, $E' = E$. Este proceso se denomina coherente porque aparecen efectos de interferencia entre las ondas dispersadas por diferentes partes de la distribución de carga atómica.

2.2.1 Dispersión coherente en la aproximación del factor de forma

Este formalismo (esencialmente no relativista) trata el hamiltoniano $\mathcal{H}'_{\text{ph},2}$, ecuación (19), de la interacción entre la radiación electromagnética y el átomo como una perturbación a primer orden, mientras que desprecia la contribución de $\mathcal{H}'_{\text{ph},1}$ a segundo orden. Desarrollando los correspondientes elementos de matriz $\langle f | \mathcal{H}'_{\text{ph},2} | i \rangle$, la sección eficaz diferencial (por átomo) para dispersión coherente está dada por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{\text{T}}}{d\Omega} [F(q, Z)]^2, \quad (39)$$

donde

$$\frac{d\sigma_{\text{T}}}{d\Omega} = r_e^2 \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \quad (40)$$

es la *sección eficaz diferencial de Thomson* para la dispersión por un electrón libre y en reposo (que se obtiene también a partir de argumentos clásicos [15]), θ es el ángulo de dispersión polar (i.e. el ángulo entre las direcciones de propagación del fotón antes y después de la interacción), $r_e \equiv e^2/m_e c^2 \approx 2.818 \times 10^{-13}$ cm es el denominado radio clásico del electrón, y

$$F(q, Z) = \left\langle \Psi_0 \left| \sum_{j=1}^Z \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_j / \hbar) \right| \Psi_0 \right\rangle \quad (41)$$

es el *factor de forma atómico*. Aquí Ψ_0 denota la función de onda atómica del estado fundamental y la suma recorre los Z electrones atómicos; $\vec{q} = \hbar\vec{k} - \hbar\vec{k}'$ es el vector transferencia de momento, cuyo módulo es

$$q = 2(E/c) \sin(\theta/2) \quad (42)$$

pues $k' = k$. El factor de forma atómico puede ser expresado como la transformada de Fourier de la densidad electrónica $\rho(\vec{r})$ del átomo la cual, teniendo en cuenta la simetría esférica, se simplifica a

$$F(q, Z) = \int_0^\infty \rho(r) \frac{\sin(qr/\hbar)}{qr/\hbar} 4\pi r^2 dr. \quad (43)$$

$F(q, Z)$ es una función monótona decreciente en q que varía desde $F(0, Z) = Z$ a $F(\infty, Z) = 0$, por lo que la presencia de F^2 en la sección eficaz diferencial, ecuación (39), favorece la dispersión Rayleigh hacia ángulos pequeños.

En el caso del átomo de hidrógeno no relativista el factor de forma atómico se puede evaluar analíticamente [5],

$$F_{\text{H}}(q, Z) = \left[1 + \left(\frac{qa_0/\hbar}{2Z} \right)^2 \right]^{-2}, \quad (44)$$

expresión que se conoce como *fórmula de Pirene*. Por el contrario, los factores de forma de átomos con más de un electrón han de ser calculados numéricamente. Suelen estar disponibles en forma de extensas tablas como las de Hubbell y colaboradores [16], obtenidas a partir de densidades atómicas autoconsistentes para $Z = 2-100$. También existen aproximaciones analíticas propuestas por diversos autores, como por ejemplo la referencia [17]. En la figura 4 se muestran los factores de forma correspondientes a los átomos de C, Cu y Pb [16].

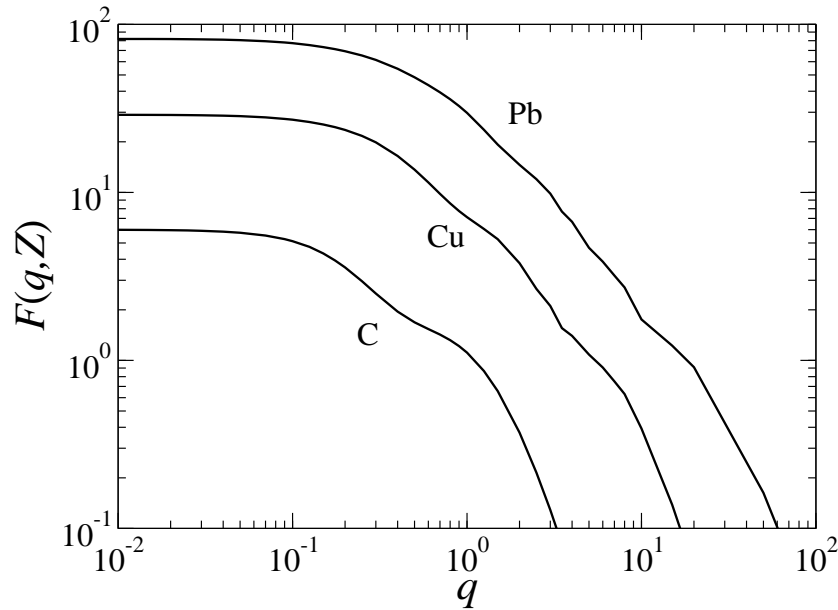


Figura 4: Factores de forma atómicos de C, Cu y Pb en función de $q/m_e c$ [16].

La sección eficaz total (por átomo) de dispersión Rayleigh es

$$\sigma(E) = \pi r_e^2 \int_{-1}^1 (1 + \cos^2 \theta) [F(q, Z)]^2 d(\cos \theta). \quad (45)$$

Para energías bajas, el factor de forma en el subintegrando no difiere demasiado de $F(0, Z) = Z$ y la dispersión coherente se reduce a la *dispersión Thomson*. Por consiguiente

$$\sigma \simeq \frac{8}{3} \pi r_e^2 Z^2. \quad (46)$$

En cambio, en el límite de alta energía es

$$\sigma \propto E^{-2}. \quad (47)$$

Estos comportamientos asintóticos se ven claramente en la figura 5, donde se han representado las secciones eficaces totales Rayleigh de C, Cu y Pb [13].

2.2.2 Dispersión coherente anómala

En realidad la expresión (39) es adecuada sólo para fotones con $E \gg U_K$, siendo U_K la energía de ligadura de la capa K. El comportamiento predicho por la ecuación (46) se ve alterado sustancialmente cuando se introducen los factores (reales) de dispersión “anómala” f' y f'' , cuyo origen está en el hamiltoniano relativista \mathcal{H}'_{ph} , ecuación (20), tratado a segundo orden (*método de la matriz S de dispersión*). La sección eficaz diferencial adopta ahora la forma

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma_T}{d\Omega} \left| F(q, Z) + f'(E, Z) + i f''(E, Z) \right|^2. \quad (48)$$

La correspondiente sección eficaz total presenta cerca de los bordes de absorción una marcada reducción respecto de la sección eficaz predicha por la ecuación (45) [18, 19]. Afortunadamente cuando aparecen estos efectos de dispersión anómala la dispersión coherente es mucho menos probable que la absorción fotoeléctrica. La aproximación del factor de forma, ecuación (39), es por tanto suficiente para muchos propósitos.

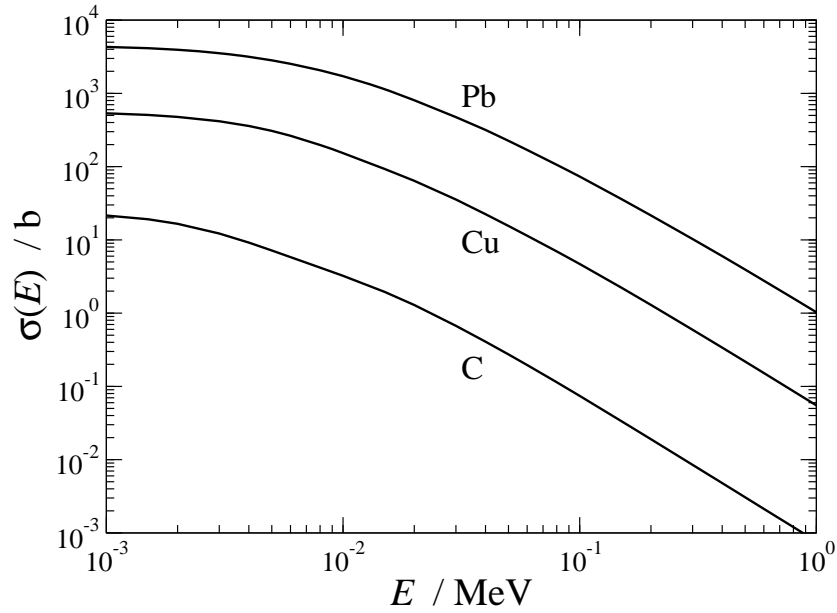


Figura 5: Secciones eficaces Rayleigh de C, Cu y Pb [13].

2.3 Dispersión incoherente o Compton

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

Si el electrón blanco está inicialmente libre y en reposo es $\varepsilon_e = (1 - \tau)E$. La conservación de energía y momento lineal conduce a las relaciones

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

y

$$\cos \theta_e = (\kappa + 1) \left(\frac{1 - \tau}{\kappa [2 + \kappa(1 - \tau)]} \right)^{1/2}. \quad (50)$$

De la ecuación (49) se sigue que

$$\tau = \frac{1}{1 + \kappa(1 - \cos \theta)}, \quad (51)$$

es decir,

$$E' = \frac{E}{1 + \frac{E}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)} \equiv E_C. \quad (52)$$

La energía del fotón dispersado queda determinada unívocamente por el ángulo polar de dispersión. La relación (52) puede invertirse para conocer θ en función de E' . Los valores mínimo y máximo de τ son

$$\tau_{\min} = \frac{1}{1 + 2\kappa} \quad \text{y} \quad \tau_{\max} = 1, \quad (53)$$

que corresponden a dispersión hacia atrás ($\theta = \pi$) y hacia adelante ($\theta = 0$), respectivamente.

2.3.1 La fórmula de Klein–Nishina

Si suponemos que los electrones del blanco están libres y en reposo, la sección eficaz diferencial angular (por electrón) para fotones no polarizados viene dada por la *fórmula de Klein–Nishina*

$$\frac{d\sigma_{\text{KN}}}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{E_C}{E} \right)^2 \left(\frac{E_C}{E} + \frac{E}{E_C} - \sin^2 \theta \right) \quad (54)$$

$$= \frac{r_e^2}{2} [1 + \kappa(1 - \cos \theta)]^{-2} \left[1 + \cos^2 \theta + \frac{\kappa^2(1 - \cos \theta)^2}{1 + \kappa(1 - \cos \theta)} \right]. \quad (55)$$

En el límite de bajas energías, $\kappa \rightarrow 0$, $d\sigma_{\text{KN}}/d\Omega$ se reduce a la fórmula de Thomson dada por la ecuación (40).

A menudo es más conveniente expresar la sección eficaz de Klein–Nishina en términos de τ , la fracción de energía del fotón secundario,

$$\frac{d\sigma_{\text{KN}}}{d\tau} = \frac{d\sigma_{\text{KN}}}{d\Omega} \frac{2\pi d(\cos \theta)}{d\tau} = \frac{\pi r_e^2}{\kappa^3} \left(\frac{1}{\tau^2} + \frac{\kappa^2 - 2\kappa - 2}{\tau} + (2\kappa + 1) + \kappa^2 \tau \right). \quad (56)$$

La correspondiente sección eficaz total (por electrón) de Klein–Nishina es

$$\sigma_{\text{KN}} = \int_{\tau_{\min}}^{\tau_{\max}} \frac{d\sigma_{\text{KN}}}{d\tau} d\tau = \pi r_e^2 \left[\frac{4}{\kappa^2} + \frac{\kappa^2 - 2\kappa - 2}{\kappa^3} \ln(1 + 2\kappa) + \frac{2(\kappa + 1)}{(1 + 2\kappa)^2} \right] \quad (57)$$

y la sección eficaz total del átomo será $\sigma = Z \sigma_{\text{KN}}$ (véase la figura 7 más abajo).

2.3.2 La aproximación de Waller–Hartree

En la aproximación de Waller–Hartree se incluyen los efectos de ligadura de los electrones atómicos. En este formalismo no relativista, la sección eficaz diferencial Compton (por átomo) se obtiene a partir de³

$$\frac{d\sigma}{d\tau} = \frac{d\sigma_{\text{KN}}}{d\tau} S(q, Z), \quad (59)$$

donde $S(q, Z)$ es la *función de dispersión incoherente* del átomo blanco [16] y

$$q^2 = (E^2 + E'^2 - 2EE' \cos \theta) / c^2 = (m_e c)^2 \kappa [2 + \kappa - 2\tau(1 + \kappa) + \tau^2 \kappa] \quad (60)$$

es el cuadrado del módulo de la transferencia de momento al electrón (ahora es $k' \neq k$). La función de dispersión incoherente se calcula a partir de la función de onda atómica del estado fundamental Ψ_0 mediante

$$S(q, Z) = \left\langle \Psi_0 \left| \sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^Z \exp [i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) / \hbar] \right| \Psi_0 \right\rangle - [F(q, Z)]^2. \quad (61)$$

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

³En realidad la aproximación de Waller–Hartree ($\mathcal{H}'_{\text{ph},2}$ tratado a primer orden, con alguna simplificación) conduce a la expresión

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{\text{T}}}{d\Omega} S(q, Z), \quad (58)$$

cuya validez se extiende (de manera ad hoc) a energías altas reemplazando la sección eficaz diferencial de Thomson por la de Klein–Nishina.

En el caso del átomo de hidrógeno, la función de dispersión incoherente admite una expresión analítica ya que, como $i = j = 1$, el elemento de matriz en la ecuación (61) se anula

$$S_{\text{H}}(q, Z) = 1 - [F_{\text{H}}(q, Z)]^2. \quad (62)$$

De nuevo es necesario recurrir al cálculo numérico para evaluar las funciones $S(q, Z)$ de átomos multielectrónicos. Hubbell y colaboradores [16] compilaron tablas de $S(q, Z)$ para todos los elementos desde $Z = 1$ a 100 a partir de funciones de onda atómicas autoconsistentes de tipo Hartree–Fock. En situaciones prácticas puede convenir el empleo de funciones de dispersión incoherente aproximadas pero expresadas en forma analítica, tales como las de la referencia [17], en vez de extensas tablas poco manejables. En la figura 6 se muestran las funciones de dispersión incoherente correspondientes a los átomos de C, Cu y Pb [16].

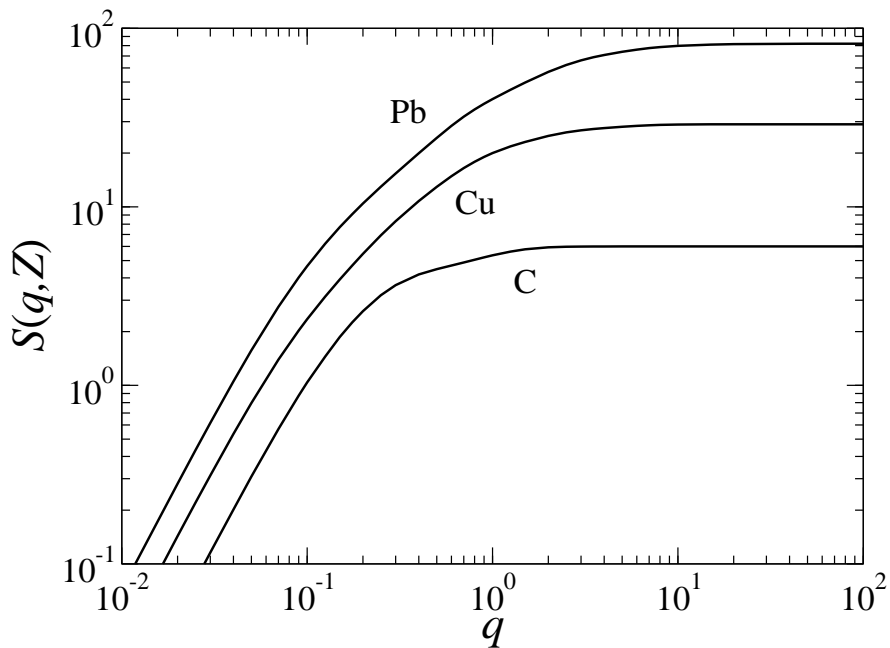


Figura 6: Funciones de dispersión incoherente de C, Cu y Pb en función de $q/m_e c$ [16].

La sección eficaz total incoherente (por átomo) es

$$\sigma(E) = \int_{\tau_{\min}}^{\tau_{\max}} \frac{d\sigma_{\text{KN}}}{d\tau} S(q, Z) d\tau. \quad (63)$$

El comportamiento de σ en función de la energía del fotón puede observarse en la figura 7 para dos especies atómicas, Al y Au. La sección eficaz total tiende a cero para fotones de bajas energías, mientras que la sección eficaz total obtenida a partir de la fórmula de Klein–Nishina, $Z\sigma_{\text{KN}}$, permanece finita en $E = 0$. La diferencia entre secciones eficaces totales obtenidas de la ecuación (63) y de la fórmula de Klein–Nishina aumenta cuando la energía del fotón disminuye y es apreciable para energías menores que ~ 100 keV [16].

2.3.3 Cálculos más exactos de la dispersión Compton

Existen modelos teóricos más elaborados para describir la dispersión incoherente de fotones teniendo en cuenta que el electrón activo está ligado y en movimiento antes de la colisión. Cabe mencionar la *aproximación de impulso* y el *método de la matriz S de dispersión* [20]. La aproximación de impulso sólo considera $\mathcal{H}'_{\text{ph},2}$ a primer orden, mientras que el método de la matriz S de dispersión trata \mathcal{H}'_{ph} a segundo orden. Desafortunadamente, la dificultad de realizar los cálculos numéricos hace que aún no existan tabulaciones completas basadas en estos formalismos.

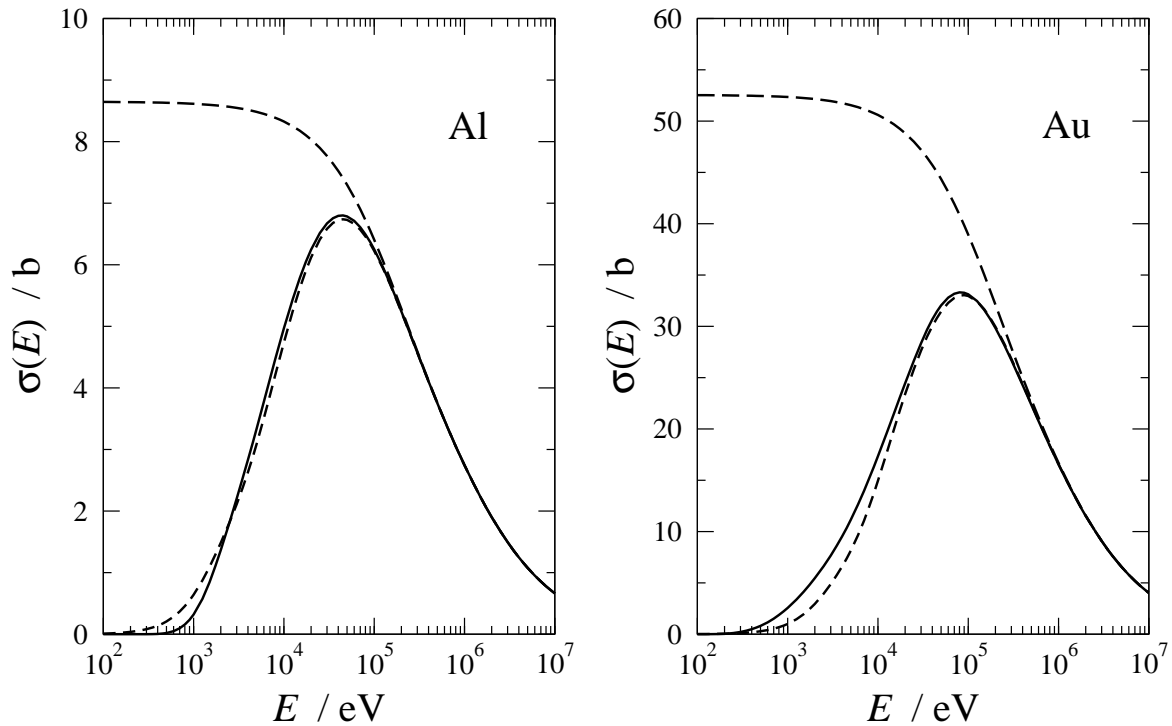


Figura 7: Secciones eficaces Compton de Al y Au. Las curvas a trazos largos y cortos son las predicciones de Klein–Nishina y Waller–Hartree, respectivamente. Las curvas continuas corresponden a la aproximación de impulso relativista.

2.4 Creación de pares electrón-positrón

En la *creación de pares* el fotón desaparece y su energía es invertida en crear un electrón y su antipartícula, el positrón. Si indicamos las energías cinéticas de estas dos partículas cargadas como E_{\pm} , la conservación de la energía exige que sea $E = E_- + E_+ + 2m_e c^2$. Vemos que la creación de pares sólo será posible si $E > 2m_e c^2 \approx 1.022$ MeV. Por otra parte, la conservación de la cantidad de movimiento obliga a que el proceso tenga lugar cerca de una partícula cargada masiva que absorba una pequeña cantidad de movimiento y una fracción despreciable de energía. Esa partícula masiva podrá ser tanto un núcleo como alguno de los electrones atómicos. En este último caso, que sólo puede suceder si $E > 4m_e c^2$, el proceso se denomina *creación de tripletes*, pues el electrón que absorbe la cantidad de movimiento es arrancado del átomo.

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

$$\frac{d\sigma_{\text{BH}}}{dE_-} = Z(Z+1) f(Z, E; E_-), \quad (64)$$

que se conoce como *fórmula de Bethe–Heitler*. No interesa aquí dar los detalles de la función $f(Z, E; E_-)$, que depende a su vez del factor de forma atómico. En cambio vale la pena destacar que, como habíamos anticipado, aparecen dos contribuciones, una proporcional a Z^2 que da cuenta de la creación de pares en el campo del núcleo y otra proporcional a Z que se debe a la contribución de los Z electrones atómicos al proceso (creación de tripletes).

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

$$\langle \theta_{\pm} \rangle \approx \left(1 + \frac{E}{m_e c^2} \right)^{-1}. \quad (65)$$

La sección eficaz total de creación de pares se obtiene al integrar $d\sigma_{\text{BH}}/dE_-$ respecto de E_- . En la figura 8 podemos observar cómo varían las secciones eficaces de creación de pares y tripletes en C, Cu y Pb con la energía del fotón [13].

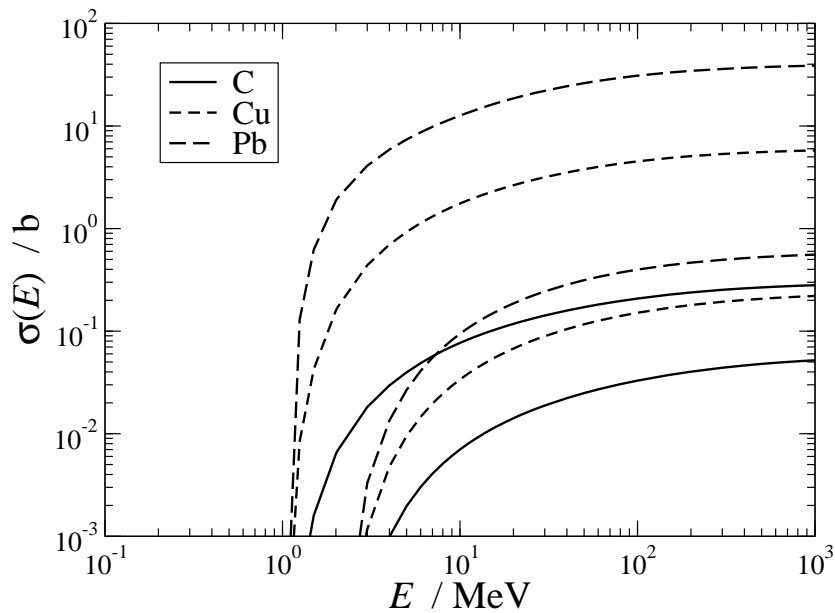


Figura 8: Secciones eficaces de creación de pares y tripletes en C, Cu y Pb [13].

2.5 Reacciones fotonucleares

Cuando el fotón tiene una energía superior a algunos MeV aparece la posibilidad de que interactúe directamente con el núcleo atómico. Las reacciones fotonucleares más probables son las de tipo (γ, n) , en las que el fotón arranca un neutrón, que es liberado. Por supuesto las correspondientes secciones eficaces dependen fuertemente de la energía así como del nucleido en cuestión (es decir, de Z y A), con valores del orden de mb. Una reacción fotonuclear interesante en el contexto de la física médica es $^{16}\text{O}(\gamma, n)^{15}\text{O}$.

2.6 Coeficientes de atenuación

Para cada modo de interacción i (= 'fotoeléctrico', 'Rayleigh', 'Compton', 'creación de pares', 'creación de tripletes'), se define el coeficiente de atenuación (lineal)

$$\mu_i = \mathcal{N} \sigma_i, \quad (66)$$

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

$$\frac{\mu}{\rho} = \frac{N_A}{A_w} \sum_i \sigma_i. \quad (67)$$

Las dos tabulaciones de coeficientes de atenuación másicos más empleadas son la base de datos EPDL '97, de Cullen y coautores [12], y la del NIST, de Berger y Hubbell [13]. Esta última cubre energías de fotones superiores a 1 keV y se puede generar mediante el programa XCOM [13]. Nótese que, convencionalmente, las tabulaciones de coeficientes de atenuación másicos no incluyen la contribución debida a reacciones fotonucleares. A modo de ejemplo, en la figura 9 podemos ver los coeficientes de atenuación másicos de Al y Pb generados con XCOM [13].

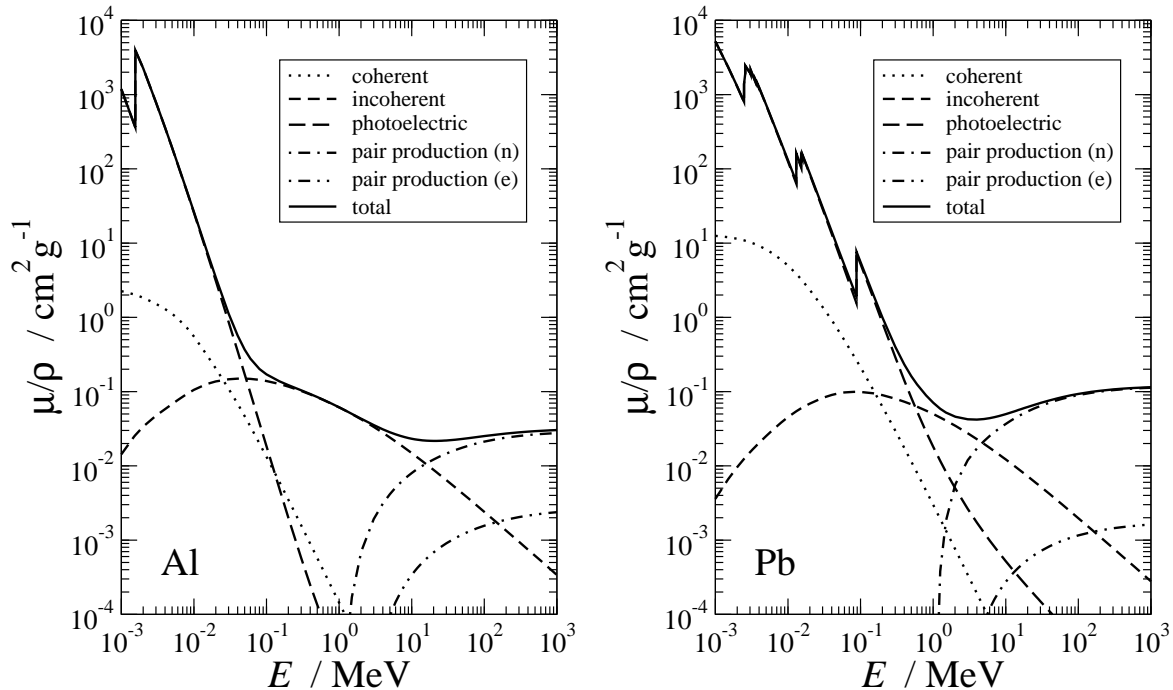


Figura 9: Coeficientes de atenuación másicos de Al y Pb, obtenidos con el programa XCOM [13].

2.6.1 Coeficientes de atenuación másicos de compuestos o mezclas

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

$$\frac{\mu}{\rho} = \sum_j w_j \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_j, \quad (68)$$

indicando w_j la fracción en peso del elemento j -ésimo. Obsérvese que en esta expresión se ignoran los efectos de agregación, ya sean moleculares o de materia condensada.

3 Interacción de las partículas cargadas con la materia

El objetivo de esta sección es revisar los procesos de interacción que experimentan las partículas cargadas (carga $Z_1 e$, masa M) al atravesar un medio material de número atómico Z_2 . Indicaremos por \vec{v} , \vec{p} y E la velocidad, momento lineal y energía cinética del proyectil antes de la colisión, mientras que \vec{v}' , \vec{p}' y E' serán las correspondientes cantidades después de la misma. Definimos las transferencias de momento lineal y energía en la colisión como $\vec{q} \equiv \vec{p} - \vec{p}'$ y $W \equiv E - E'$, respectivamente.

Conviene recordar que, cuando se trata de partículas relativistas, se define $\beta = v/c$ y $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$. El momento lineal y la energía cinética se expresan entonces como $p = \gamma M \beta c$ y $E = (\gamma - 1) M c^2$. Es imprescindible emplear la cinemática relativista cuando $\beta \gtrsim 0.1$, lo cual sucede

para electrones y positrones con $E \gtrsim 5$ keV y para partículas cargadas pesadas con $E/M \gtrsim 10$ MeV/u.

En principio son posibles colisiones tanto elásticas como inelásticas y la emisión de radiación de frenado. La masa de las partículas cargadas determina la importancia de cada uno de estos modos de interacción. Veremos que de hecho las partículas cargadas pesadas ($M \gg m_e$) apenas sufren cambios de dirección (viajan esencialmente en línea recta) y casi no emiten radiación de frenado.

3.1 Dispersión elástica de electrones y positrones

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

3.1.1 La sección eficaz diferencial de Rutherford

Consideremos un electrón o positrón que modifica su dirección de vuelo al interactuar elásticamente con el potencial de Coulomb producido por el núcleo del átomo blanco. El correspondiente hamiltoniano es $\mathcal{H}'_{cp,1}$, ecuación (21). Es un hecho notable que para este hamiltoniano los cálculos no relativistas clásico y cuántico (tanto exacto como en la aproximación de Born) de la correspondiente sección eficaz diferencial conducen a la misma expresión [21],

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{(2m_e Z_1 Z_2 e^2)^2}{q^4} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{m_e v^2} \right)^2 \frac{1}{(1 - \cos \theta)^2}, \quad (69)$$

conocida como *fórmula de Rutherford*; la versión relativista (ignorando el espín) es

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{(2m_e \gamma Z_1 Z_2 e^2)^2}{q^4} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\beta^2 \gamma m_e c^2} \right)^2 \frac{1}{(1 - \cos \theta)^2} = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{(p\beta c)^2} \frac{1}{(1 - \cos \theta)^2}. \quad (70)$$

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

3.1.2 La fórmula de Rutherford apantallada

Una manera sencilla de evitar los problemas de la fórmula de Rutherford consiste en partir del potencial de Wentzel

$$\mathcal{H}'_{cp} \approx V_W(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \exp(-r/R). \quad (71)$$

El factor exponencial reproduce, al menos cualitativamente, los efectos de apantallamiento de la carga nuclear por los electrones atómicos. La distancia de apantallamiento R puede ser estimada con ayuda del modelo atómico de Thomas-Fermi [5], que da

$$R \simeq 0.885 Z_2^{-1/3} a_0. \quad (72)$$

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

$$\frac{d\sigma_{SR}}{d\Omega} = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{(p\beta c)^2} \frac{1}{(2A + 1 - \cos \theta)^2}, \quad (73)$$

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

$$A \equiv \frac{1}{4} (\hbar/p)^2 R^{-2}. \quad (74)$$

La correspondiente sección eficaz total es

$$\sigma_{\text{SR}} = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{(p\beta c)^2} \frac{\pi}{A(1+A)}. \quad (75)$$

3.1.3 Métodos de ondas parciales

En el caso de energías bajas y números atómicos altos es necesario recurrir a formalismos más sofisticados para obtener las secciones eficaces elásticas. En particular, los métodos basados en los desarrollos en ondas parciales [5] proporcionan una descripción correcta de estos procesos para energías superiores a unos 100 eV, ya que están en buen acuerdo con las medidas experimentales disponibles. Además dan cuenta de las diferencias en la dispersión de electrones y positrones, que según la fórmula de Rutherford (apantallada o no) no deberían existir.

Recientemente, ICRU ha revisado a fondo los modelos de dispersión elástica de electrones y positrones y ha elaborado una tabulación basada en el método de ondas parciales relativista [22]. En la figura 10 se muestran, a modo de ejemplo, las secciones eficaces diferenciales de Al y Pb para electrones y positrones de varias energías, tomadas de la base de datos del informe 77 de ICRU [22].

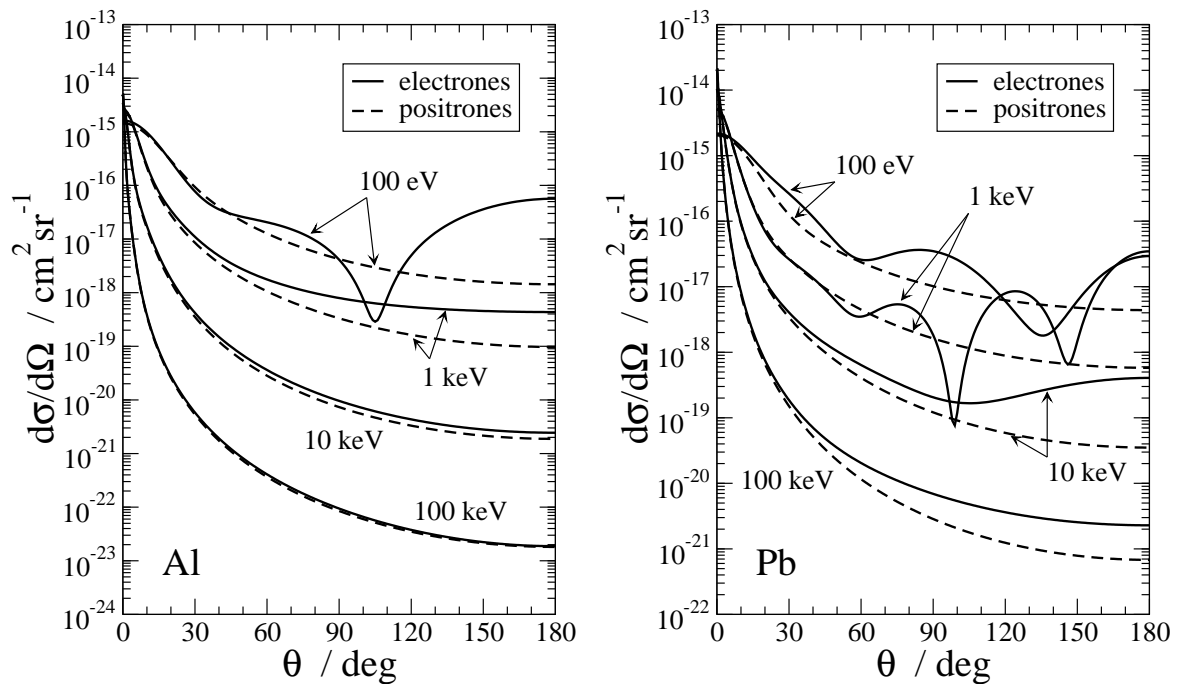


Figura 10: Secciones eficaces diferenciales para la dispersión elástica de electrones y positrones por átomos de Al y Pb [22].

3.2 Colisiones inelásticas

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

3.2.1 Las fórmulas de Rutherford, Møller y Bhabha

Una manera simple de abordar el problema consiste en suponer que los Z_2 electrones del átomo blanco están libres y en reposo, de modo que $W \approx \varepsilon_e$. La conservación de la cantidad de movimiento y de la energía imponen que la pérdida de energía W del proyectil (no relativista) sea inferior a

$$W_{\max} = \frac{2m_e v^2}{\left(1 + \frac{m_e}{M}\right)^2}. \quad (76)$$

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

$$\frac{d\sigma_R}{dW} = \frac{2\pi Z_1^2 e^4}{m_e v^2} \frac{1}{W^2} \quad (77)$$

con $W \leq W_{\max}$. Merece la pena destacar que $d\sigma_R/dW$ depende de la carga y velocidad del proyectil, pero no de su masa.

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

$$\frac{d\sigma_M}{dW} = \frac{2\pi e^4}{m_e c^2 \beta^2} \frac{1}{W^2} \left[1 - \frac{W}{E - W} + \left(\frac{W}{E - W}\right)^2 + \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma}\right)^2 \left(\frac{W}{E - W} + \frac{W^2}{E^2}\right) \right] \quad (78)$$

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

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

$$\frac{d\sigma_B}{dW} = \frac{2\pi e^4}{m_e c^2 \beta^2} \frac{1}{W^2} \left[1 - b_1 \frac{W}{E} + b_2 \left(\frac{W}{E}\right)^2 - b_3 \left(\frac{W}{E}\right)^3 + b_4 \left(\frac{W}{E}\right)^4 \right] \quad (79)$$

con $W \leq W_{\max} = E$ y

$$b_1 = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma}\right)^2 \frac{2(\gamma + 1)^2 - 1}{\gamma^2 - 1}, \quad (80)$$

$$b_2 = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma}\right)^2 \frac{3(\gamma + 1)^2 + 1}{(\gamma + 1)^2}, \quad (81)$$

$$b_3 = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma}\right)^2 \frac{2\gamma(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)^2}, \quad (82)$$

$$b_4 = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma}\right)^2 \frac{(\gamma - 1)^2}{(\gamma + 1)^2}. \quad (83)$$

El factor $1/W^2$ presente en todas estas fórmulas indica que predominarán las colisiones con pequeñas pérdidas de energía (es poco probable generar rayos δ con energía cinética intermedia o grande). Sin embargo la divergencia en $W = 0$ no se debe producir, pues los electrones atómicos no están libres sino ligados.

3.2.2 La aproximación de Born con ondas planas (no relativista)

Un modelo más realista, que tiene en cuenta los efectos de ligadura y movimiento de los electrones atómicos (y por tanto evita la divergencia de las fórmulas de Rutherford, Møller y Bhabha en $W = 0$), está basado en la *aproximación de Born con ondas planas* [23]. Este formalismo trata la perturbación \mathcal{H}'_{cp} , ecuación (21), a primer orden⁴ y proporciona una expresión para la sección eficaz doblemente diferencial de ionización del orbital atómico i -ésimo, $d^2\sigma_i/dW d\Omega$, tomando ondas planas como funciones de onda no perturbadas del proyectil. En concreto, en el caso no relativista [5]

$$\frac{d^2\sigma_i}{dW dQ} = \frac{2\pi Z_1^2 e^4}{m_e v^2} \frac{1}{WQ} \frac{df_i(Q, W)}{dW}, \quad (84)$$

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

$$Q \equiv \frac{q^2}{2m_e} = \frac{M}{m_e} \left(2E - W - 2\sqrt{E(E - W)} \cos\theta \right). \quad (85)$$

Los primeros factores de la ecuación (84) son puramente cinemáticos, mientras que el último describe la respuesta del átomo blanco a la perturbación causada por el proyectil incidente. Este último factor se conoce como *intensidad de oscilador generalizada*, y se calcula a partir de las funciones de onda inicial y final del átomo ionizado,

$$\frac{df_i(Q, W)}{dW} \equiv \frac{W}{Q} \left| \left\langle \Psi_f \left| \sum_{j=1}^{Z_2} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_j / \hbar) \right| \Psi_i \right\rangle \right|^2. \quad (86)$$

Expresando las funciones de onda atómicas Ψ_i y Ψ_f como determinantes de Slater que difieren únicamente en el orbital de espín monoparticular del electrón activo, el elemento de matriz se reduce a $\langle \psi_f | \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r} / \hbar) | \psi_i \rangle$. La intensidad de oscilador generalizada del orbital $1s$ del átomo de H admite una expresión analítica [5], pero la de los orbitales de átomos multielectrónicos ha de calcularse numéricamente tras efectuar un desarrollo en ondas parciales de la exponencial y la función de onda ψ_f del orbital libre.

La sección eficaz diferencial en la transferencia de energía W se obtiene integrando la ecuación (84) respecto de Q ,

$$\frac{d\sigma_i}{dW} = \int_{Q_-}^{Q_+} \frac{d^2\sigma_i}{dW dQ} dQ, \quad (87)$$

donde $Q_{\pm} \equiv Q(\cos\theta = \mp 1)$. Las predicciones de la fórmula de Rutherford, ecuación (77), están en buen acuerdo con los resultados que se obtienen de la ecuación (87) sólo para $U_i \ll W < W_{\max}$, es decir, cuando la transferencia de energía es tan grande que los efectos de ligadura y movimiento pasan a ser irrelevantes. Además $d\sigma_i/dW = 0$ para $W < U_i$, lo que elimina la divergencia de la fórmula de Rutherford en $W = 0$.

En el límite $Q \rightarrow 0$ la intensidad de oscilador generalizada es proporcional a la sección eficaz de efecto fotoeléctrico calculada en la aproximación dipolar eléctrica. En cambio para valores grandes de W y Q los N_i electrones del orbital activo se comportan como si estuvieran libres y en reposo, y entonces ($W \approx \varepsilon_e \approx \frac{q^2}{2m_e}$)

$$\frac{df_i(Q, W)}{dW} \approx N_i \delta(W - Q). \quad (88)$$

Es interesante constatar que si empleamos esta aproximación e integramos la ecuación (84) respecto de los valores cinemáticamente permitidos de Q se recupera la fórmula de Rutherford, ecuación (77).

⁴Como la colisión es inelástica sólo hay que calcular $\langle f | \mathcal{H}'_{cp,2} | i \rangle$ pues $\langle f | \mathcal{H}'_{cp,1} | i \rangle = 0$ por ortogonalidad de los estados inicial y final.

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

$$\sigma_i(E) = \int_{U_i}^E \frac{d\sigma_i}{dW} dW, \quad (89)$$

que toma un valor finito.

3.2.3 Cálculos más exactos de la ionización de capas atómicas internas por impacto de electrones y positrones

La aproximación de Born con ondas planas predice que las secciones eficaces (diferenciales y totales) de ionización son iguales para partículas de carga Z_1e y $-Z_1e$. Esta sobresimplificación puede evitarse si se emplea la *aproximación de Born con ondas distorsionadas*. En este formalismo, parte de la perturbación \mathcal{H}'_{cp} , ecuación (21), se incluye en el hamiltoniano \mathcal{H}_0 , con lo que la función de onda de orden cero del proyectil pasa a ser una onda distorsionada. La nueva “perturbación”, que es menor que \mathcal{H}'_{cp} , se trata a primer orden.

La referencia [24] contiene una parametrización, basada en las aproximaciones de Born con ondas planas y distorsionadas (relativistas), de las secciones eficaces de ionización de las capas K, L y M de todos los átomos por impacto de electrones y positrones. En la figura 11 se han representado estas secciones eficaces para las capas más internas del átomo de Al.

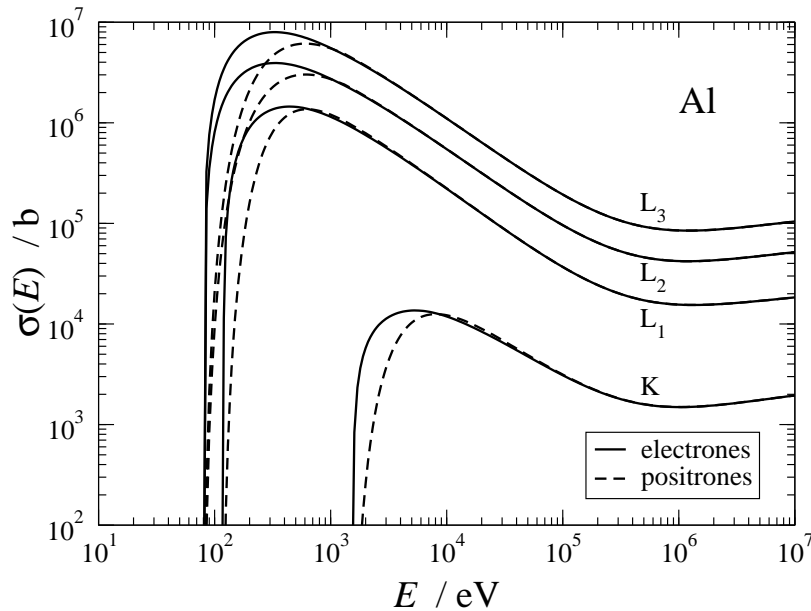


Figura 11: Secciones eficaces de ionización de las capas $1s_{1/2}$, $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ y $2p_{3/2}$ del átomo de Al por impacto de electrones (curvas continuas) y positrones (curvas a trazos) [24].

3.2.4 Colisiones inelásticas de iones positivos vestidos

Un ión de carga positiva (protón, partícula α , etc) puede viajar acompañado de uno o varios electrones que reducen su carga neta, apantallándolo parcial o totalmente. Se dice que es un “ión vestido”. Es posible incorporar este apantallamiento en la expresión de la sección eficaz doblemente diferencial, ecuación (84), si reemplazamos Z_1 por $Z_1 - F(q, Z_1)$, donde $F(q, Z_1)$ es el factor de forma atómico del proyectil. Como $0 \leq F(q, Z_1) \leq Z_1$, la interacción del ión vestido es menor que cuando se trata de una carga Z_1e “desnuda”.

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

3.3 Emisión de radiación de frenado

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

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

$$\frac{d\sigma_{\text{BH}}}{dW} = Z(Z+1) \frac{1}{W} f(Z, E; W), \quad (90)$$

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

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

$$\chi(Z, E, W/E) \equiv \frac{\beta^2}{Z^2} W \frac{d\sigma}{dW} \quad (91)$$

para electrones con energías comprendidas entre 1 keV y 10 GeV [25]. La figura 12 presenta algunas de estas funciones $\chi(Z, E, W/E)$ para Al y Pb.

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

$$p(Z, E, W/E; \cos \theta) = \frac{d^2\sigma/dW d(\cos \theta)}{d\sigma/dW}. \quad (92)$$

Kissel y colaboradores calcularon secciones eficaces diferenciales, empleando métodos de ondas parciales, para electrones con energía cinética entre 1 y 500 keV, y a partir de sus resultados tabularon $p(Z, E, W/E; \cos \theta)$ para unos cuantos valores de Z , E y W/E [26]. Estos y otros autores han propuesto fórmulas analíticas que permiten obtener la densidad de probabilidad de $\cos \theta$ cuando el número atómico o la energía no se corresponden con los de las tablas [27]. También existen en la literatura expresiones analíticas sencillas para estimar la distribución angular en el límite de altas energías (véase por ejemplo la referencia [27]). En este límite $\gamma \gg 1$ el ángulo polar promedio de emisión del fotón de bremsstrahlung disminuye al aumentar la energía del electrón siguiendo la relación aproximada

$$\langle \theta \rangle \approx \gamma^{-1}. \quad (93)$$

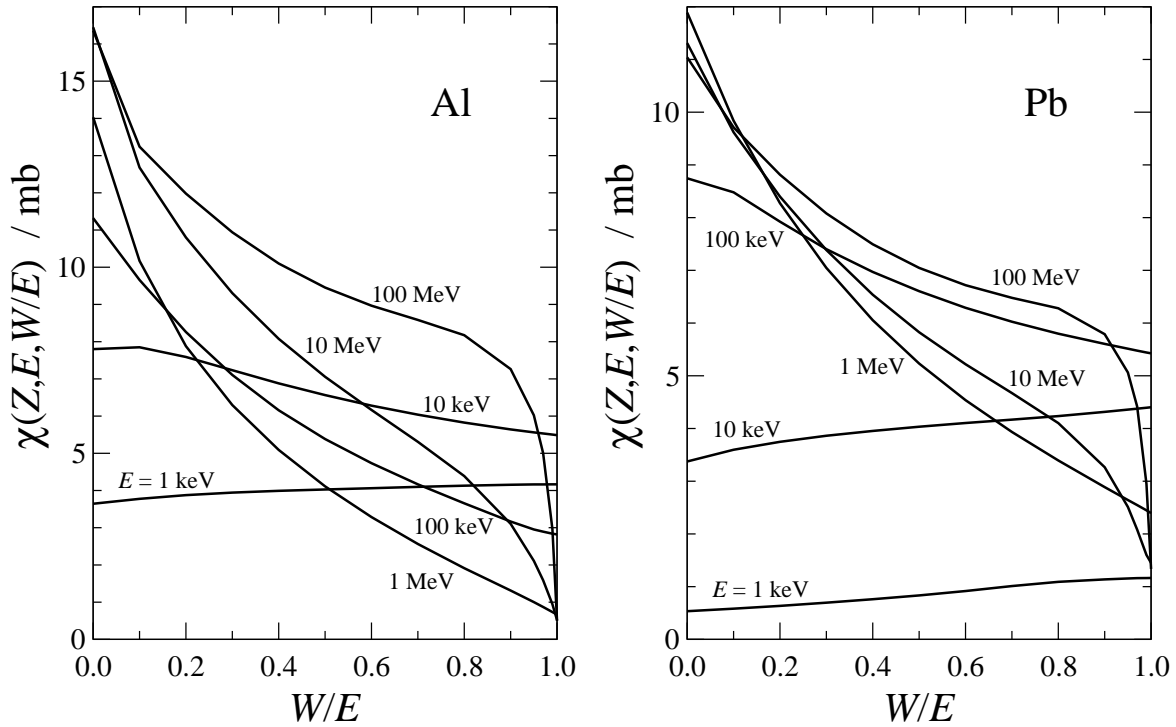


Figura 12: Secciones eficaces diferenciales reducidas para la emisión de radiación de frenado por electrones en Al y Pb [25].

3.4 Aniquilación del positrón

Hemos visto que los positrones interactúan con la materia de manera similar a como lo hacen los electrones (aunque las correspondientes secciones eficaces no son idénticas). Sin embargo, al ser el positrón la antipartícula del electrón, es inestable mientras se propaga por la materia, pudiéndose aniquilar ambos creando uno o varios fotones. Con diferencia lo más probable es que se emitan dos fotones. Heitler obtuvo una expresión para la sección eficaz (por electrón) de este proceso cuando la aniquilación tiene lugar con un electrón libre y en reposo,

$$\sigma_H = \frac{\pi r_e^2}{(\gamma + 1)(\gamma^2 - 1)} \left\{ (\gamma^2 + 4\gamma + 1) \ln \left[\gamma + (\gamma^2 - 1)^{1/2} \right] - (3 + \gamma) (\gamma^2 - 1)^{1/2} \right\}. \quad (94)$$

En el límite no relativista la fórmula de Heitler se reduce a $\sigma_H = \pi r_e^2 c/v$, lo cual muestra que en general la aniquilación tiene lugar una vez que el positrón se encuentra prácticamente en reposo (después de frenarse). Las leyes de conservación de energía y momento lineal obligan entonces a que los dos fotones emitidos tengan una energía igual a $m_e c^2 \approx 511$ keV y viajen en la misma dirección y sentidos opuestos.

3.5 Dispersión elástica múltiple de electrones y positrones

Los recorridos libres medios entre colisiones elásticas de electrones o positrones son muy pequeños. Como consecuencia de este hecho, si un electrón recorre un cierto camino s dentro del medio material en el que se mueve, experimentará numerosas deflexiones angulares, aunque la mayor parte de ellas será de ángulo pequeño. Si ignoramos las pérdidas de energía, se dice que estamos en condiciones de *dispersión elástica múltiple*. Conviene entonces recurrir a una descripción global del cambio de dirección tras recorrer la distancia s . El objetivo es por tanto determinar, dado un valor de s , la distribución $p(\Theta; s)$ de ángulos polares de dispersión acumulados Θ .

3.5.1 Modelo gaussiano

Presentamos en esta sección un modelo que permite evaluar de un modo simple la distribución de ángulos Θ en función de s . La figura 13 indica esquemáticamente la situación que abordamos; Θ_x es el ángulo proyectado sobre el plano xz .

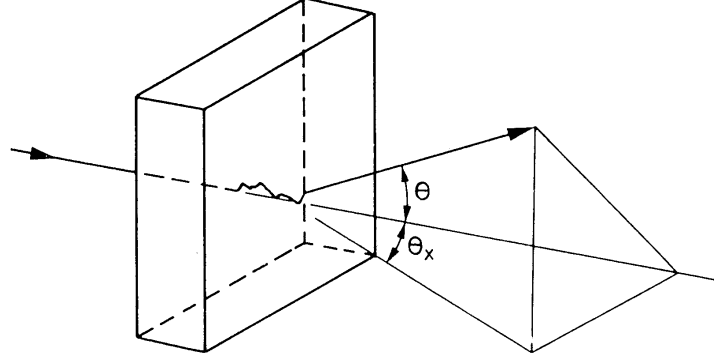


Figura 13: Dispersión elástica múltiple. (Figura tomada de la referencia [28].)

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

$$p(\Theta_x; s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\langle \Theta_x^2 \rangle}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{\Theta_x^2}{\langle \Theta_x^2 \rangle}\right) \quad (95)$$

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

Como $\Theta^2 \approx \Theta_x^2 + \Theta_y^2$ (aproximación de ángulos pequeños) y $\langle \Theta_x^2 \rangle = \langle \Theta_y^2 \rangle = \frac{1}{2}\langle \Theta^2 \rangle$, será finalmente

$$p(\Theta; s) = p(\Theta_x; s) p(\Theta_y; s) = \frac{1}{\pi\langle \Theta^2 \rangle} \exp\left(-\frac{\Theta^2}{\langle \Theta^2 \rangle}\right). \quad (96)$$

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

$$\langle \Theta^2 \rangle = \frac{s}{\lambda} \langle \theta^2 \rangle = s \mathcal{N} \int_0^\infty \theta^2 \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi\theta d\theta, \quad (97)$$

que dependerá de la sección eficaz diferencial elástica adoptada, por ejemplo la fórmula de Rutherford apantallada relativista, ecuación (73).

Como $\langle \Theta^2 \rangle \propto s$, se suele definir el *poder de dispersión*

$$T \equiv \frac{d\langle \Theta^2 \rangle}{ds}, \quad (98)$$

que proporciona el incremento de $\langle \Theta^2 \rangle$ por unidad de recorrido. ICRU ha publicado tablas con poderes de dispersión másicos, T/ρ , para diversos materiales [29].

El modelo gaussiano que hemos presentado es válido para ángulos $\Theta \ll 1$ rad y está emparentado con el modelo de Fermi–Eyges.

3.5.2 Distribuciones angulares de Goudsmit y Saunderson y de Molière

La dispersión elástica múltiple puede describirse como un proceso de Poisson compuesto. Por un lado la probabilidad de que tengan lugar exactamente n colisiones en el camino s sigue la

distribución de Poisson,

$$p_n(s) = (s/\lambda)^n e^{-s/\lambda} / n!, \quad (99)$$

y por otro lado la deflexión angular en cada interacción elástica, f_1 , es también aleatoria. La distribución angular tras exactamente n colisiones está dada por la convolución

$$f_n = f_{n-1} \otimes f_1 \quad \text{con} \quad f_0 \equiv \delta(\Theta) \quad \text{y} \quad f_1 \equiv \frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{d\Omega}. \quad (100)$$

Goudsmit y Saunderson obtuvieron en 1940 la siguiente expresión para la distribución angular de un electrón que ha recorrido un trayecto s [30, 22]:

$$p(\Theta; s) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n(s) f_n(\Theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \exp(-s/\lambda_\ell) P_\ell(\cos \Theta), \quad (101)$$

donde los P_ℓ son polinomios de Legendre y

$$\lambda_\ell \equiv \mathcal{N} \int_{-1}^1 \left[1 - P_\ell(\cos \theta) \right] \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi d(\cos \theta). \quad (102)$$

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

En la literatura sobre dispersión elástica múltiple de electrones suele citarse frecuentemente el modelo de Molière. Este modelo se basa en ciertas simplificaciones (matemáticas y físicas) de la distribución de Goudsmit y Saunderson que proporcionan una expresión para $p(\Theta; s)$ algo más manejable que la ecuación (101) (véase por ejemplo la referencia [30]).

La figura 14 presenta, a modo de ejemplo, las distribuciones angulares de electrones de 1 MeV en Al después de recorrer distancias s iguales a 10 μm y 20 μm (49.4 y 98.8 colisiones elásticas en promedio, respectivamente). Las distribuciones de Goudsmit–Saunderson y Molière están en buen acuerdo excepto para ángulos acumulados Θ grandes, cuyas probabilidades son muy pequeñas. Obsérvese la patología que presenta la distribución de Molière en $\Theta = 180^\circ$. También se aprecian discrepancias entre ambos modelos de $p(\Theta; s)$ para ángulos cercanos a cero, aunque son poco relevantes pues los correspondientes ángulos sólidos son pequeños.

3.6 Dispersión inelástica múltiple

Al igual que en el caso de dispersión elástica múltiple, nos interesa a menudo una descripción global de las colisiones inelásticas que experimenta una partícula cargada al recorrer una distancia s mucho mayor que el correspondiente recorrido libre medio inelástico (que es pequeño). Estamos en las condiciones de *dispersión inelástica múltiple*. De manera análoga, surge una distribución gaussiana en la pérdida de energía acumulada w . No obstante se suele simplificar aún más esta descripción, y se adopta la denominada *aproximación de frenado continuo*, que retiene el valor promedio de w pero desprecia las fluctuaciones estadísticas. Es decir, sólo nos preocupamos por el valor medio de la gaussiana y no tenemos en cuenta la varianza (ni, por supuesto, momentos de orden superior).

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

$$S \equiv -\frac{dE}{ds} = \frac{\langle W \rangle}{\lambda} = \mathcal{N} \int_0^E W \frac{d\sigma}{dW} dW. \quad (103)$$

En el caso de electrones y positrones, las pérdidas de energía pueden deberse a colisiones inelásticas y a la emisión de radiación de frenado, por lo que se definen el poder de frenado de colisión⁵, S_{col} , y el de radiación, S_{rad} , respectivamente. Recordemos que $S_{\text{rad}} \approx 0$ para partículas cargadas pesadas.

⁵En el caso de partículas cargadas pesadas, tradicionalmente a esta contribución se la denomina *poder de frenado electrónico*, S_e .

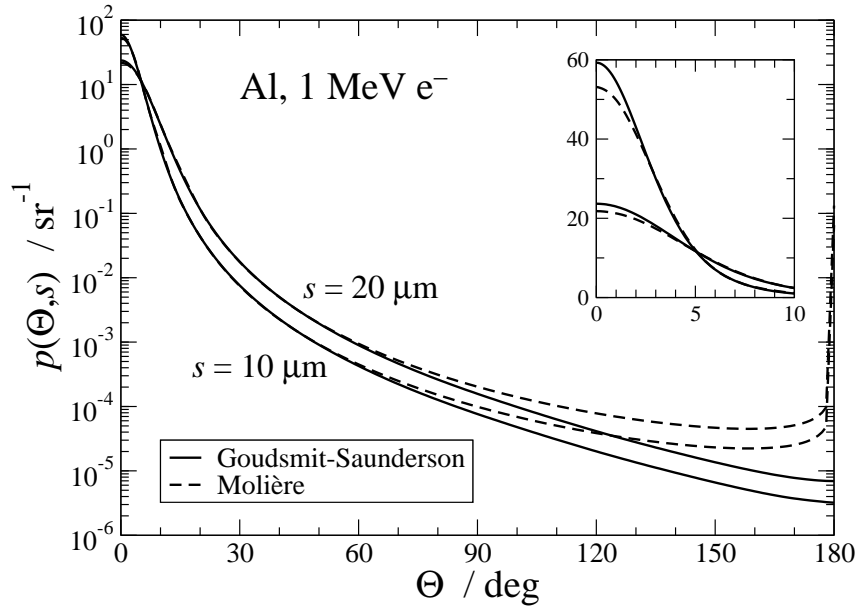


Figura 14: Distribuciones angulares de electrones de 1 MeV tras recorrer 10 μm y 20 μm en Al. Las curvas continuas y a trazos corresponden a las distribuciones de Goudsmit–Saunderson y de Molière, respectivamente.

3.6.1 El poder de frenado de colisión o electrónico

En 1915, antes del nacimiento de la mecánica cuántica, Bohr dedujo el poder de frenado de partículas cargadas pesadas suponiendo que los electrones atómicos están ligados armónicamente [15, 31],

$$S_{\text{col}} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{m_e v^2} \mathcal{N} Z_2 \ln \left(\frac{1.123 m_e v^3}{|Z_1| e^2 \langle \omega \rangle} \right), \quad (104)$$

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

$$Z_2 \ln \langle \omega \rangle = \sum_j f_j \ln \omega_j. \quad (105)$$

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

Si trabajamos en el formalismo de la mecánica cuántica, S_{col} puede calcularse a partir de la ecuación (103), con la sección eficaz diferencial $d\sigma/dW$ dada por las ecuaciones (87) y (84). Este procedimiento requiere evaluar la intensidad de oscilador generalizada con las funciones de onda de todos los electrones de los átomos del medio. Como éstas son complicadas de obtener en el caso de un sólido, es más pragmático realizar de entrada simplificaciones que eviten tener que calcularlas.

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

$$S_{\text{col}} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{m_e v^2} \mathcal{N} Z_2 \ln \left(a \frac{m_e v^2}{I} \right), \quad (106)$$

donde

$$a = \begin{cases} 2 & \text{partículas cargadas pesadas} \\ 1 & \text{positrones} \\ \sqrt{e/8} \approx 0.583 & \text{electrones} \end{cases} \quad (107)$$

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

$$Z_2 \ln I = \int_0^\infty \frac{df(Q=0, W)}{dW} \ln W dW, \quad (108)$$

donde $df(Q=0, W)/dW$ es la intensidad de oscilador óptica. Nótese la similitud de esta expresión con la ecuación (105). Los valores de I para los elementos de la tabla periódica se han representado en la figura 15. Obsérvese que, salvo oscilaciones características, $I \approx (10 \text{ eV}) Z_2$ para $Z_2 \gtrsim 15$. Otro aspecto notable de la fórmula de Bethe es que el poder de frenado depende de la velocidad y la carga de la partícula, pero no de su masa.

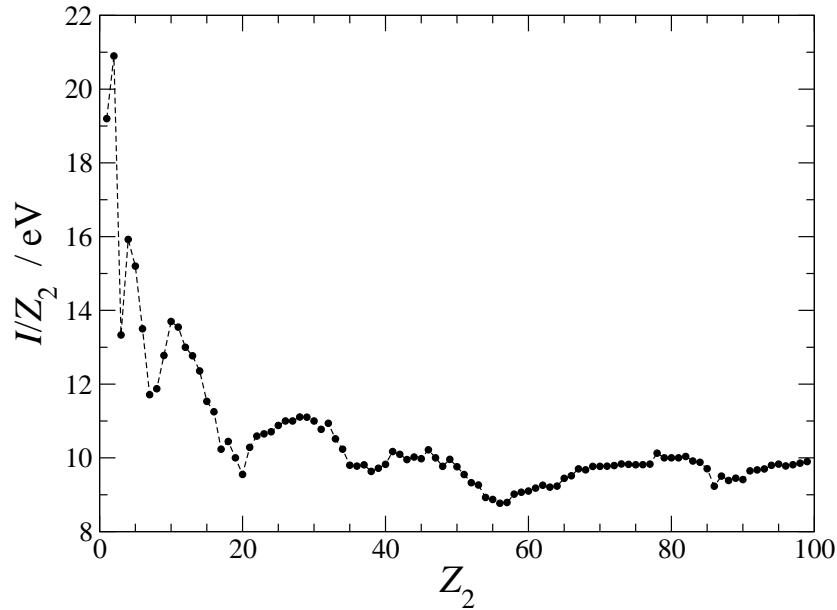


Figura 15: Energías medias de excitación I , tomadas de la referencia [32], en función del número atómico Z_2 .

La validez de la fórmula de Bethe puede ser extendida a energías mayores y menores incluyendo varios efectos que no son tenidos en cuenta por la ecuación (106). Introduciendo \mathcal{N} , ecuación (1), y el radio clásico del electrón r_e , la expresión resultante es la *fórmula de Bethe–Bloch* para el poder de frenado másico por colisión de partículas cargadas pesadas [33]:

$$S_{\text{col}}/\rho = \frac{K}{\beta^2} \frac{Z_2}{A} Z_1^2 L(\beta), \quad (109)$$

donde

$$K \equiv 4\pi r_e^2 m_e c^2 / m_u = 0.307 \text{ MeV cm}^2/\text{g} \quad (110)$$

y

$$L(\beta) = L_0 + Z_1 L_1 + Z_1^2 L_2 + \dots \quad (111)$$

es una función adimensional. El primer término de esta serie perturbativa es

$$L_0 = \ln \left(\frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2}{I} \right) - \beta^2 - \frac{C}{Z_2} - \frac{\delta}{2}, \quad (112)$$

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

La corrección de capas compensa el hecho de que la velocidad del proyectil no es necesariamente mayor que la de los electrones del blanco. La corrección por efecto de densidad da cuenta de la reducción del poder de frenado debido a la polarización del medio, más apreciable cuanto mayor es la energía del proyectil (véase la figura 16). Vale la pena indicar que, dada una sustancia, δ sólo depende de la velocidad de la partícula cargada o, equivalentemente, del factor relativista γ .

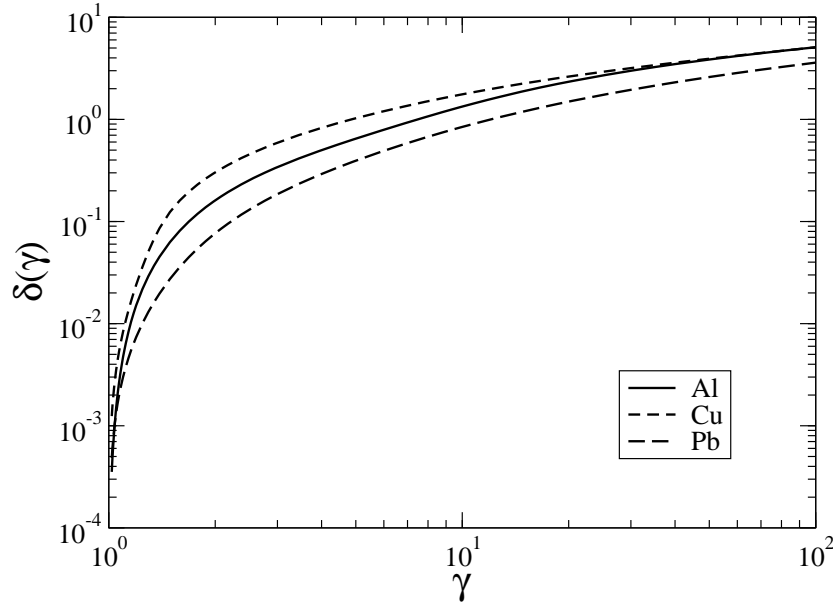


Figura 16: Efecto de densidad de Al, Cu y Pb [32].

El término $Z_1 L_1$ se conoce como *corrección de Barkas*, y origina diferencias en el poder de frenado de partículas de carga opuesta (como por ejemplo un protón y un antiprotón). Este fenómeno fue observado por Barkas y colaboradores en los años cincuenta. Varios autores han evaluado $Z_1 L_1$ teóricamente, aunque los valores de Ashley, Ritchie y Brandt son los más usados [33].

El término $Z_1^2 L_2$ resulta de una extensión de la fórmula de Bethe debida a Bloch, por lo que se le denomina *corrección de Bloch*. Incorpora, de modo aproximado, la perturbación de las funciones de onda de los electrones atómicos causada por el proyectil incidente. Este término puede ser escrito en la forma [32]

$$Z_1^2 L_2 = -y^2 \sum_{n=1}^{\infty} [n(n^2 + y^2)]^{-1} \quad (113)$$

con $y \equiv Z_1 v_0 / v = Z_1 \alpha / \beta$ ($v_0 = e^2 / \hbar$ es la velocidad de Bohr). $Z_1^2 L_2 \approx 0$ si $y \ll 1$, mientras que para $y \gg 1$ es

$$Z_1^2 L_2 \approx -c_E - \ln y, \quad (114)$$

donde $c_E = 0.577216\dots$ es la constante de Euler. Si sumamos este valor asintótico al límite no relativista de la ecuación (112) (con $C/Z_2 = 0$ y $\delta = 0$) recuperamos la expresión clásica de Bohr para el poder de frenado, ecuación (104) [32].

Poder de frenado de iones vestidos

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

a Northcliffe,

$$\langle Q \rangle = Z_1 \left[1 - \exp \left(- \frac{v}{v_0 Z_1^{2/3}} \right) \right]. \quad (115)$$

En la figura 17 se encuentran representados los estados de carga promedio de varios iones ligeros en función de su velocidad, calculados con la ecuación (115). Puede observarse que $\langle Q \rangle \rightarrow 0$ cuando $v \rightarrow 0$, mientras que $\langle Q \rangle \rightarrow Z_1$ si $v \gg v_0 Z_1^{2/3}$.

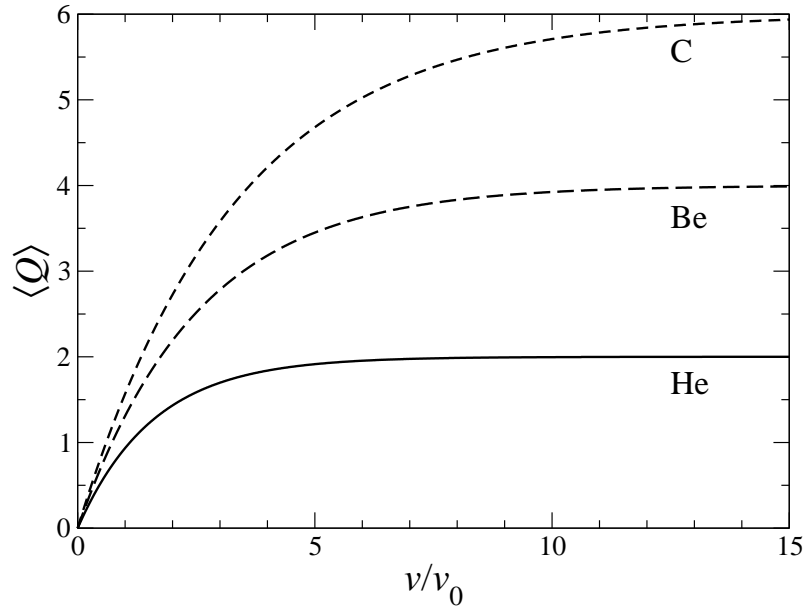


Figura 17: Estado de carga promedio de iones de He, Be y C en función de su velocidad, calculado con la ecuación (115).

Para tener en cuenta este fenómeno, en la fórmula de Bethe–Bloch, ecuación (109), se suele reemplazar Z_1 por una *carga efectiva* $Z_1^*(v) \leq Z_1$ que reduce el poder de frenado electrónico. Tomar $Z_1^*(v) = \langle Q \rangle$ es una buena aproximación, siempre y cuando Z_1 no sea demasiado grande.

ICRU ha publicado tablas con valores recomendados de S_{col}/ρ para protones y partículas α [33]; estos valores pueden generarse fácilmente empleando los programas PSTAR y ASTAR [34], respectivamente. A modo de ejemplo, la figura 18 muestra los poderes de frenado máxicos electrónicos de protones y partículas α en Al, Cu y Pb. Recientemente ICRU también ha proporcionado tablas de S_{col}/ρ para iones comprendidos entre el Li y el Ar [35].

Poder de frenado por colisión de electrones y positrones

Por otra parte, el poder de frenado por colisión de electrones y positrones relativistas está dado por [32]

$$S_{\text{col}} = \mathcal{N} Z_2 \frac{2\pi e^4}{m_e c^2 \beta^2} \left\{ \ln \left(\frac{E^2}{I^2} \frac{\gamma + 1}{2} \right) + f^{(\pm)}(\gamma) - \delta \right\} \quad (116)$$

con

$$f^{(-)}(\gamma) = \gamma^{-2} \left[1 - (2\gamma - 1) \ln 2 + \frac{1}{8} (\gamma - 1)^2 \right] \quad (117)$$

y

$$f^{(+)}(\gamma) = 2 \ln 2 - \frac{1 - \gamma^{-2}}{12} \left[23 + \frac{14}{\gamma + 1} + \frac{10}{(\gamma + 1)^2} + \frac{4}{(\gamma + 1)^3} \right]. \quad (118)$$

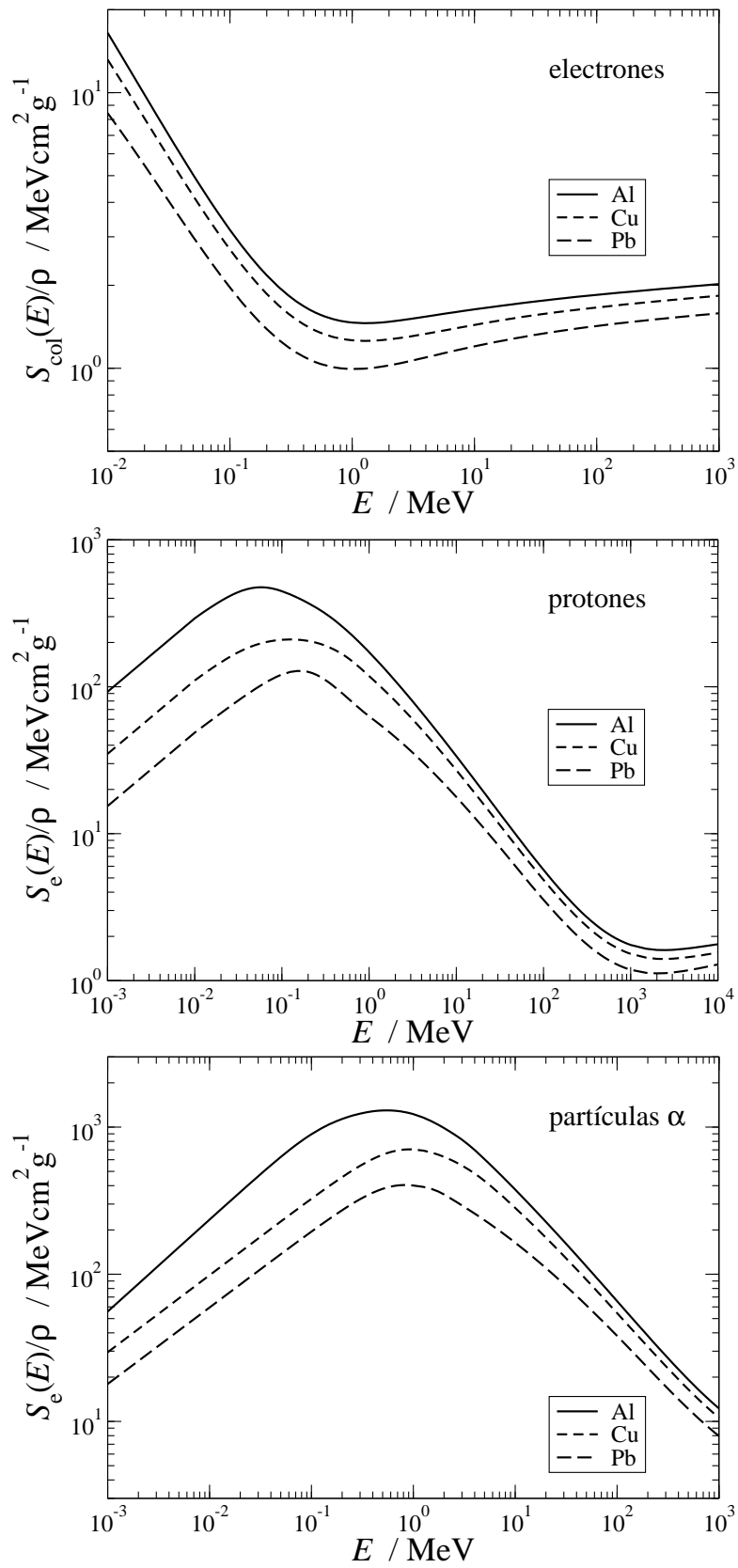


Figura 18: Poder de frenado másico por colisión de electrones, protones y partículas α en Al, Cu y Pb [32, 33].

ICRU ha publicado tabulaciones extensas con valores recomendados de S_{col}/ρ para numerosos materiales [32]. La figura 18 muestra los poderes de frenado másicos por colisión de electrones en Al, Cu y Pb. Los valores de S_{col}/ρ han sido obtenidos empleando el programa ESTAR [34].

Regla de Bragg–Kleeman

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

$$\frac{S_{\text{col}}}{\rho} = \sum_j w_j \left(\frac{S_{\text{col}}}{\rho} \right)_j, \quad (119)$$

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

$$\langle Z/A \rangle = \sum_j w_j (Z_j/A_j) \quad (120)$$

y

$$\langle Z/A \rangle \ln I = \sum_j w_j (Z_j/A_j) \ln I_j. \quad (121)$$

Esta manera de estimar el valor de I se conoce como *regla de Bragg–Kleeman* [32] y, al igual que en el caso de la aditividad de coeficientes de atenuación másicos, no tiene en cuenta los efectos de agregación del medio.

Otros modelos para describir el poder de frenado de colisión

La pérdida de energía de partículas cargadas al atravesar medios materiales ha suscitado un interés continuado desde hace más de cien años. Además de los modelos esbozados en esta sección, en la literatura especializada se han propuesto numerosos formalismos que permiten comprender mejor diversos aspectos del frenado de iones, así como predecir la variación de S_{col} con las propiedades del medio atravesado y el tipo de proyectil y su energía. Mención especial merecen los modelos basados en el denominado formalismo dieléctrico, que evalúan S_{col} a partir de la función de pérdida de energía del medio, $\text{Im}(-1/\epsilon)$, siendo $\epsilon(k, \omega)$ la constante dieléctrica del mismo [36].

3.6.2 El poder de frenado de radiación

Por otra parte, a energías elevadas la emisión de radiación de frenado acaba siendo responsable de la mayor parte de pérdidas de energía de electrones y positrones. El programa ESTAR [34] permite generar tablas con los poderes de frenado másicos radiativos de estas partículas que son idénticas a la publicadas por ICRU [32]. En la figura 19 podemos ver los valores para electrones en Al, Cu y Pb. Obsérvese que $S_{\text{rad}} \propto E$ para energías por encima de unos pocos MeV.

La energía cinética E_c para la cual $S_{\text{rad}} = S_{\text{col}}$ se denomina a veces *energía crítica*. E_c decrece desde ~ 100 MeV hasta ~ 10 MeV conforme aumenta el número atómico del material.

3.6.3 Alcance

En la aproximación de frenado continuo (CSDA en sus siglas en inglés) se asume que las partículas cargadas pierden energía de una forma gradual, a un ritmo dictado por el poder de frenado. La distancia que recorren desde que poseen una cierta energía cinética hasta quedar en reposo se

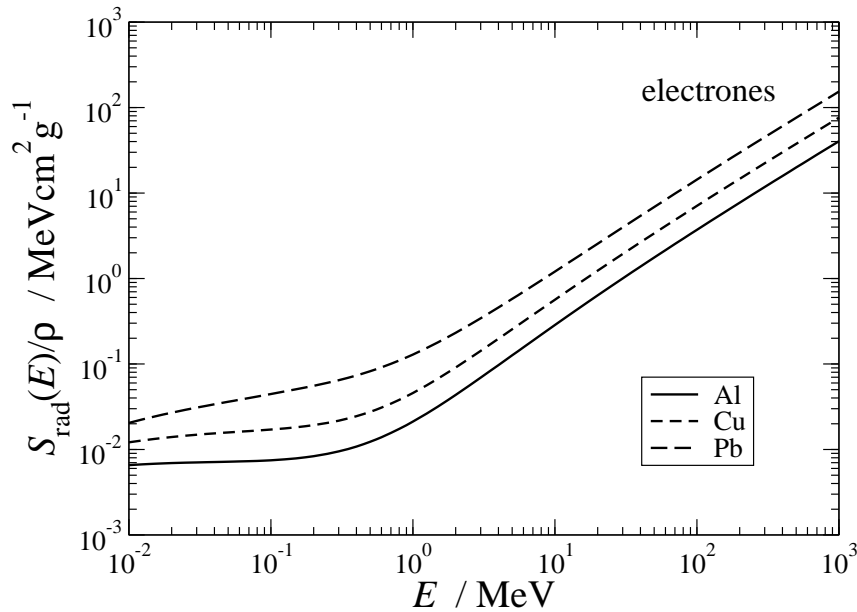


Figura 19: Poder de frenado másico por radiación de electrones en Al, Cu y Pb [32].

denomina *alcance CSDA* y será igual para todas ellas (pues se ha despreciado el carácter estocástico de las colisiones inelásticas). El alcance se calcula mediante la expresión

$$r_0(E) = \int_0^{r_0} ds' = \int_E^0 \frac{dE'}{dE'/ds'} = \int_0^E \frac{dE'}{-dE'/ds'} = \int_0^E \frac{dE'}{S(E')}, \quad (122)$$

donde S es el poder de frenado total, incluyendo las contribuciones de colisión y radiativa (esta última sólo en el caso de electrones y positrones). En la figura 20 tenemos representado el alcance másico ρr_0 de electrones, protones y partículas α en Al, Cu y Pb [32, 33].

3.6.4 Rendimiento radiativo de electrones y positrones

El *rendimiento radiativo* es la fracción de la energía inicial E de un electrón (o positrón) que es convertida en bremsstrahlung durante su frenado [32]. En la aproximación de frenado continuo está dado por

$$Y(E) = \frac{1}{E} \int_0^E \frac{S_{\text{rad}}(E')}{S_{\text{col}}(E') + S_{\text{rad}}(E')} dE'. \quad (123)$$

Tablas con los rendimientos radiativos de todos los elementos pueden encontrarse en la referencia [32]; los mismos valores pueden generarse con el programa ESTAR [34]. En la figura 21 se observa que $Y(E)$ de electrones varía entre 0 y valores cercanos a 1, aumentando con la energía, y siendo mayores para los materiales de número atómico elevado. Esto último es debido a que aproximadamente $S_{\text{col}} \propto Z^2$, mientras que $S_{\text{rad}} \propto Z^2$.

4 Radiación fluorescente

La ionización de capas atómicas internas puede producirse por interacciones de fotones (efecto fotoeléctrico o Compton) o por impacto de partículas cargadas⁶. Tras la ionización tiene lugar la *relajación atómica*, es decir, el exceso de energía del ión excitado residual se emite isotrópamente en forma de *radiación fluorescente*. Ésta comprende los rayos x característicos y los electrones Auger.

⁶Los procesos nucleares de conversión interna y captura electrónica también originan vacantes en capas atómicas internas.

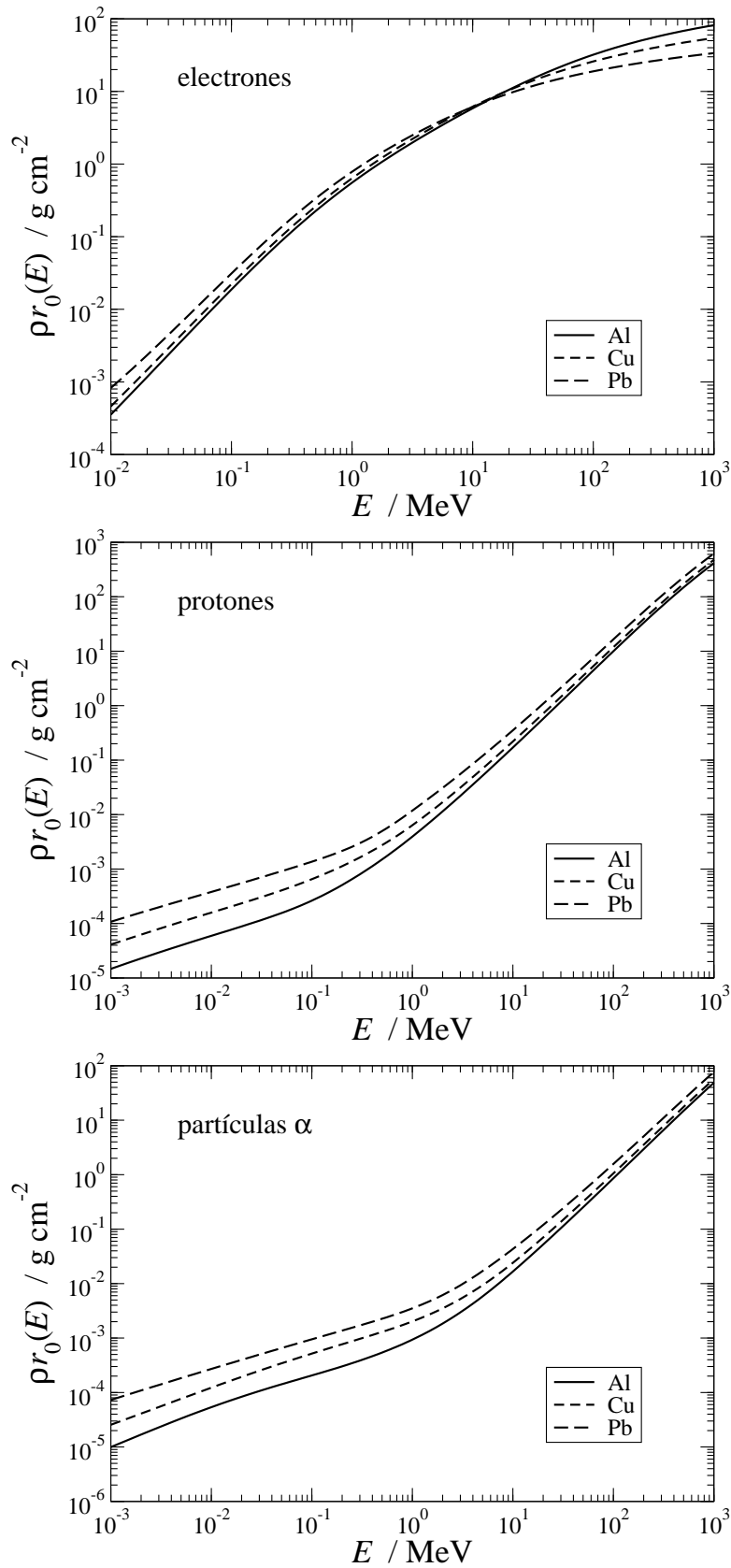


Figura 20: Alcance másico (en la aproximación de frenado continuo) de electrones, protones y partículas α en Al, Cu y Pb [32, 33].

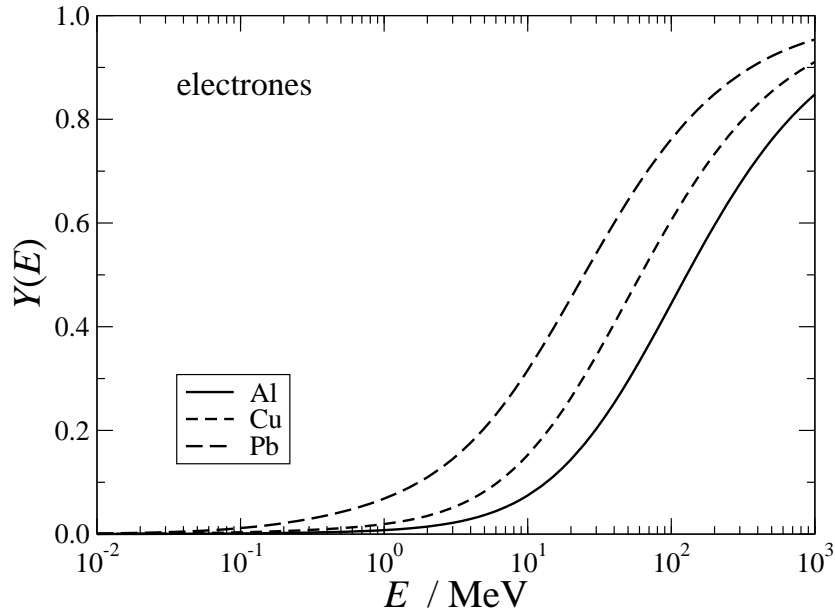


Figura 21: Rendimiento radiativo de electrones en Al, Cu y Pb en función de la energía [32].

4.1 Rayos x característicos

Si la vacante en la capa atómica interna se “llena” con un electrón proveniente de capas menos ligadas y la diferencia de energías se emite en forma de un fotón (rayo x característico), la transición se denomina radiativa. Las transiciones que respetan las reglas de selección $\Delta\ell = \pm 1$, $\Delta j = 0, \pm 1$ están “permitidas” (a primer orden de teoría de perturbaciones) y son muy probables; de lo contrario están fuertemente inhibidas (son “prohibidas”) [5]. La energía del fotón vendrá dada aproximadamente por $E_x \approx U_X - U_Y$, donde X es la (sub)capa donde se produjo la vacante e Y la (sub)capa de la que proviene el electrón que realiza la transición, respectivamente. La referencia [37] contiene una tabulación exhaustiva de las energías de los rayos x característicos de numerosas transiciones radiativas.

Las notaciones clásica (de Siegbahn) y moderna (IUPAC) [38] de los rayos x característicos se indican en la figura 22 para las principales líneas K y L.

La probabilidad ω_i de que tras producirse una vacante en la capa i -ésima el átomo emita un rayo x característico se denomina *rendimiento de fluorescencia*; $\omega_i(Z)$ es una función creciente [39].

4.2 Electrones Auger

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

La figura 24 muestra las probabilidades de las transiciones no radiativas (KYZ) y radiativas (KY) que ocurren tras producirse una vacante en la capa K, i.e. a_K y ω_K , respectivamente. Como puede verse, la emisión de electrones Auger predomina para números atómicos bajos, mientras que para valores de Z intermedios o grandes es más probable la emisión de rayos x característicos, sobre todo $K\alpha_1$. Las probabilidades han sido extraídas de la base de datos EADL [40].

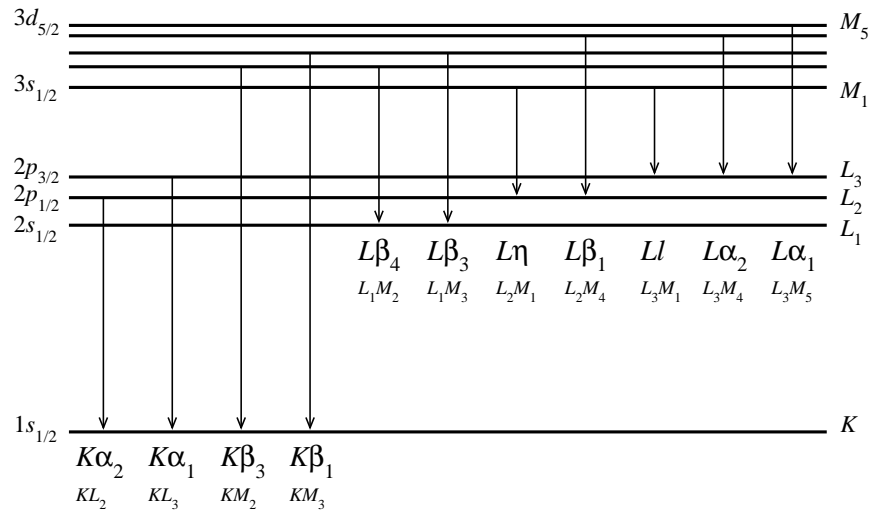


Figura 22: Notaciones de Siegbahn e IUPAC de los rayos x característicos de las líneas K y L más importantes [38].

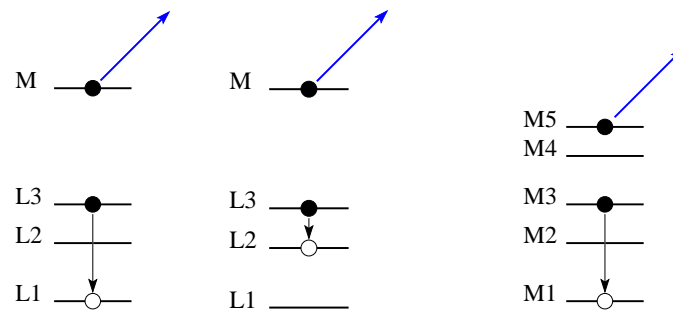


Figura 23: Ejemplos de transiciones Coster–Kronig L_1L_3M , L_2L_3M y super Coster–Kronig $M_1M_3M_5$.

5 Interacción de los neutrones con la materia

Al igual que el fotón, el neutrón carece de carga eléctrica, y por lo tanto no experimenta interacciones coulombianas con los núcleos y electrones del medio atravesado⁷. Su principal forma de interacción es mediante la fuerza fuerte con los núcleos. Como la fuerza fuerte es de muy corto alcance y los núcleos ocupan un volumen minúsculo en comparación con el tamaño atómico, no es de extrañar que los neutrones sean partículas muy penetrantes. Se les considera, junto con los fotones, radiación indirectamente ionizante. Por otro lado el neutrón posee una masa en reposo similar a la del protón, y es una partícula inestable, con un período de unos 10.6 min.

Los neutrones pueden experimentar diversos procesos nucleares, principalmente dispersiones elásticas y reacciones de absorción. Debido a la considerable dependencia con la energía de tales interacciones, es habitual clasificar a los neutrones atendiendo a su energía cinética (véase la tabla 1).

Análogamente al caso de los fotones, un haz de neutrones monoenergéticos bien colimado se atenúa siguiendo la denominada ley de atenuación exponencial. El coeficiente de atenuación másico también se define mediante la ecuación (67), aunque ahora σ_i son las secciones eficaces de los distintos mecanismos de interacción de los neutrones.

⁷Despreciamos la interacción magnética entre el espín del neutrón y los espines de los electrones y núcleos.

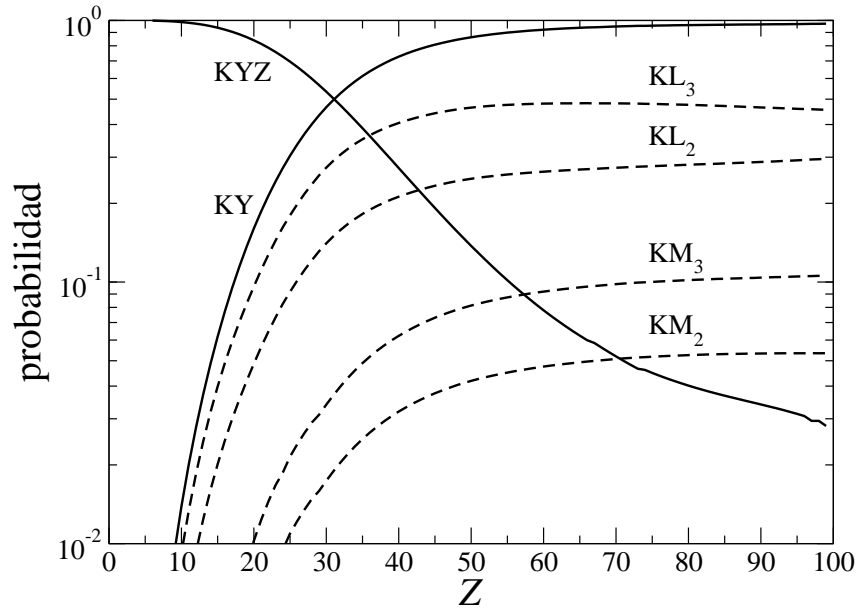


Figura 24: Las curvas continuas representan las probabilidades de las transiciones no radiativas (KYZ) y radiativas (KY) consecuencia de una vacante en la capa K, mientras que las curvas a trazos indican las transiciones radiativas más probables (KL₂, KL₃, KM₂ y KM₃) [40].

Tabla 1: Denominación de los neutrones [41].

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

5.1 Dispersión elástica

Consideremos una colisión elástica entre un neutrón con energía cinética E_0 y un núcleo blanco de número másico A inicialmente en reposo. Como la colisión es elástica, el neutrón cambia de dirección sin modificar el estado cuántico del núcleo blanco. Aunque se conserva la energía cinética en el sistema de referencia del centro de masas, la energía final E del proyectil es menor que E_0 (tanto E_0 como E están referidas al sistema de referencia del laboratorio). De hecho las colisiones elásticas son las principales responsables del frenado de los neutrones rápidos, proceso que se suele denominar *moderación*. Empleando las leyes de conservación de momento lineal y energía cinética es fácil ver que [41, 28]

$$\frac{E}{E_0} = \frac{A^2 + 1 + 2A \cos \theta_{\text{cm}}}{(A + 1)^2}, \quad (124)$$

donde θ_{cm} es el ángulo de dispersión del neutrón en el sistema de referencia del centro de masas; en esta sección las masas se expresan en unidades de la masa del neutrón.

Cuando no hay dispersión ($\theta_{\text{cm}} = 0^\circ$) tenemos que $(E/E_0)_{\text{max}} = 1$, como debe ser. La mayor pérdida de energía ocurre en colisiones frontales ($\theta_{\text{cm}} = 180^\circ$), con lo que

$$\left(\frac{E}{E_0}\right)_{\text{min}} = \left(\frac{A - 1}{A + 1}\right)^2 \equiv \alpha. \quad (125)$$

En consecuencia los valores permitidos de E/E_0 en una colisión están comprendidos en el intervalo

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

En el caso de neutrones con energías de unos 10 MeV e inferiores, la sección eficaz diferencial elástica en el sistema de referencia del centro de masas es prácticamente isotrópica. Entonces la probabilidad dp_1 de dispersión hacia el ángulo sólido $d\Omega_{\text{cm}}$ es simplemente

$$dp_1 = \frac{d\Omega_{\text{cm}}}{4\pi} = \frac{2\pi \sin \theta_{\text{cm}} d\theta_{\text{cm}}}{4\pi} = \frac{1}{2} \sin \theta_{\text{cm}} d\theta_{\text{cm}}. \quad (126)$$

Derivando la ecuación (124) vemos que

$$\frac{dE}{E_0} = \frac{2A}{(A+1)^2} \sin \theta_{\text{cm}} d\theta_{\text{cm}}. \quad (127)$$

Combinando las ecuaciones (126) y (127) obtenemos

$$p_1(E) \equiv \frac{dp_1}{dE} = \frac{(A+1)^2}{4A} \frac{1}{E_0} = \frac{1}{(1-\alpha)E_0}, \quad (128)$$

luego los valores de E en una colisión están uniformemente distribuidos en el intervalo $(\alpha E_0, E_0)$. Este resultado puede ser utilizado para evaluar, de forma iterativa, la distribución de energía $p_n(E)$ después de $n \geq 2$ colisiones; las expresiones analíticas para $n = 2$ y 3 pueden encontrarse en la referencia [28]. Después de n colisiones los valores de E están comprendidos en el intervalo $(\alpha^n E_0, E_0)$.

En la figura 25 se han representado las distribuciones $p_n(E)$ de neutrones cuya energía inicial es de 1 MeV tras experimentar un número creciente de colisiones elásticas con núcleos de ^2H y ^{12}C .

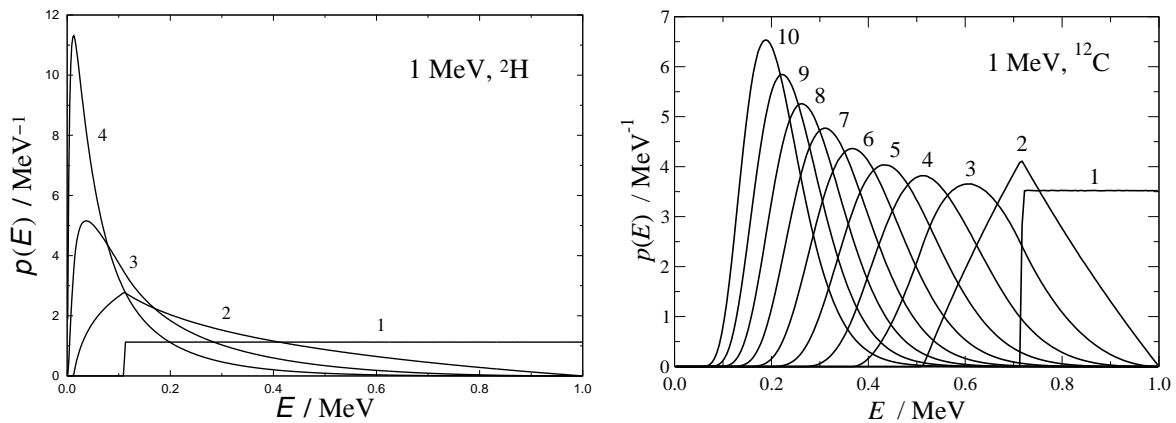


Figura 25: Distribuciones de energía de neutrones después de 1, 2, ... colisiones elásticas con núcleos de ^2H ($\alpha = 0.111$) y ^{12}C ($\alpha = 0.716$). La energía inicial es $E_0 = 1$ MeV.

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

$$\begin{aligned} \xi \equiv \langle \ln(E_0/E) \rangle &= \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{\text{cm}} \ln \left[\frac{(A+1)^2}{A^2 + 1 + 2A \cos \theta_{\text{cm}}} \right] \\ &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos \theta_{\text{cm}}) \ln \left[\frac{(A+1)^2}{A^2 + 1 + 2A \cos \theta_{\text{cm}}} \right]. \end{aligned} \quad (129)$$

El resultado de esta integral es

$$\xi = 1 + \frac{(A-1)^2}{2A} \ln\left(\frac{A-1}{A+1}\right) = 1 + \frac{\alpha \ln \alpha}{1-\alpha}, \quad (130)$$

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

$$\ln E = \ln E_0 - \bar{n}\xi, \quad (131)$$

de donde obtenemos

$$\bar{n} = \xi^{-1} \ln(E_0/E). \quad (132)$$

5.2 Dispersión inelástica. Reacciones nucleares

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

Los neutrones también pueden interactuar con los núcleos mediante un amplio abanico de reacciones nucleares. Los procesos con mayor probabilidad son las reacciones de tipo (n, p) , (n, α) , (n, d) , etc, en las que el neutrón incidente arranca del núcleo blanco uno o más nucleones. Además son posibles reacciones (n, γ) , denominadas *captura radiativa*. Las secciones eficaces de estos procesos son en general proporcionales a v^{-1} , lo cual favorece tales mecanismos en el caso de neutrones con velocidad pequeña. A este comportamiento suave se le superpone un número variable de *resonancias*, intervalos de energía estrechos en los que la sección eficaz pasa por un máximo pronunciado. Estos picos están relacionados con la gran estabilidad del núcleo compuesto que se forma al ser absorbido el neutrón. Como ejemplos de interés en física médica podemos mencionar las reacciones $^{14}\text{N}(n, p)^{14}\text{C}$ y $^1\text{H}(n, \gamma)^2\text{H}$.

Por último, la *fisión nuclear* inducida por neutrones es viable para nucleidos con A muy elevado.

Agradecimientos

Quiero expresar mi agradecimiento a Francesc Salvat, David Liljequist, Rafael Garcia-Molina, Isabel Abril y Santiago Heredia-Avalos por lo mucho que he aprendido de ellos sobre este apasionante tema. También deseo dar las gracias a Gloria González-Muñoz, David Bote y Antonio Brosed por sus comentarios a este texto.

A Unidades atómicas

Las unidades atómicas se definen tomando

$$e = m_e = \hbar = 1 \quad (\text{adimensionales}). \quad (133)$$

Algunas unidades son [4]:

i) Longitud: Radio de Bohr $a_0 \equiv \hbar^2/m_e e^2 \approx 0.529\,177\,210\,67 \text{ \AA}$.

ii) Velocidad: Velocidad de Bohr $v_0 \equiv e^2/\hbar = \alpha c \approx 2.187\,691\,262\,77 \times 10^8 \text{ cm/s}$, donde $\alpha \equiv e^2/\hbar c \approx 1/137.035\,999\,139$ es la constante de estructura fina de Sommerfeld.

iii) Energía: Energía de Hartree $E_h \equiv m_e e^4/\hbar^2 = \alpha^2 m_e c^2 \approx 27.211\,386\,02 \text{ eV}$. Obsérvese que, en ocasiones, se utiliza la energía de Rydberg Ry en vez de la energía de Hartree, especialmente en la bibliografía más antigua; la relación entre ambas unidades es $Ry \equiv m_e e^4/2\hbar^2 = E_h/2 \approx 13.6 \text{ eV}$.

Referencias

- [1] E.B. Podgorsak, *Radiation Physics for Medical Physicists* (Springer, Berlin, 2010) 2nd edition.
- [2] J.E. Turner, *Atoms, Radiation, and Radiation Protection* (Wiley-VCH, Darmstadt, 2007) 3rd edition.
- [3] C. Leroy and P.-G. Rancoita, *Principles of Radiation Interaction in Matter and Detection* (World Scientific, Singapore, 2009) 2nd edition.
- [4] P.J. Mohr, D.B. Newell and B.N. Taylor, *Rev. Mod. Phys.* **88** (2016) 035009.
<http://physics.nist.gov/constants/>
- [5] B.H. Bransden and C.J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules* (Longman, 2003) 2nd edition.
- [6] F. Salvat, J.M. Fernández-Varea and W. Williamson Jr., *Comput. Phys. Commun.* **90** (1995) 151.
- [7] H. Friedrich, *Theoretical Atomic Physics* (Springer, Berlin, 2006) 3rd edition.
- [8] F. Salvat and J.M. Fernández-Varea, *Metrologia* **46** (2009) S112.
- [9] X-Ray Data Booklet. <http://xdb.lbl.gov/>
- [10] J.H. Hubbell, H.A. Gimm and I. Øverbø, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **9** (1980) 1023.
- [11] J.J. Yeh and I. Lindau, *At. Data Nucl. Data Tables* **32** (1985) 1.
- [12] D.E. Cullen, J.H. Hubbell and L. Kissel, *EPDL97 The evaluated data library, '97 version*, Report UCRL-50400 vol. 6, rev. 5 (Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, 1997).
- [13] M.J. Berger and J.H. Hubbell, *XCOM: Photon Cross Sections on a Personal Computer*. National Bureau of Standards Internal Report NBSIR 87-3597 (1987).
M.J. Berger, J.H. Hubbell, S.M. Seltzer, J.S. Coursey and D.S. Zucker, program XCOM:
<http://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/Text/XCOM.html>
- [14] L. Sabbatucci and F. Salvat, *Radiat. Phys. Chem.* **121** (2016) 122.
- [15] J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (Wiley, New York, 1999) 3rd edition.
- [16] J.H. Hubbell, Wm.J. Veigele, E.A. Briggs, R.T. Brown, D.T. Cromer and R.J. Howerton, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **4** (1975) 471. Erratum: *ibid.* **6** (1977) 615.
- [17] J. Baró, M. Roteta, J.M. Fernández-Varea and F. Salvat, *Radiat. Phys. Chem.* **44** (1994) 531.
- [18] FFAST tabulation: <http://physics.nist.gov/PhysRefData/FFast/Text/cover.html>
- [19] L. Kissel, *Radiat. Phys. Chem.* **59** (2000) 185.
<http://www-phys.llnl.gov/Research/scattering/RTAB.html>
- [20] P.M. Bergstrom Jr. and R.H. Pratt, *Radiat. Phys. Chem.* **50** (1997) 3.
- [21] N. Gauthier, *Eur. J. Phys.* **21** (2000) L17.
- [22] ICRU, *Elastic Scattering of Electrons and Positrons*, ICRU Report 77 (ICRU, Bethesda, MD, 2007).
- [23] M. Inokuti, *Rev. Mod. Phys.* **43** (1971) 297.

- [24] D. Bote, F. Salvat, A. Jablonski and C.J. Powell, *At. Data Nucl. Data Tables* **95** (2009) 871. Erratum: *ibid.* **97** (2011) 186.
- [25] S.M. Seltzer and M.J. Berger, *At. Data Nucl. Data Tables* **35** (1986) 345.
- [26] L. Kissel, C.A. Quarles and R.H. Pratt, *At. Data Nucl. Data Tables* **28** (1983) 381.
- [27] F. Salvat, J.M. Fernández-Varea, J. Sempau and X. Llovet, *Radiat. Phys. Chem.* **75** (2006) 1201.
- [28] W.R. Leo, *Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments* (Springer, Berlin, 1994) 2nd edition.
- [29] ICRU, *Radiation Dosimetry: Electron Beams with Energies between 1 and 50 MeV*, ICRU Report 35 (ICRU, Bethesda, MD, 1984).
- [30] J.M. Fernández-Varea, R. Mayol, J. Baró and F. Salvat, *Nucl. Instrum. Meth. B* **73** (1993) 447.
- [31] J.F. Ziegler, *J. Appl. Phys.* **85** (1999) 1249.
- [32] ICRU, *Stopping Powers for Electrons and Positrons*, ICRU Report 37 (ICRU, Bethesda, MD, 1984).
- [33] ICRU, *Stopping Powers and Ranges for Protons and Alpha Particles*, ICRU Report 49 (ICRU, Bethesda, MD, 1993).
- [34] M.J. Berger, J.S. Coursey and M.A. Zucker, programs ESTAR, PSTAR and ASTAR: <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/contents.html>
- [35] ICRU, *Stopping of Ions Heavier Than Helium*, ICRU Report 73 (ICRU, Bethesda, MD, 2005).
- [36] I. Abril, R. Garcia-Molina, C.D. Denton, F.J. Pérez-Pérez and N.R. Arista, *Phys. Rev. A* **58** (1998) 357.
- [37] R.D. Deslattes, E.G. Kessler Jr., P. Indelicato, L. de Billy, E. Lindroth and J. Anton, *Rev. Mod. Phys.* **75** (2003) 35.
- [38] R. Jenkins, R. Manne, R. Robin and C. Senemaud, *X-Ray Spectrom.* **20** (1991) 149.
- [39] M.O. Krause, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **8** (1979) 307.
- [40] S.T. Perkins, D.E. Cullen, M.H. Chen, J.H. Hubbell, J. Rathkopf and J. Scofield, *Tables and graphs of atomic subshell and relaxation data derived from the LLNL evaluated atomic data library (EADL), Z = 1–100* Report UCRL-50400, vol. 30 (LLNL, Livermore, CA, 1991).
- [41] K.S. Krane, *Introductory Nuclear Physics* (Wiley, New York, 1988).