

2014

Transporte de rayos Gamma a través de un medio material

LANDER COMBARRO EXPÓSITO
MÉTODOS COMPUTACIONALES
10/06/2014

ÍNDICE

-	Objetivos	Pág. 2
-	Introducción y base teórica	Pág. 2
○	Compton	Pág. 4
○	Klein-Nishina	Pág. 4
○	Efecto fotoeléctrico	Pág. 5
-	Ingredientes de la simulación	Pág. 5
-	Algoritmo	Pág. 7
-	Conclusión	Pág. 9

OBJETIVOS

La interacción radiación-materia, es un tema muy estudiado en la física, y se rige por una serie de leyes bien establecidas. En este caso particular trabajaremos con rayos gamma, con objeto de poder estudiar unos coeficientes que denominaremos de absorción, retrodispersión y transmisión. En el siguiente apartado los definiremos más detalladamente.

INTRODUCCIÓN Y BASE TEÓRICA

La radiación gamma o rayos gamma (γ) es un tipo de radiación electromagnética, y por tanto constituida por fotones, producida generalmente por elementos radiactivos o por procesos subatómicos como la aniquilación de un par positrón-electrón. También se genera en fenómenos astrofísicos de gran violencia.

Debido a las altas energías que poseen, los rayos gamma constituyen un tipo de radiación ionizante capaz de penetrar en la materia más profundamente que la radiación alfa y la beta. Pueden causar grave daño al núcleo de las células, por lo cual se usan para esterilizar equipos médicos y alimentos.

Los principales procesos físicos asociados al transporte de rayos gamma a través de la materia son la dispersión incoherente (efecto Compton), el efecto fotoeléctrico y la creación de pares; sin embargo, la importancia y /o probabilidad de suceso de cada uno de estos procesos, está muy relacionada con la energía del fotón incidente, así como del número atómico Z del medio material.

La siguiente gráfica refleja esa relación:

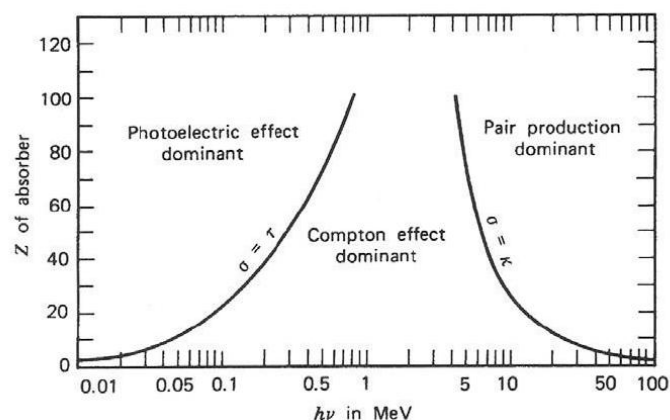


Fig. 1

La figura adjunta muestra las curvas donde dos de los procesos son equiprobables. En general el efecto fotoeléctrico domina a energías bajas, el Compton a energías intermedias, y la creación de pares a energías altas. La región predominante de Compton se estrecha al aumentar Z .

En esta simulación se trabajará en el rango de energías de 1.1 MeV, donde la dispersión inelástica (incoherent scattering) con un átomo es dominante, y el efecto fotoeléctrico sólo será tenido en cuenta cuando el fotón de estudio descienda por un determinado umbral de energía, dependiente de Z, momento en el cual se considera que este ha sido absorbido por el átomo. En ambos procesos, la energía es transferida a un electrón atómico, pero estos son detenidos a distancias muy cortas en comparación con el recorrido libre medio de los rayos gamma, por lo que no son de transcendencia en nuestra simulación.

SCATTERING COMPTON

Es el proceso por el cual un fotón cambia de dirección y energía al interaccionar con un electrón atómico que se lleva parte de la energía del fotón.

Si consideramos al electrón como libre y en reposo (una buena aproximación dado que la energía del fotón es normalmente mucho mayor que las bajas energías de ligadura de los electrones de las capas externas), entonces la conservación del momento lineal y la energía (usando dinámica relativista) nos da la siguiente fórmula para la nueva energía del fotón:

$$E = \frac{E_0}{1 + \gamma(1 - \cos \theta)} \quad (1)$$

Donde el parámetro γ es la energía incidente en unidades de la masa del electrón:

$$\gamma = \frac{E_0}{m_e c^2} \quad (2)$$

La siguiente figura explica gráficamente la trayectoria que sigue el fotón tras su choque con el electrón.

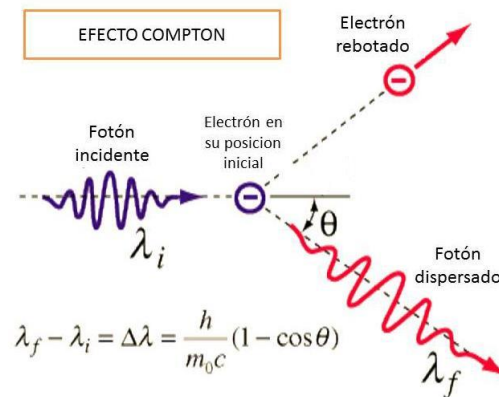


Fig. 2

La Fig. 2 no tiene en cuenta el ángulo acimutal ϕ con el que se dispersa el fotón, pero nosotros sí que lo haremos, pues el problema se estudia en tres dimensiones.

KLEIN-NISHINA

La distribución de probabilidad de θ (ángulo polar con que "salen" los fotones dispersados), viene dada por la fórmula de la sección eficaz diferencial de Klein-Nishina

$$\frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \frac{1}{[1+\gamma(1-\cos\theta)]^2} \left[1 + (\cos\theta)^2 + \frac{\gamma^2(1-\cos\theta)^2}{1+\gamma(1-\cos\theta)} \right] \quad (3)$$

Que integrada a todo el ángulo sólido Ω da una sección eficaz total:

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

Si despreciamos la energía de enlace de los electrones atómicos, la sección eficaz para la dispersión incoherente para un átomo vendrá dada por:

$$\sigma = Z\sigma_{KN} \quad (5)$$

EFFECTO FOTOELÉCTRICO

Un riguroso tratamiento del efecto fotoeléctrico requeriría el cálculo una sección eficaz σ_{PE} , que no puede ser expresada por una simple fórmula analítica.

Debido a la complejidad de esto, como aproximación en nuestra simulación, consideraremos que para una energía relativamente pequeña, es decir, una energía umbral, asignada en función de la Fig. 1, aceptaremos que el fotón ha sido absorbido por un átomo. Ésta es la tabla que usa la simulación.

Z	1-20	21-30	31-40	41-50	51-60	61-70	71-80	81-90
E_{umbral} (MeV)	0.06	0.15	0.2	0.25	0.3	0.5	0.6	0.7

INGREDIENTES DE LA SIMULACIÓN

El método más eficiente de predecir los efectos que queremos estudiar es mediante la simulación de Monte Carlo, debido a los rápido cómputos que permite el ordenador.

La probabilidad de que un fotón recorra una distancia s en línea recta, antes de que interactúe con un átomo, y lo haga en el próximo ds es:

$$P(s) = e^{-n\sigma s} \quad (6)$$

Donde n es la densidad de electrones, es decir, el número de centros dispersores por unidad de volumen, y viene dado por:

$$n = \frac{\rho N_A Z}{M_a} \quad (7)$$

Siendo las variables:

Densidad ρ en g/cm^3

El número atómico Z

Masa molecular M_a en gr/mol

Y el número de Avogadro $N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

El recorrido libre medio es pues la media de s :

$$\lambda = \frac{\int_0^\infty s e^{-n\sigma s} ds}{\int_0^\infty e^{-n\sigma s} ds} = \frac{1}{n\sigma} \quad (8)$$

La densidad de probabilidad viene dada por:

$$P(s)ds = \frac{1}{\lambda} e^{-s/\lambda} ds \quad (9)$$

Y por tanto la distribución de probabilidad:

$$F(s) = \frac{1}{\lambda} \int_0^\infty e^{-s/\lambda} ds = 1 - e^{-s/\lambda} \quad (10)$$

Para generar número aleatorios según $P(s)$, igualamos $F(s)$ al número aleatorio uniforme r :

$$r = 1 - e^{-s/\lambda} \quad s = -\lambda \ln(1 - r) \quad (11)$$

Pero si r es un número aleatorio uniforme entre 0 y 1, $1-r$ también lo es, así que podemos expresarlo de forma equivalente:

$$s = -\lambda \ln(r) = -\frac{\ln(r)}{n\sigma} \quad (12)$$

Como se ha comentado previamente, tras la dispersión Compton, con probabilidades proporcionales a la sección eficaz, ecuaciones (3) y (4), el fotón es dispersado los ángulos polar θ , y acimutal ϕ , expresados en coordenadas esféricas, en su sistema de referencia.

El ángulo ϕ es fácil de generar, pues sigue una distribución de probabilidad uniforme entre 0 y 2π , y podrá generarse sin más que:

$$\phi = 2\pi r \quad (13)$$

Sin embargo θ sigue la siguiente distribución de probabilidad:

$$p(\theta)d\theta = \frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} 2\pi \sin \theta d\theta \quad (14)$$

Debida a la complicada forma de esta ecuación sólo podemos aplicar el método de aceptación-rechazo. Definimos unos valores inferior y superior, p_i y p_s , respectivamente, para $p(\theta)$. También unos valores inferior y superior, θ_i y θ_s , para θ . Dos variables random r_x y r_y son generadas con probabilidad uniforme en el rectángulo que forman $\theta_i \leq r_x \leq \theta_s$ y $p_i \leq r_y \leq p_s$. Si $r_y < p(r_x)$ el valor $\theta=r_x$ es aceptado. Si no es así el valor será descartado. Este proceso es menos eficiente pero es el único con el que se puede trabajar.

Para cada dispersión sufrida por el fotón hemos calculado los ángulos θ y ϕ que éste se desvía. Pero como hemos comentado estos ángulos están referidos al sistema de referencia del fotón, para referirlos al sistema del laboratorio usaremos las siguientes ecuaciones:

$$\cos \theta_{n+1} = \cos \theta_n \cos \theta + \sin \theta_n \sin \theta \sin \phi \quad (15)$$

$$\sin(\phi_{n+1} - \phi_n) = \frac{\sin \theta \sin \phi}{\sin \theta_{n+1}} \quad (16)$$

Donde se entiende mediante los subíndices n, que para cada asignación de ángulo se necesita el movimiento previo.

Habrà que tener cuidado con éstas fórmulas y recalculer ángulos si se diera el caso, pues no existen arcosenos ni arcocosenos de numeros mayores de 1 o menores de -1.

Las coordenadas espaciales vienen determinadas por este dibujo

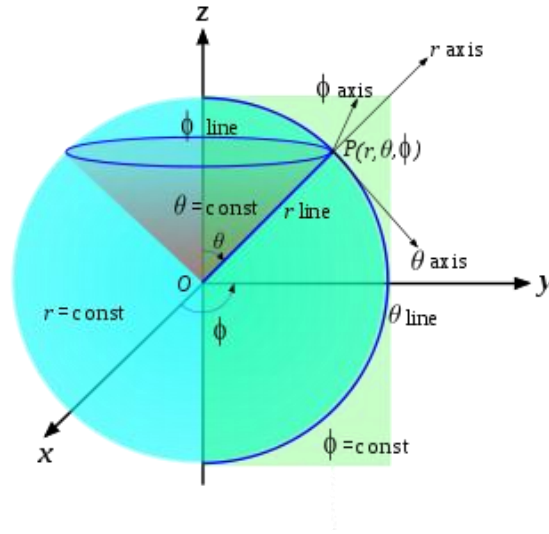


Fig. 3

Así, para poder situarlos en el espacio tridimensional (útil para saber si el fotón ha abandonado el material) tendremos en cuenta sin más:

$$x = s \sin \theta_n \cos \phi_n \quad ; \quad y = s \sin \theta_n \sin \phi_n \quad ; \quad z = s \cos \theta_n \quad (17)$$

ALGORITMO

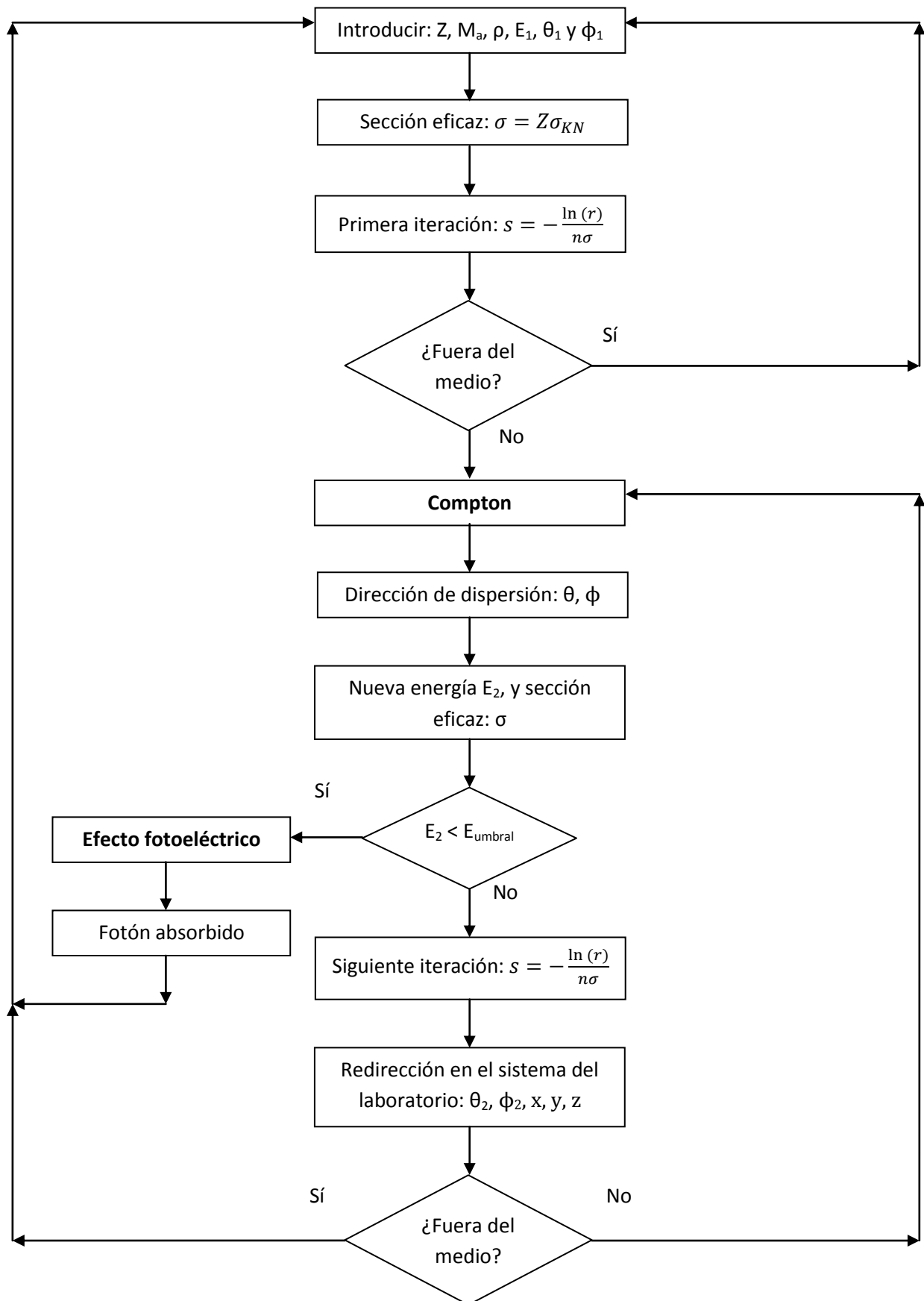
En el directorio “coexl14@docfis:~/Proyecto” se encuentra el fichero “proyect_gamma_3.f95”, donde está escrito el programa, y su ejecutable “gamma_3”.

“POSICION” es el fichero en el que se escriben las tres columnas de datos: puntos en los que choca el fotón en el espacio tridimensional.

El objeto del modulo “KLEIN_NISHINA” es determinar los ángulos aleatorio θ y ϕ , y el cálculo de la sección eficaz.

En nuestro problema son parámetros que están tabulados $E_1=1.1\text{MeV}$ y E_{umbral} que será determinada automáticamente por el módulo ENERGIA_UMBRALE en función de Z.

Este diagrama de flujo muestra el algoritmo que nuestra simulación seguirá:



Cuando el programa finalice nos devolverá tres valores:

Coeficiente de transmisión = (fotones transmitidos)/(total de fotones)

Coeficiente de retrodispersión = (fotones devueltos)/(total de fotones)

Coeficiente de absorción = (fotones absorbidos)/(total de fotones)

CONCLUSIONES

Se invita al lector a probar la simulación con la siguiente tabla de datos:

	Z	M_a (gr/mol)	ρ (gr/cm³)
Al	13	26.98	2.70
Ti	22	47.88	4.54
Fe	26	55.85	7.87
Cu	29	63.55	8.96
Ge	32	72.59	4.32
Sn	50	118.69	7.31
Pt	78	195.08	21.45
Pb	82	207.19	11.35

La energía incidente del haz de fotones podría variarse, y como es de esperar, si la energía umbral se mantuviese igual, cada fotón podría ser capaz de realizar más colisiones antes de llegar a este límite. Sin embargo habría que ser consecuente, respetando la Fig. 1, pues a mayores energías aparecerían efectos de creación de pares. Es decir, la simulación es eficiente y realista para energías incidentes del orden de 1 MeV, tal y como se estudia.

Habría que tener en cuenta que sólo se han clasificado valores de E_{umbrales} hasta un rango de $Z=90$. Para valores por encima de este habría que reescribir el programa.

Se puede concluir y comprobar también, que materiales de mayores Z tendrán en general un coeficiente de absorción mayor (y por tanto menos fotones atravesarán el material), pues basta alcanzar una energía cada vez más próxima al 1.1 MeV del que partimos para que el fotón sea absorbido. Las Fig. 4 y 5 nos demostrarán esto.

Podríamos estudiar por ejemplo el caso de un haz formado por 10000 fotones que inciden perpendicularmente ($\phi=0$, $\theta=\pi/2$) sobre dos materiales distintos: Hierro y Estaño, y comparar el número de fotones que lo atraviesan, y son absorbidos en relación a su grosor.

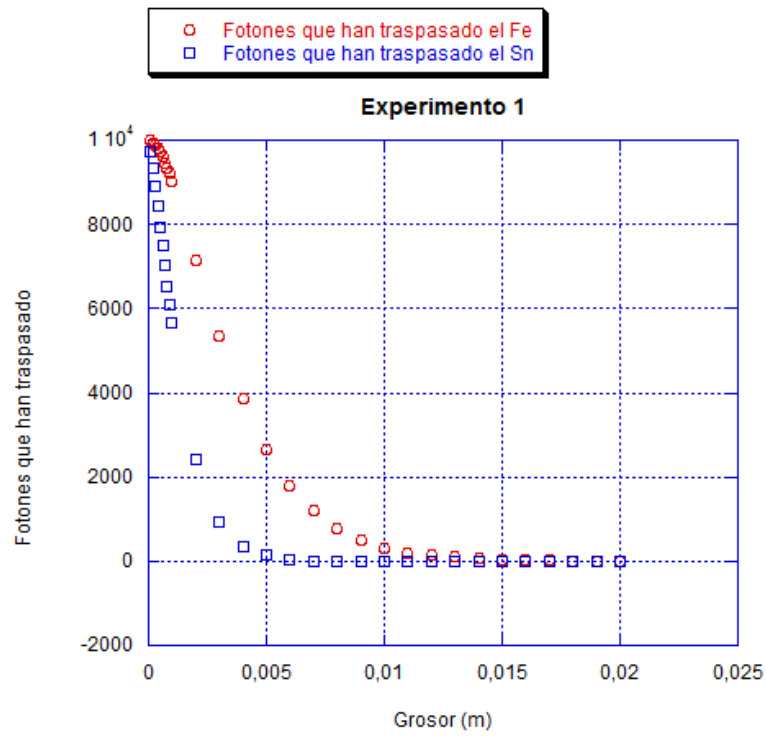


Fig. 4

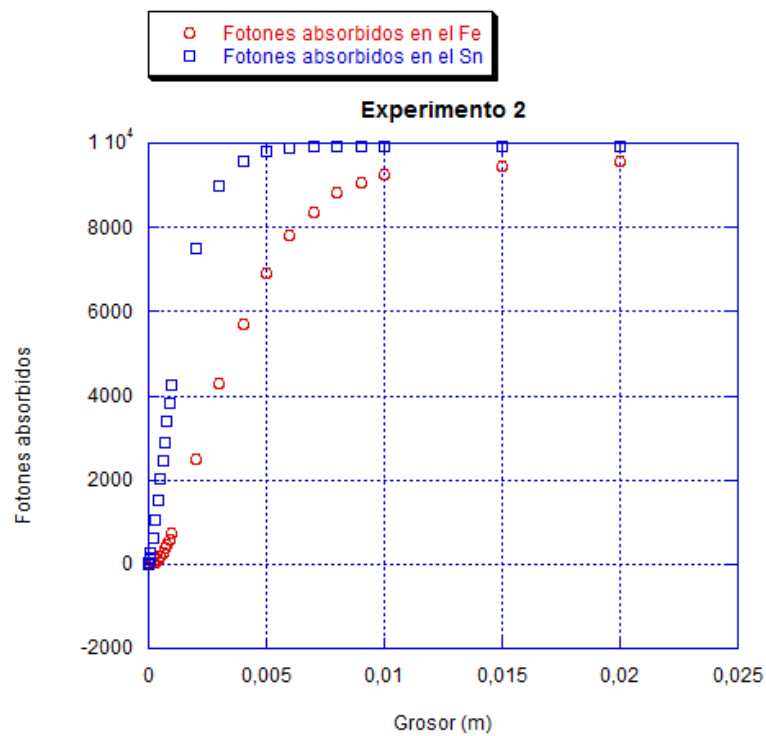


Fig.5

Las curvas de estas gráficas son similares en forma a las de cualquier otro material, siendo claro, en cada uno de ellos, diferentes los grosores en los que prácticamente ningún fotón es

capaz de atravesar el material (la mayoría de fotones son absorbidos), y la pendiente de caída (o ascenso).

Nunca se llega a absorber por el material el 100% de los fotones incidentes debido a la existencia de la retrodispersión.

El programa en definitiva, permite el estudio del paso, absorción, o retrodispersion de los fotones de un haz, permitiéndonos crear posteriormente gráficas como la de la Fig. 4 ó 5 para su estudio.