

Simulación por el método de Monte Carlo del paso de electrones de baja energía a través de medios materiales.

Dto. de Física Atómica, Molecular y Nuclear
Facultad C. Físicas. Universidad Complutense

1 Introducción

En esta práctica se estudia el paso de un haz monoenergético de electrones de baja energía (5-50 KeV) por láminas de diferentes materiales y distinto grosor. Para ello se emplea un algoritmo de Monte Carlo que simula la pérdida de energía por los electrones y la dispersión que sufren al atravesar el material. Un programa de cálculo permite obtener los coeficientes de absorción, retrodispersión y transmisión. Así mismo, se pueden comprobar algunas propiedades de la dispersión simple y múltiple.

2 Paso de electrones a través de la materia

Al atravesar un electrón un medio material, puede interaccionar de diferentes maneras:

- Pérdida de energía por colisiones inelásticas con los electrones atómicos del material.
- Cambio de dirección por dispersión en el núcleo atómico.
- Pérdida por radiación (Bremsstrahlung).

En la figura 1 se muestra la pérdida de energía por unidad de espacio recorrido para electrones de alta energía. Como se puede observar, la pérdida por radiación o Bremsstrahlung no es apreciable en el rango de energías que nos ocupa, empezando a ser muy importante en el rango de energías de 1 MeV y superiores.

2.1 Pérdida de energía por colisiones atómicas

Al atravesar una partícula cargada un material, se producen colisiones con los electrones atómicos, a los que se les transfiere en el proceso parte de la energía de la partícula incidente, de forma que puede producirse la excitación de un electrón atómico o su ionización. Este tipo de proceso es el responsable de la casi totalidad de la pérdida de energía de partículas pesadas en un material, ya que a pesar de

Figura 1: Pérdida de energía de electrones en el plomo. Por comparación, se muestra también la pérdida por ionización para protones

que la sección eficaz es muy baja (del orden de 10^{-17} - 10^{-16} cm^2) el número de átomos por unidad de distancia recorrida es muy alto y por lo tanto el número de colisiones también.

Estas colisiones atómicas se dividen arbitrariamente en colisiones blandas, en las que solo hay excitación, y colisiones duras en las que hay ionización. En éste último caso, la energía transferida puede ser suficientemente grande como para que el electrón secundario produzca una ionización apreciable. Estos electrones son referidos a veces como rayos delta o "knock-on electrons"

El tratamiento mecano-cuántico correcto del paso de partículas a través de la materia fue realizado por Bethe, Block y otros autores, y la ecuación que proporciona la pérdida de energía por unidad de longitud atravesada de material se conoce como fórmula de Bethe-Block.

En el caso de electrones (el que nos ocupa) y positrones, el tratamiento es ligeramente diferente debido a su pequeña masa que hace que ciertas asunciones realizadas para la deducción de la fórmula de Bethe-Block no sean correctas y haya que añadir ciertas correcciones.

En el rango de energías que trataremos (5-50 KeV) los electrones pueden ser considerados partículas clásicas y puede ser realizado un tratamiento no relativista del problema y obtener una fórmula equivalente a la de Bethe-Block que usaremos en el programa:

$$\frac{dT}{ds} = -\frac{2\pi e^4}{T} N Z \ln \left(\frac{2T(eV)}{11.5Z} \right)$$

en unidades electrostáticas de carga, donde T es la energía cinética, s es el espacio recorrido, e es la carga del electrón, N es el número de átomos por unidad de volumen y Z es el número atómico del material atravesado

Con una adecuada manipulación y cambio de unidades:

$$\boxed{\frac{dT}{ds} = -7.83 \frac{\rho Z}{AT} \ln \left(\frac{174T(KeV)}{Z} \right) \left(\frac{KeV}{\mu m} \right)}$$

donde ρ es la densidad y A la masa atómica del material. Esta fórmula expresa de una manera mas conveniente la pérdida de energía para ser empleada en el programa.

2.2 Dispersión por el núcleo atómico. Dispersión culombiana

A su paso por el material, los electrones pueden ser dispersados elásticamente por los núcleos atómicos debido a la fuerza producida por las cargas positivas del núcleo.

La sección eficaz de dispersión por una carga positiva es la conocida fórmula de Rutherford. La sección eficaz total de dispersión en este caso no es finita, ya que debido al alcance infinito de la interacción, cualquier partícula por lejos que pase del centro dispersor es desviada.

Este caso representa una situación que no es la real, ya que la carga del núcleo va quedando apantallada por los electrones atómicos a medida que nos alejamos de aquél, siendo la carga nula a una distancia suficiente. Para tenerlo en cuenta, vamos a emplear en el programa una sección eficaz no relativista, resultado de apantallar la carga nuclear de forma exponencial, cuya expresión es:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z(Z+1)e^4}{p^2v^2} \frac{1}{(1 - \cos\theta + 2\beta)^2}}$$

donde:

Z: número atómico del material

e: carga del electrón

p: momento del electrón

v: velocidad del electrón

$$\beta = 0.25 (1.12 \lambda_0 \hbar/p)^2$$

$$\lambda_0 = Z^{1/3}/(0.885a_0)$$

a_0 = radio de Bohr

3 Métodos de Monte Carlo

Se denominan en general métodos de Monte Carlo a aquellos que utilizan números aleatorios para resolver un problema.

Casi todo el mundo conoce técnicas de Monte Carlo aplicadas a la resolución de integrales numéricas y es que puede demostrarse que para cualquier problema resuelto por el método de Monte Carlo se puede encontrar una integral equivalente que lo representa.

Por ejemplo, uno de los primeros cálculos de este tipo es el llamado ‘La varilla de Buffon’ (Buffon, 1777) empleado para el cálculo de π . El experimento consiste en tirar repetidas veces una varilla de longitud d sobre un suelo de líneas paralelas separadas también una distancia d y contar el número de veces que la varilla toca una de las líneas del suelo. En este ejemplo, en principio no se ve de forma directa que lo estemos resolviendo una integral.

La probabilidad de que la varilla toque una de las líneas del suelo es el cociente del número de veces que la varilla toca una línea y el número de tiradas. Supongamos que la varilla cae con un ángulo θ con respecto a las líneas del suelo. Para este ángulo fijo, la probabilidad de que la varilla toque una línea será la relación que existe entre la proyección de la longitud de la varilla en la perpendicular a las líneas del suelo y la distancia de éstas, es decir $d|\cos \theta|/d = |\cos \theta|$. Puesto que todos los ángulos son equiprobables, hemos de promediar este resultado sobre todos los ángulos θ , resultando $2/\pi$.

Luego por el procedimiento de tirar la varilla estamos resolviendo la integral:

$$\int_0^{\pi/2} d\theta \cos \theta \bigg/ \int_0^{\pi/2} d\theta = 2/\pi$$

Llamando x a la distancia del punto inferior de la varilla a la línea más próxima y θ al ángulo que forma la varilla con las líneas (ver figura 2), el cociente entre el número de tiradas total y el número de las que tocan la línea es igual al cociente entre el área total y el área rayada del dibujo. De ésta forma, si quisiéramos simular este proceso en un ordenador, deberíamos generar parejas de puntos x y θ siguiendo una distribución uniforme y contar cuántas veces cae la pareja fuera y dentro de la zona rayada.

3.1 Generación de números aleatorios

La generación de números verdaderamente aleatorios es difícil y se recurren para ello a fenómenos físicos aleatorios como por ejemplo desintegraciones radioactivas, ruido térmico en dispositivos electrónicos, tiempos de llegada de rayos cósmicos, etc. Al principio se utilizaban las listas de los números de la ruleta del casino de Monte Carlo, de ahí el nombre del método. Construir un dispositivo que genere números aleatorios con suficiente rapidez basado en estos métodos es muy complicado, y actualmente es difícil alimentar la voracidad de un ordenador con

Figura 2: 'Varilla de Buffon'

estos dispositivos. Es por todo esto por lo que se recurren a los llamados números pseudo-aleatorios.

Los números pseudo-aleatorios son series de números calculados por medio de una fórmula matemática (y por lo tanto reproducible), pero que en principio es indistinguible de una serie de números verdaderamente aleatorios. Puesto que se generan por medio de una fórmula, no es sencillo que la serie no tenga ciertos patrones y cadencias que sesgen posteriormente un cálculo realizado con ellos. Existen diversas pruebas para comprobar la aleatoriedad de un generador de este tipo, que prueban la bonanza en distintas situaciones. Por ejemplo, una de las primeras pruebas para un generador de números uniformes entre 0 y 1 consistiría en comprobar que su media es 0.5 y su varianza $1/12$. Otra prueba sencilla es coger pares de ellos, tomar uno como el valor de la abscisa, otro como el valor de la ordenada y representarlos de forma gráfica. Si aparece algún patrón visual significa que el generador no es todo lo bueno que debiera, aunque dependiendo del problema a tratar con ellos pueden ser sin embargo, útiles.

Casi todos los lenguajes de programación poseen una función intrínseca que proporciona números pseudo-aleatorios uniformes en el intervalo 0,1. Vamos a suponer en lo sucesivo que generan una serie con propiedades adecuadas para poder ser empleada en nuestro algoritmo de Monte Carlo.

3.2 Generación de números aleatorios a partir de un generador de números aleatorios uniformes

En el programa de Monte Carlo vamos a necesitar generar números aleatorios que no responden a una distribución uniforme, como por ejemplo el ángulo con el que se dispersa el electrón al colisionar con el núcleo atómico. Sin embargo sería útil poder emplear para ello el generador de números uniformes que nos proporciona el lenguaje de programación.

Figura 3: Función de distribución de $p(x)$

Consideremos la variable aleatoria ξ cuya densidad de probabilidad viene dada por la función $p(x)$, es decir, que la probabilidad de encontrar la variable ξ entre x y $x + dx$ es:

$$P \{x < \xi < x + dx\} = p(x)$$

estando x en el intervalo (a, b) . Construyamos la variable aleatoria γ de la forma:

$$\gamma = \int_a^\xi p(x)dx$$

entonces γ es una variable aleatoria uniforme entre 0 y 1.

Para demostrarlo, tomemos la función:

$$y = \int_a^x p(x)dx$$

función de distribución de $p(x)$, con $y(a) = 0$, $y(b) = 1$ y que posee la propiedad de ser monótona creciente.

Tomemos un subintervalo (a', b') de (a, b) . Este intervalo en x tiene su correspondiente intervalo en y $(y(a'), y(b'))$ que por ser la función monotona creciente estará incluido en el intervalo $(0, 1)$.

La probabilidad de que la variable aleatoria γ esté comprendida entre $y(a')$ e $y(b')$ es por tanto:

$$P\{y(a') < \gamma < y(b')\} = P\{a' < \xi < b'\} = \int_{a'}^{b'} p(x)dx$$

por las propiedades de la integral de Riemman, el segundo término puede expresarse:

$$\int_{a'}^{b'} p(x)dx = \int_a^{b'} p(x)dx - \int_a^{a'} p(x)dx = y(b') - y(a')$$

para todo subintervalo (a', b') de (a, b) , con lo que obtenemos que:

$$P\{y(a') < \gamma < y(b')\} = y(b') - y(a')$$

que es precisamente la probabilidad de una distribución uniforme. La variable aleatoria γ construida de esa forma responde pues a una distribución uniforme.

Luego, resumiendo, si queremos generar una variable aleatoria ξ , cuya densidad de probabilidad sea la función $p(x)$ a partir de un generador de números uniformes γ , despejamos ξ de la ecuación:

$$\boxed{\gamma = \int_a^{\xi} p(x)dx}$$

y por cada número γ que nos proporciona el generador obtenemos un número ξ mediante esta ecuación.

Puede resultar a veces imposible despejar la variable ξ de esa ecuación, en cuyo caso hay que recurrir a otros métodos como el de Neumann, que no trataremos aquí, ya que en el programa que nos ocupa sí es posible despejar ξ .

4 Ingredientes del algoritmo de Monte Carlo

Al pasar el electrón a través del material, el electrón va perdiendo energía de forma continua y de cuando en cuando es dispersado por algún núcleo variando su trayectoria. La longitud media recorrida entre dos colisiones con núcleos es el recorrido libre medio λ .

Así pues, el mecanismo de la simulación será: determinamos la orientación inicial de penetración del electrón en el material y su energía, hacemos avanzar una longitud aleatoria de acuerdo con la probabilidad de interacción, momento en el cual se produce la colisión. Calculamos los ángulos de dispersión para la nueva energía del electrón y repetimos el proceso hasta que el electrón abandone la lámina o hasta que la energía sea menor que un cierto umbral por debajo del cual suponemos que el electrón es absorbido por el medio.

4.1 Probabilidad de interacción. Recorrido libre medio.

En la sección 2.2 vimos la sección eficaz de dispersión por un núcleo, teniendo en cuenta el apantallamiento de los electrones atómicos.

La probabilidad de que un electrón recorra una longitud x sin interaccionar con ningún núcleo y lo haga en el próximo dx es:

$$P(x) = e^{-N\sigma x}$$

donde N es el número de centros dispersores por unidad de volumen.

El recorrido libre medio es pues la media de x :

$$\lambda = \int_0^\infty x e^{-N\sigma x} dx \Bigg/ \int_0^\infty e^{-N\sigma x} dx = \frac{1}{N\sigma}$$

Usando la expresión de la sección eficaz diferencial, expresando N en función de la densidad del material ρ , del número de Avogadro N_0 y la masa atómica A , resulta:

$$\lambda = \frac{A}{\rho N_0} \frac{\beta(1+\beta)}{\pi} \frac{4T^2}{Z(Z+1)e^4}$$

en el sistema de unidades electrostáticas de carga.

Tras un cambio de unidades adecuado, obtenemos:

$$\lambda(\mu m) = 1.02 \frac{\beta(1+\beta)AT^2}{Z(Z+1)\rho}$$

donde T está expresado en KeV y ρ en g/cm^3 . Esta es la expresión que usaremos en el programa.

β puede expresarse tras un cambio de unidades:

$$\beta = 5.45 \cdot 10^{-3} Z^{2/3} \frac{1}{T(KeV)}$$

4.2 Generación de la distancia recorrida entre colisiones

Conocemos cuál es la probabilidad de que el electrón viaje una cierta distancia sin interaccionar y que lo haga en el siguiente intervalo diferencial. Es con esta distribución de probabilidad con la que tenemos que generar el espacio recorrido entre colisiones. Para ello, empleamos la técnica descrita en la sección 3.2

Como ya dijimos, la densidad de probabilidad será (adecuadamente normalizada):

$$P(x) = \frac{1}{\lambda} e^{-x/\lambda}$$

la distribución de probabilidad correspondiente:

$$F(x) = \frac{1}{\lambda} \int_0^x e^{-x/\lambda} = 1 - e^{-x/\lambda}$$

siguiendo el método descrito en la sección 3.2, para generar números aleatorios según $P(x)$ igualamos $F(x)$ al número aleatorio uniforme r :

$$r = 1 - e^{-x/\lambda}$$

despejando:

$$x = -\lambda \ln(1 - r)$$

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

$$\boxed{x = -\lambda \ln(r)}$$

fórmula que usaremos en el programa para generar los recorridos aleatorios del electrón entre colisiones.

4.3 Generación del ángulo de dispersión en la colisión nuclear

Una vez que el electrón ha recorrido una distancia x descrita en la sección anterior, colisiona con un núcleo atómico y es dispersado un ángulo θ y ϕ en el sistema de referencia inicial del electrón. Estos ángulos vendrán determinados por la sección eficaz diferencial descrita en la sección 2.2

El ángulo ϕ es fácil de generar, ya que la dinámica del problema tiene simetría cilíndrica y por lo tanto cualquier ángulo ϕ es equiprobable. Si llamamos r a un número aleatorio uniforme entre 0 y 1, ϕ puede generarse como:

$$\boxed{\phi = 2\pi r}$$

Para generar θ recurriremos a la expresión de la sección eficaz diferencial y a la técnica empleada en la sección anterior. La probabilidad de que un electrón sea dispersado un ángulo entre θ y $\theta + d\theta$ es:

$$P(\theta) = \frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{d\theta}$$

su función de distribución:

$$F(\theta) = \frac{1}{\sigma} \int_0^\theta \frac{d\sigma}{d\theta}$$

operando:

$$F(\theta) = \frac{(1 + \beta)(1 - \cos \theta)}{1 + 2\beta - \cos \theta}$$

igualando al número aleatorio uniforme r y despejando:

$$\boxed{\cos \theta = \frac{1 - r + \beta(1 - 2r)}{1 - r + \beta}}$$

4.4 Paso del sistema de referencia del electrón al sistema de referencia del laboratorio

Para cada dispersión sufrida por el electrón hemos calculado los ángulos θ y ϕ que se desvía el electrón. Estos ángulos están referidos al sistema de referencia del electrón antes de la dispersión, y hemos de referirlos al sistema de referencia del laboratorio.

Figura 4: Dispersión del electrón. Sistemas de referencia del electrón y del laboratorio.

Sea (i, j, k) el sistema de referencia del laboratorio e (i', j', k') el del electrón. Sea también v_n el vector unitario en la dirección del momento del electrón antes de la colisión y v_{n+1} después de la colisión.

Podemos expresar v_n y v_{n+1} en función de los ángulos azimutales y polares:

$$\begin{aligned} v_n &= \sin \theta_n \cos \phi_n i + \sin \theta_n \sin \phi_n j + \cos \theta_n k \\ v_{n+1} &= \sin \theta_{n+1} \cos \phi_{n+1} i + \sin \theta_{n+1} \sin \phi_{n+1} j + \cos \theta_{n+1} k \\ v_{n+1} &= \sin \theta \cos \phi i' + \sin \theta \sin \phi j' + \cos \theta k' \end{aligned}$$

Debemos fijar el sistema de referencia (i', j', k') para lo cual, exigimos que k' vaya en la dirección inicial del electrón. i' y j' los elegimos de forma que sean perpendiculares entre sí y con k' .

$$\begin{aligned} k' &= v_n \\ i' &= \frac{v \times k}{|v \times k|} = \sin \theta_n i - \cos \phi_n j \\ j' &= i' \times k' = (k - \cos \theta_n v_n) / \sin \theta_n \end{aligned}$$

Para relacionar los ángulos en el sistema de referencia (i, j, k) después de la dispersión con los de antes de la dispersión y las desviaciones en el sistema de referencia del electrón (i', j', k') , calculamos los productos escalares de v_{n+1} con k y v_n , con las expresiones de v_{n+1} en el sistema (i, j, k) e (i', j', k') :

$$\begin{aligned} v_{n+1} \cdot k &= \cos \theta_{n+1} = \cos \theta_n \cos \theta + \sin \theta_n \sin \theta \sin \phi \\ v_{n+1} \cdot v_n &= \cos \theta = \cos \theta_n \cos \theta_{n+1} + \sin \theta_n \cos \theta_{n+1} \cos(\phi_{n+1} - \phi_n) \end{aligned}$$

Despejando, obtenemos las expresiones deseadas:

$$\boxed{\cos \theta_{n+1} = \cos \theta_n \cos \theta + \sin \theta_n \sin \theta \sin \phi}$$

$$\boxed{\cos(\phi_{n+1} - \phi_n) = \frac{\cos \theta - \cos \theta_n \cos \theta_{n+1}}{\sin \theta_n \sin \theta_{n+1}}}$$

que una vez calculados θ y ϕ nos permitirán calcular la nueva dirección del electrón en el sistema de laboratorio después de ser dispersado por el núcleo atómico.

El valor de $\sin \theta_{n+1}$ puede ser fácilmente obtenido a partir de las proyecciones P_n y P_{n+1} de v_n y v_{n+1} .

De la figura, podemos ver que:

$$P_{n+1} \times P_n = \sin \theta_n \sin \theta_{n+1} \sin(\phi_{n+1} - \phi_n) k$$

Por otra parte, calculando las componentes de P_n y P_{n+1} y realizando el producto vectorial con ellas, se obtiene:

$$P_{n+1} \times P_n = \sin \theta_n \sin \theta \sin \phi k$$

de ambas expresiones y despejando obtenemos la fórmula requerida:

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

5 Descripción del programa

El programa de simulación (ver apéndice B), está escrito en QuickBasic y puede ser ejecutado desde el intérprete de basic QBASIC incluido en el MS-DOS 6.0 o superiores, o con el compilador de QuickBasic¹. Se facilita una versión compilada del programa.

Cuando los electrones atraviesan la lámina, después de perder parte de su energía y dispersarse, puede ocurrir que logre salir por el otro extremo, que quede absorbido o que salga hacia atrás por donde entró. Se definen tres coeficientes,

¹QuickBasic y MS-DOS © Microsoft Corporation

llamados de transmisión, de absorción y de retrodispersión como la fracción sobre el total de los electrones que logran atravesar la placa, que son absorbidos y los que salen por donde entraron respectivamente.

El programa permite el cálculo de estos tres coeficientes así como la visualización de las trayectorias de los electrones.

Al empezar el programa nos pedirá los datos necesarios para su funcionamiento:

- Nombre del elemento. Se usará como parte inicial de los ficheros de salida.
- Espesor en micras de la placa de material.
- Densidad en g/cm^3 .
- El número atómico Z .
- El número másico A .
- La energía de los electrones incidentes en KeV.
- El ángulo de incidencia en grados.
- Modo de funcionamiento del programa:
 - (1) Sólo Coeff: Sólo muestra el progreso del cálculo de coeficientes.
 - (2) Coeff y plot: Muestra el progreso del cálculo de los coeficientes, además de la trayectoria de los electrones.
 - (3) Sólo Plot: Muestra únicamente las trayectorias de los electrones.
- Número de electrones a generar. Se recomienda no introducir más de 100 cuando se elijan los modos (2) o (3).

Prosigue el programa (ver apéndice B), con el cálculo de algunas constantes que entrarán en distintas fórmulas. Se definen posteriormente tres funciones que serán empleadas más adelante: el \cos^{-1} , β y la pérdida de energía.

Después de estos cálculos se entra en el bucle principal (etiqueta NEWEL:), en el que se irán simulando la trayectoria de los distintos electrones. Se empieza por asignar los valores iniciales del electrón. Una vez hecho esto, se entra en el bucle de simulación (etiqueta NSTEP:) en el que de forma repetida se calcula:

- Longitud a recorrer en este paso.
- Se calcula la energía perdida al recorrer esta longitud y se fija la nueva energía del electrón.
- Se comprueba que el electrón no abandona el material o que su energía no es menor de un umbral fijado, para este programa, en 0.5 Kev. Si está en estas circunstancias, se calculan los nuevos coeficientes y se muestran por pantalla y se graban al fichero cada 20 electrones simulados.

- Se calculan los ángulos de dispersión en el sistema de referencia del electrón.
- Se pasa al sistema de referencia del laboratorio.

Por tanto, la trayectoria seguida por el electrón se va calculando en saltos o pasos.

El programa proporciona dos ficheros de salida. Sus nombres comienzan en ambos casos por el nombre del elemento y sus extensiones son .COF y .HIS. El fichero de extensión .HIS contiene en su primera línea los datos introducidos y en las restantes, el número de electrón generado, y los coeficientes de retrodispersión, de absorción y transmisión cada 20 electrones. El fichero de extensión .COF contiene la información de los electrones transmitidos. Cada línea contiene: número de electrón generado, ángulo θ con el que abandona la placa y energía.

6 Objetivos

Primeramente con objeto de familiarizarse con el programa, correr un cuantos casos con la opción de visualizar, para algunos materiales, distintos espesores y distintas energías y ángulos de incidencia de los electrones. Calcular siempre previamente el recorrido libre medio para hacerse una idea de los espesores a colocar.

Elegir un material, como por ejemplo el aluminio, y obtener la distribución de ángulos de salida para el caso de una lámina fina en la que el número medio de colisiones sea del orden de 0.3, y una lámina gruesa en la que sea del orden de 20 o 30. Comprobar que la distribución se ajusta a la fórmula de dispersión de Rutherford expuesta en la sección 2.2 o a la de dispersión múltiple (expuesta en el apéndice A).

Tomar láminas de aluminio y plomo de grosor suficiente para que ningún electrón logre transmitirse. Calcular el coeficiente de retrodispersión para electrones de incidencia perpendicular y energía 20 KeV. Comparar los resultados y explicar las diferencias para ambos materiales.

Empleando láminas de aluminio y plomo de espesor 20 veces el recorrido libre medio correspondiente a una energía de 10 KeV, representar los coeficientes de absorción, retrodispersión y transmisión en función de la energía en el rango de 1 a 25 KeV. Explicar los resultados.

A la vista de la información recabada en la simulación, ¿ qué material o conjunto de materiales se debieran emplear para detener un haz de electrones y evitar también su retrodispersión ?

| | Z | A | ρ |
|----|----|--------|--------|
| 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 |

References

- [1] W.Williamson, Jr., G.C. Duncan. “Monte Carlo simulation of nonrelativistic electron scattering” Am. J. Phys. 54 (3) March 1986 (Cuidado con las numerosas erratas)
- [2] W.R.Leo “Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments” Ed. Springer-Verlag
- [3] R.D.Evans “The Atomic Nucleus” Ed. McGraw-Hill
- [4] Particle Data Group “Review of Particle Properties” Phys. Rev. D, 1173-1826, 50 (3) August 1994

A Dispersión múltiple

En el caso de que el electrón sufra múltiples dispersiones antes de abandonar la lámina, se puede aplicar una aproximación gaussiana, para determinar el ángulo θ con el que emergen. Esta basado en el hecho de que si el ángulo que se desvía el electrón en una dispersión individual es pequeño ($< 10^\circ$) y el número de dispersiones es numeroso, por el teorema central del límite, la distribución de ángulos θ responde a una distribución gaussiana de la forma:

$$P(\theta)d\Omega = \frac{1}{\pi <\theta^2>} \exp\left(-\frac{\theta^2}{<\theta^2>}\right) d\Omega$$

con el parámetro $<\theta^2>$ dado por:

$$\sqrt{<\theta^2>} = \frac{20MeV}{cp\beta} \sqrt{\frac{x}{\chi_0}} \left[1 + 0.038 \ln\left(\frac{x}{\chi_0}\right) \right]$$

donde $\beta = v/c$, x es el espesor de la lámina y χ_0 es conocido como longitud de radiación del material ($\chi_0(\text{Al}) = 8.9\text{cm}$, $\chi_0(\text{Pb}) = 0.56\text{cm}$).

Para obtener χ_0 para otros materiales, puede emplearse la fórmula:

$$\chi_0(\text{cm}) = \frac{716.4A}{Z(Z+1)\ln(287/\sqrt{Z})} \frac{1}{\rho(\text{g/cm}^3)}$$

B Programa MONELE.BAS

```

'*****
'*
'*      NAME          :  MON   BAS
'*      CALLED BY      :
'*      AUTHOR         :  F. ARQUEROS
'*      DATE OF CODING:  XX/XX/89
'*      DATE OF LAST
'*      UPDATE        : 13/02/91   JLC
'*      UPDATE        : 24/03/95   JSZ
'*      TASK          :   Compute backscattering , transmission and ab-
'*                      sorption coefficients of low energy electrons
'*                      traversing a thin foil with a simple Montecar-
'*                      lo method
'*****
,
'***--- Initialize ---**
,
    RANDOMIZE TIMER
    CLS
    DEFDBL A-Z
    PI = 3.14159
    PIBY2 = PI / 2#
    DEGRAD = 180# / PI
    NN% = 20
    N5 = 0
    A5% = 0
    B5% = 0
    W5% = 0
    ' Unless specified, double precision
    ' Useful constants
    ' Compute coefficients every
    ' NN electrons
    ' Total number of electrons
    ' Absorbed      ""
    ' Backscattered ""
    ' Transmitted   ""

'***--- Input data ---**
,
    INPUT "elemento="; A$
    IF LEN(A$) > 8 THEN A$ = LEFT$(A$, 8)
    INPUT "Espesor (micras)="; Z0
    INPUT "Densidad (g/cm^3)="; R0
    INPUT "Z="; Z
    INPUT "A="; A
    INPUT "Energia (KeV)="; E5
    INPUT "Angulo de incidencia (grados)="; A0
    IF A0 = 0! THEN A0 = .00000001#

```



```

INPUT "Salida: (1)Solo Coeff (2)Coeff y plot (3)Solo plot ", B$
IF (B$ <> "1" AND B$ <> "2" AND B$ <> "3") THEN B$ = "1"
OPT% = VAL(B$)
INPUT "Numero maximo de electrones a generar ", NMAX%

'***--- File open ---**

OPEN A$ + ".COF" FOR OUTPUT AS #1
OPEN A$ + ".HIS" FOR OUTPUT AS #2
PRINT #1, A0, Z0, R, Z, A, E5, A$

'***--- Print header and prepare screen for output ---**

CLS
SCREEN 12
IF (OPT% <> 3) THEN
    PRINT
    PRINT "      NE      BS(%)      AB(%)      TR(%) "
    PRINT "*****": PRINT
    IF (OPT% = 2) THEN
        VIEW PRINT 5 TO 12
    END IF
END IF
IF (OPT% <> 1) THEN
    IF (OPT% = 2) THEN
        WINDOW (-Z0 / 2, -Z0 / 10)-(Z0 / 2, Z0 * 22 / 10)
    ELSE
        WINDOW (-Z0 / 2, -Z0 / 10)-(Z0 / 2, Z0 * 11 / 10)
    END IF
    LINE (-Z0 / 2, 0)-(Z0 / 2, 0)
    LINE (-Z0 / 2, Z0)-(Z0 / 2, Z0)
END IF

'***--- Define constants ---*

A0 = A0 / DEGRAD 'Convert incident angle to radians
LAMBDA1 = -1.02 * A / (Z * (Z + 1) * R0) 'Constant in Lambda
BETA1 = 5.44 * 10 ^ (-3) * Z ^ (2 / 3) 'Constant in Beta
ELOST1 = 7.83 * R0 * Z / A 'First constant in energy loss
ELOST2 = LOG(174# / Z) 'Second constant in energy loss

'***--- Define functions ---*

```

```

DEF FNARCCOS (X) = -ATN(X / SQR(-X * X + 1)) + PIBY2
                                                    'ArcCos
DEF FNBETA (X) = BETA1 / X
                                                    'Beta for a given energy x
DEF FNELOST (X) = ELOST1 * (ELOST2 + LOG(X)) / X
                                                    'Energy loss for a given energy x

'***--- Main Loop ---*

NEWEL:

    IF (N5 >= NMAX%) THEN
        PRINT " Pulse una tecla para salir "
        A$ = ""
        WHILE A$ = ""
            A$ = INKEY$
        WEND
        GOTO 999
    ' End of program
END IF
,

    IF (OPT% = 3) THEN
        C$ = ""
        WHILE C$ = ""
            C$ = INKEY$
        WEND
        IF (C$ = "F" OR C$ = "f" OR C$ = CHR$(27)) THEN GOTO 999
    END IF

'***--- Initial values for this electron ---**

    N5 = N5 + 1
    T = E5
    X = 0#: Z1 = 0#: Y = 0#
    STH1 = SIN(A0): CTH1 = COS(A0)
    CPH1 = .999#: SPH1 = 0#
    BETA = FNBETA(T)
    RS = RND

'***--- Compute next step ---**

NSTEP:

    XP = X
    ZP = Z1

```

```

    LAMBDA = LAMBDA1 * BETA * (1 + BETA) * T ^ 2
    S1 = LAMBDA * LOG(RS)
    X = X + S1 * STH1 * CPH1
    Y = Y + S1 * STH1 * SPH1
    Z1 = Z1 + S1 * CTH1

'***--- Draw the lines ----**
,
    IF (OPT% > 1) THEN
        LINE (XP, ZP)-(X, Z1)
    END IF
,
'***--- Increase counters ----*
,
,   Decide if we stop tracing electron and pick up a new one
,       or if we continue with it
,
    ST = (Z0 - ZP) / CTH1                'length to end of the plate
    IF (ST < S1 AND ST > 0) THEN
        S2 = ST
    ELSE
        S2 = S1
    END IF

    T = T - FNELOST(T) * S2                'New energy
    BETA = FNBETA(T)                        'New beta
,
    IF (Z1 < 0) THEN
        B5% = B5% + 1                    ' Backscattered electrons
        IREJ% = 1
    ELSEIF (Z1 > Z0) THEN
        W5% = W5% + 1                    ' Transmitted electrons
        IREJ% = 1
        THETA! = ATN(STH1 / CTH1) * DEGRAD
        ENER! = T
        PRINT #2, INT(N5), THETA!, ENER!
    ELSEIF (T < .5) THEN
        A5% = A5% + 1                    ' Absorbed electrons
        IREJ% = 1
    ELSE
        IREJ% = 0                        ' Go on with tracking
    END IF
,

```

```

'*-----*
'***--- Compute coeff. or get random values for next step ---***
'*-----*
,
    IF (IREJ% = 1) THEN
        B15 = FIX((B5% / N5) * 10000) / 100  'round to xx.xx %
        A15 = FIX((A5% / N5) * 10000) / 100
        W15 = FIX((W5% / N5) * 10000) / 100

        IF ((N5 MOD NN%) = 0) THEN
            PRINT #1, N5, B15, A15, W15
            IF (OPT% < 3) THEN
                PRINT USING "#####.##"; N5; B15; A15; W15
            END IF
        END IF

        GOTO NEWEL                                ' get a new electron

    ELSE
,
'-- Scatter electron
'  Keep old values
        CTH0 = CTH1:    STH0 = STH1
        CPH0 = CPH1:    SPH0 = SPH1
        RTH = RND:      RPH = RND:      RS = RND

'  New theta in electron frame
        CTHM = (1 - RTH + BETA * (1 - 2 * RTH)) / (1 - RTH + BETA)
        STHM = SQR(1 - CTHM ^ 2)

'  New Phi in electron frame
        PHIM = 2 * PI * RPH
        CPHM = COS(PHIM)
        SPHM = SIN(PHIM)

'  Back to lab frame
        CTH1 = CTH0 * CTHM + STH0 * STHM * CPHM
        STH1 = SQR(1 - CTH1 ^ 2)
        DPHI = STH0 * STHM * SPM / (CTHM - CTH1 * CTH0)
        DPHI = ATN(DPHI)
        CDPH = (CTHM - CTH1 * CTH0) / (STH0 * STH1)
        IF (CDPH < 0!) THEN DPHI = DPHI + PI
,

```

```

        PH10 = SGN(SPH0) * FNARCCOS(CPH0)
        CPH1 = COS(DPHI + PH10)
        SPH1 = SIN(DPHI + PH10)

        GOTO NSTEP                                ' Next step

    END IF
,
999 :

    SCREEN 0
,
    END

```