

ISTITUTO NAZIONALE DI FISICA NUCLEARE
Laboratori Nazionali di Frascati

LNF-79/2(R)
5 Gennaio 1979

P. Corvisiero, F. Masulli e A. Zucchiatti: CALCOLO DI
MONTECARLO PER LA DISTRIBUZIONE DI PERCORSO
DI ELETTRONI IN NaI.

P. Corvisiero^(x), F. Masulli^(o) e A. Zucchiatti^(x): CALCOLO DI MONTECARLO PER LA DISTRIBUZIONE DI PERCORSO DI ELETTRONI IN NaI.

INTRODUZIONE.

La perdita di energia di un elettrone in un mezzo avviene attraverso due processi: la ionizzazione che è un fenomeno di tipo continuo caratterizzato da un numero elevatissimo di interazioni per unità di percorso con perdite di energia molto piccole e la bremsstrahlung (BS) che è un fenomeno di tipo probabilistico consistente in emissione discreta di fotoni anche di energia elevata.

Soprattutto a causa di questo secondo processo, qualora l'elettrone viene fermato nel mezzo il suo range non è determinato ma segue una distribuzione statistica la cui natura dipende dall'energia.

Tali distribuzioni sono state ricavate mediante un calcolo di Monte Carlo in cui la perdita di energia per irraggiamento viene suddivisa in due parti: la prima caratterizzata da emissione di fotoni di BS di energia inferiore ad una soglia prefissata è trattata come un processo continuo e sommata alla perdita di energia per ionizzazione; la seconda che consiste nell'emissione di fotoni di più alta energia è trattata probabilisticamente.

Il metodo, applicato in particolare allo NaI, consente, con alcune ipotesi semplificative, di produrre mediante una trattazione localizzata della BS distribuzioni di percorso che hanno valori medi e più probabili in buon accordo con quelli ottenibili da calcoli integrali.

(x) - INFN - Sezione di Genova e Istituto di Fisica dell'Università di Genova.
(o) - Scuola di Perfezionamento in Fisica dell'Università di Genova.

2. - LA BREMSSTRAHLUNG.

In un mezzo omogeneo di numero atomico Z la BS è regolata dalla sezione d'urto di Schiff che tiene conto dello screening degli elettroni atomici tramite il parametro di screening

$$\gamma = \frac{100 K}{E_0 E Z^{1/3}} \quad \text{dove}$$

K = Energia del fotone in unità mc^2

E_0 = Energia totale dell'elettrone in unità mc^2

E = Energia totale dell'elettrone dopo l'interazione in unità mc^2 .

In particolare per $\gamma < 2$ avremo

$$d\sigma_K = \frac{4Z^2 r_0^2}{137} \frac{dK}{K} \left\{ \left[1 + \left(\frac{E}{E_0}\right)^2 \right] \left[\frac{\Phi_1(\gamma)}{4} - \frac{\ln Z}{3} \right] - \frac{2}{3} \frac{E}{E_0} \left[\frac{\Phi_2(\gamma)}{4} - \frac{\ln Z}{3} \right] \right\} \quad (1)$$

e per $\gamma > 2$

$$d\sigma_K = \frac{4Z^2 r_0^2}{137} \frac{dK}{K} \left[1 + \left(\frac{E}{E_0}\right)^2 - \frac{2}{3} \frac{E}{E_0} \right] \left[\ln \frac{2E_0 E}{K} - \frac{1}{2} - C(\gamma) \right] \quad (1')$$

dove Φ_1 , Φ_2 e C sono le funzioni date in forma grafica da Koch e Moltz.

I fotoni emessi hanno dunque energie comprese fra 0 ed $E_0 - mc^2$ ed il loro spettro, che dipende da E_0 , presenta verso le basse energie la cosiddetta divergenza infrarossa dovuta alla dipendenza $1/K$ della sezione d'urto.

Le funzioni (1) e (1') non sono normalizzabili; quindi non si può definire la corrispondente funzione integrale di probabilità

$$P(E_\gamma, E_0) = \int_0^{E_\gamma} d\sigma_K / \int_0^{E_0 - mc^2} d\sigma_K$$

dove P è la probabilità che un elettrone di energia totale E_0 emetta un fotone di BS di energia $\leq E_\gamma$.

Tuttavia è possibile schematizzare l'interazione nel modo seguente: la perdita di energia nel mezzo considerato avviene, oltre che per ionizzazione, attraverso l'emissione di un numero praticamente infinito di fotoni di bassissima energia e di un numero finito di fotoni di energia più alta fino ad $E_0 - mc^2$.

L'emissione di fotoni di BS di bassa energia può essere dunque ragionevolmente considerata un processo continuo cui si sovrappone l'emissione di fotoni di energia più alta che può essere trattata probabilisticamente.

3. - PERDITA CONTINUA DI ENERGIA

La perdita di energia per ionizzazione di un elettrone di energia totale E_0 in un composto ad n componenti è data da:

$$-\frac{dE}{dx}_{ion} = \sum_{i=1}^n N_i Z_i \frac{8}{3} \pi r_o \frac{2mc^2}{\beta} \left[\ln \left(\frac{mc^2 \beta^2 (E_o - mc^2)}{I_i^2 Z_i^2 (1 - \beta^2)} \right) + 1 - \beta^2 - (\beta^2 + 2(1 - \beta^2)^{1/2}) \ln^2 \right] \quad (2)$$

$I_i = 9.1 Z_i (1 + 1.9 Z_i^{-2/3})$ è il potenziale medio di ionizzazione per lo i -esimo componente
 N_i = numero di atomi/cm³ dello i -esimo componente.

A questa si somma la perdita di energia dovuta alla emissione di fotoni di energia inferiore ad una soglia E_{cut} opportunamente scelta ossia

$$-\frac{dE}{dx} \Big|_{\substack{BS \\ E < E_{cut}}} = \sum_{j=1}^n N_i \int_0^{E_{cut}} K d\sigma_K \Big|_i \quad (3)$$

Il risultato sarà una perdita di energia complessiva che chiameremo

$$-\frac{dE}{dx} \Big|_{cont} = -\frac{dE}{dx} \Big|_{ion} - \frac{dE}{dx} \Big|_{\substack{BS \\ E < E_{cut}}} \quad (4)$$

Nel mezzo da noi considerato, ovvero lo NaI, si è scelto $E_{cut} = 300$ KeV e si sono ritrovate in funzione dell'energia dell'elettrone la (2) e la (3) che sono mostrate in Fig. 1.

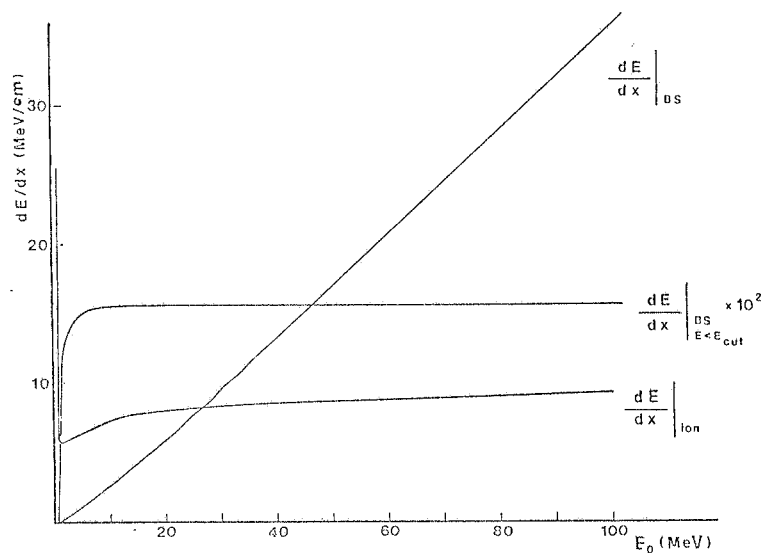


FIG. 1 - Perdite di energia specifiche in NaI in funzione dell'energia.

4. - EMISSIONE DISCRETA DI FOTONI.

E' possibile a questo punto dare la sezione d'urto totale per il processo di emissione di fotoni di energia superiore ad E_{cut} in funzione di E_0 .

Essa risulta per un composto omogeneo ad n componenti dalla somma delle sezioni d'urto relative ai singoli componenti moltiplicate per un fattore p_i pari al numero di atomi dell' i -esimo componente presenti nella molecola del composto.

$$\sigma(E_0) = \sum_{i=1}^n p_i \int_{E_{cut}}^{E_0 - mc^2} d\sigma_{K|i} \quad (5)$$

Nel caso dello NaI $p_1 = p_2 = 1$.

La probabilità che un elettrone di energia totale E_0 emetta per BS un fotone di energia fra E_{cut} e E_γ è data allora da

$$P(E_\gamma, E_0) = \sum_{i=1}^n p_i \int_{E_{cut}}^{E_\gamma} d\sigma_{K|i} / \sum_{i=1}^n \int_{E_{cut}}^{E_0 - mc^2} d\sigma_{K|i} \quad (6)$$

questa equazione può essere invertita ricavando l'energia del fotone emesso in funzione di $P(E_\gamma, E_0)$.

Alcune delle curve calcolate per lo NaI sono mostrate in Fig. 2.

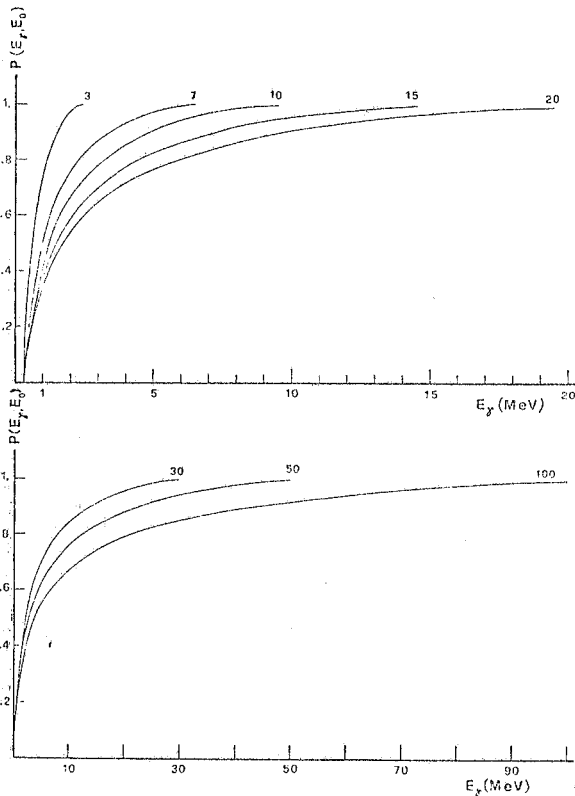


FIG. 2 - Integrali di probabilità per l'emissione di un fotone di BS in funzione dell'energia per lo NaI; il parametro è l'energia totale dell'elettrone.

5. - PUNTO DI EMISSIONE DEL FOTONE.

Dalla (5) si ricava la corrispondente sezione d'urto macroscopica ossia la probabilità di interazione di BS per unità di percorso

$$\mu(E_0) = \sum_{i=1}^n N_i P_i \int_{E_{cut}}^{E_0 - mc^2} d\sigma_{K|i} \quad (7)$$

Nel caso dello Nai si ha: $N_1 P_1 = N_2 P_2 = N_0 \rho / M$
dove

N_0 = numero di Avogadro
 $\rho = 3,67 \text{ g/cm}^3$ = densità dello Nai
 $M = 149,89 \text{ g}$ = peso molecolare dello Nai.

Con $E_{cut} = 0,3 \text{ MeV}$ si è ricavato per $\mu(E_0)$ l'andamento riportato in Fig. 3.

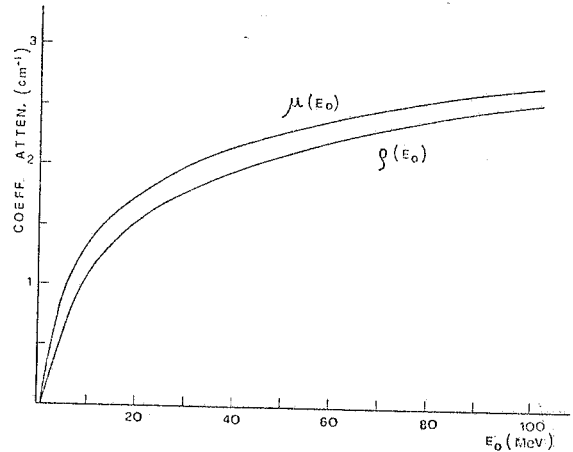


FIG. 3 - Andamento in funzione dell'energia delle sezioni d'urto macroscopica ed efficace di BS in NaI.

Con l'ipotesi semplificativa di traiettoria rettilinea per elettrone dalla sezione d'urto macroscopica $\mu(E_0)$ si ricava la probabilità di emissione di un fotone fra x e $x + dx$, tenendo conto che $\mu(E_0)$, a causa del rallentamento continuo dell'elettrone, è una funzione di x .

$$P(x) dx = e^{-\int_0^x \mu(E_0 - \int_0^{x'} \frac{dE}{dx''} \Big|_{cont} dx'')} dx' \mu(E_0 - \int_0^x \frac{dE}{dx''} \Big|_{cont} dx'' dx \quad (8)$$

Dalla (8) si ricava l'integrale di probabilità:

$$R(x, E_0) = \int_0^x p(x) dx \quad (9)$$

in cui il massimo valore possibile per x è dato da:

$$x_{max} = \int_{mc^2}^{E_0 - mc^2} \left(\frac{dE}{dx} \Big|_{cont} \right)^{-1} dE \quad (10)$$

ossia dal range per sola ionizzazione.

In Fig. 4 è mostrato l'andamento di $R(x, E_0)$ per alcuni valori di energia. Esso è assai regolare a tutte le energie. Per $E_0 > 30$ MeV la funzione tende asintoticamente al valore 1: questo significa che la sezione d'urto totale di BS è sufficientemente elevata da rendere praticamente certa la emissione del fotone prima dell'arresto dell'elettrone. Ad energie inferiori a 30 MeV la (9) raggiunge per $x = x_{\max}$ valori sensibilmente inferiori ad 1, ovvero a tali energie l'elettrone può anche fermarsi nel mezzo senza aver fatto BS.

Con la usuale tecnica di Montecarlo la (9) può essere invertita numericamente e fornire il punto di emissione del fotone x in funzione di $R(x, E_0)$; tuttavia è possibile un approccio generalizzato di tipo analitico. In Fig. 5 è rappresentata la quantità

$$1 - R(x, E_0)$$

in funzione di x per alcuni valori di E_0 .

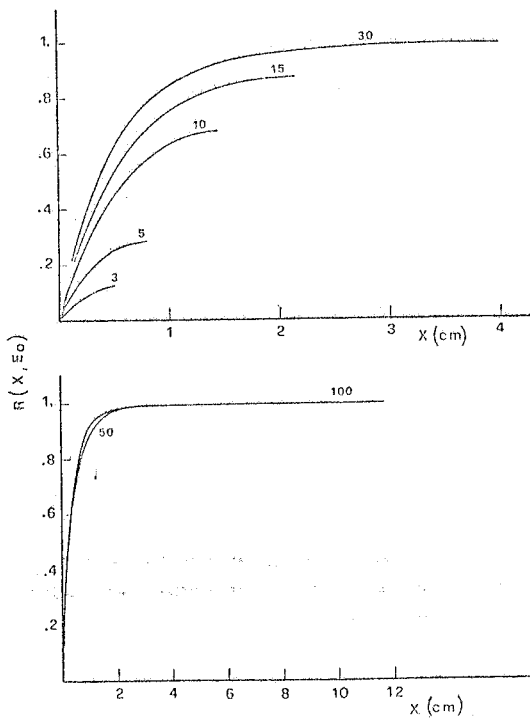


FIG. 4 - Integrali di probabilità di emissione di un fotone di BS in funzione del punto di emissione; il parametro è l'energia totale dell'elettrone.

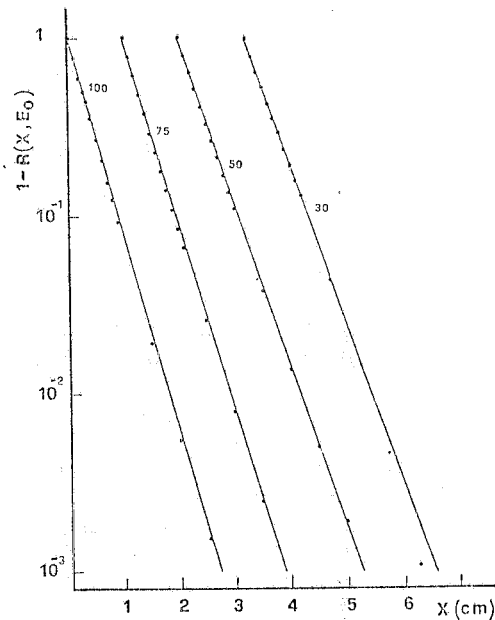


FIG. 5 - Integrali di probabilità di emissione di un fotone di BS in funzione del punto di emissione confrontati con le funzioni analitiche determinate dalle equazioni (11) e (12).

Come risulta dai grafici l'andamento si discosta da un esponenziale soltanto per qualche parte su mille. Se ne deduce l'andamento più generale

$$x = - \frac{\ln(1 - R(x, E_0))}{\varrho(E_0)} = F(R, E_0) \quad (11)$$

dove $\varrho(E_0)$ è una sezione d'urto macroscopica efficace che, dal confronto fra le $R(x, E_0)$ e la (11), risulta essere:

$$\begin{aligned} \varrho(E_0) &= 0.616 \ln E_0 - 0.307 & \text{cm}^{-1} & \text{ per } E_0 > 2 \text{ MeV} \\ &= 0.06 E_0 & \text{cm}^{-1} & \text{ per } E_0 \leq 2 \text{ MeV} \end{aligned} \quad (12)$$

In base alla (11) i punti di emissione dei fotoni di BS vengono calcolati con il metodo di Montecarlo scegliendo per $R(x, E_0)$ valori estratti casualmente secondo una distribuzione uniforme nell'intervallo $0 - 1$. Nel caso in cui l'estrazione casuale fornisca un valore di x maggiore di x_{\max} , l'evento di BS è ignorato e l'elettrone perderà energia per sola ionizzazione fino al punto di arresto.

6. - DISTRIBUZIONE DEI PERCORSI.

Le ipotesi fatte consentono di trattare in maniera rapida le funzioni $F(R, E_0)$ nell'ambito di un calcolo di Montecarlo che fornisce la distribuzione dei percorsi in funzione dell'energia.

Il programma di calcolo, in linguaggio FORTRAN nella versione CII del calcolatore CII 10070 in dotazione all'Università di Genova, segue la flow-chart mostrata in Fig. 6.

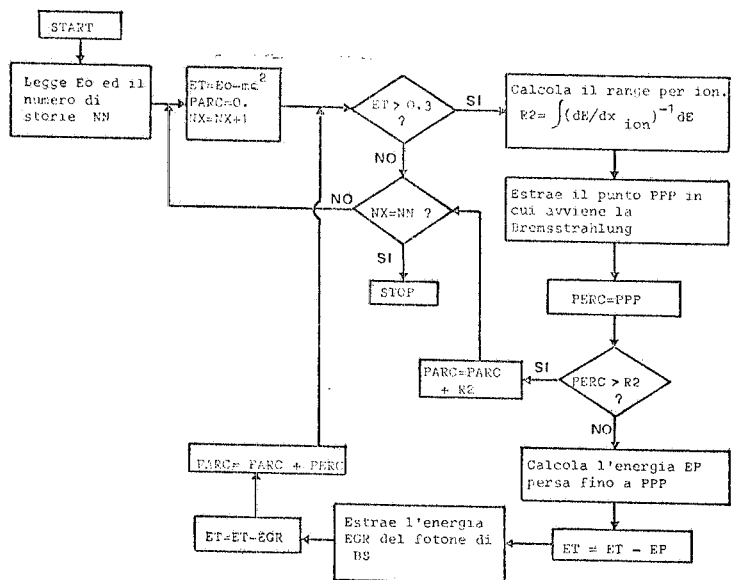


FIG. 6 - Diagramma di flusso.

Le distribuzioni da esso ricavabili, di cui alcune mostrate in Fig. 7, hanno andamenti in accordo con la dipendenza dall'energia della BS. A basse energie infatti esse sono asimmetriche e spostate verso i valori più alti dei percorsi che, essendo poco probabile l'emissione di fotoni di BS, corrispondono praticamente al valore x_{\max} dato dalla (10).

Al crescere dell'energia le distribuzioni divengono vieppiù simmetriche e lontane dai valori x_{\max} in conseguenza del crescente contributo dei fotoni di BS alla perdita di energia dell'elettrone.

All'analisi delle distribuzioni si sono ricavate le FWHM, il range medio ed il range più probabile in funzione di E_0 e, per confronto, il range calcolato dalle perdite di energia medie ovvero

$$R_c = \int_{0.01}^{E_0 - mc^2} \left(\frac{dE}{dx} \Big|_{\text{ion}} + \frac{dE}{dx} \Big|_{\text{BS}} \right)^{-1} dE \quad (13)$$

con

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_{BS} = N \int_0^{E_0 - mc^2} K d\sigma_K \Big|_{N_0} + N \int_0^{E_0 - mc^2} K d\sigma_K \Big|_I \quad (14)$$

essendo il limite inferiore di integrazione in R_c fissato a 0.01 MeV per evitare divergenze in dE/dx_{ion} .

Le quantità ricavate sono mostrate in Fig. 7 mentre dE/dx_{BS} è mostrata in Fig. 1.

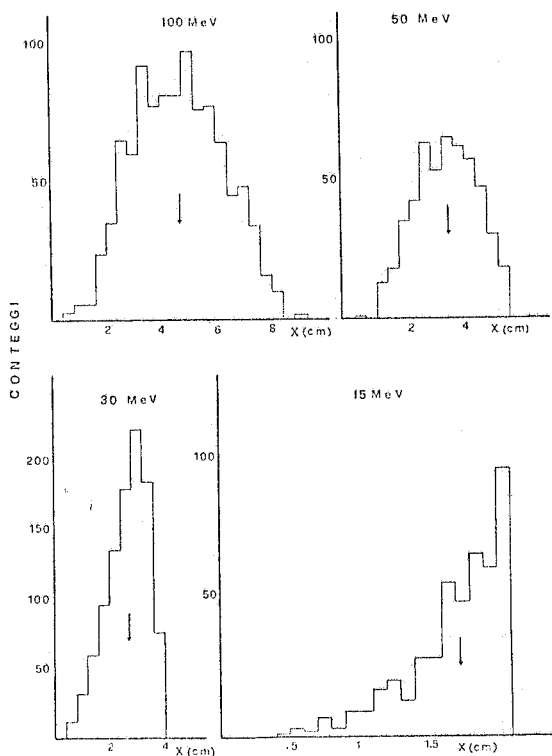


FIG. 7 - Esempi di distribuzione di range ottenute a varie energie. La freccia indica il valor medio.

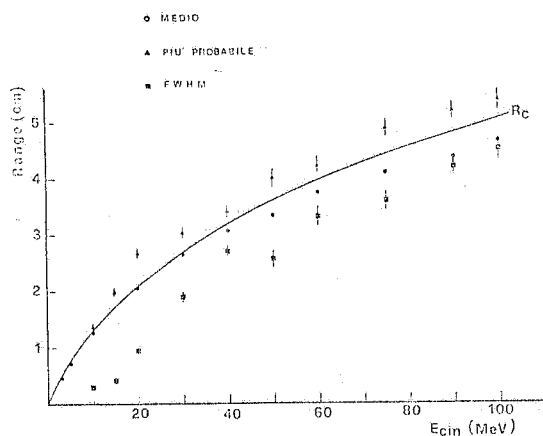


FIG. 8 - Andamento, in funzione dell'energia, del range medio, del range più probabile e della FWHM delle distribuzioni ottenute dal calcolo di Montecarlo confrontato con il range medio R_c ricavato dalla (13).

Il valor medio del range risulta crescere con l'energia fino ad aversi 4.65 cm per $E_0=100$ MeV.

La FWHM della distribuzione è anch'essa crescente ma, se ad energie inferiori a 20 MeV essa è al massimo dell'ordine di 0.4 volte il range medio, a 100 MeV essa è confrontabile col range stesso.

Questo fatto è consistente con il tipo di interazione dell'elettrone nel mezzo che, avvenendo ad alte energie essenzialmente attraverso la emissione di un elevato numero di fotoni di BS, rende il concetto di range sempre meno significativo ma pur sempre quantificabile attraverso un calcolo probabilistico.

La discrepanza fra il valor medio ottenuto col metodo di Montecarlo ed R_c , che comunque non è mai superiore al 9%, si ha soltanto ad energie superiori a 40 MeV.

Questa discrepanza non può essere totalmente giustificata con le approssimazioni introdotte ma deriva anche dal fatto che nella (13) non si tiene conto della interdipendenza fra il fenomeno della ionizzazione e la BS come è pure mostrato dal fatto che il disaccordo si fa evidente quando la ionizzazione non è più il processo prevalente.

Occorre infine sottolineare che i risultati ottenuti possono essere di grande utilità, principalmente attraverso la (11) e la (12) in quei problemi nei quali è necessaria una trattazione puntuale piuttosto rigorosa della BS come ad esempio calcoli di efficienza e funzioni di risposta di Ioduri di grosse dimensioni.

BIBLIOGRAFIA

- W. Heitler, The Quantum Theory of Radiation (Clarendon Press, 1954).
- A. J. Akhiezer and V. B. Berestetskii, Quantum Electrodynamics (Wiley & Sons, 1965).
- R. M. Sternheimer, in Methods of Experimental Physics (L. Marton, ed.) (Academic Press, 1961).
- M. Belluscio, R. Di Leo, A. Pantaleo and A. Vox, Nuclear Instr. and Meth. 118, 553 (1974).
- M. Giannini, P. Oliva e C. Ramorino, Report CNEN RT/FI(69)15 (1969).
- H. W. Koch and J. W. Motz, Rev. Mod. Phys. 31, 4 (1959).
- K. Shim, Y. Hayashida and T. Nakamura, Nuclear Instr. and Meth. 151, 271 (1978).