UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Instituto de Física

Hadronterapia

*Abordagem Semiclássica da Perda de Energia,
Efeitos da Fragmentação Nuclear e Taxa de Reação*

Patricia Rebello Teles

Orientador:

Prof. Dr. Mahir Saleh Hussein

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Mahir Saleh Hussein - IF - USP

Prof. Dr. Vítor Vanin - IF - USP

Prof. Dr. Adriano Natale - IFT - UNESP

São Paulo
2006

Prof. Celso Luiz Lima
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

615.842
T 269 h
M
ex 1

FICHA CATALOGRÁFICA

**Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo**

Teles, Patrícia Rebello

HADRONTERAPIA – Abordagem Semiclássica da Perda
de Energia, Efeitos da Fragmentação Nuclear e Taxa de
Reação. São Paulo , 2006

Dissertação - Universidade de São Paulo
Instituto de Física – Depto. de Física Matemática

Orientador: Prof. Dr. Mahir Saleh Hussein
Área de Concentração: Física

Unitermos:

1. Radioterapia;
2. Física de Partículas;
3. Espalhamento.

USP/IF/SBI-013/2006

O presente trabalho foi realizado com o apoio do Conselho Nacional de
Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq - Brasil.

*“Qualquer caminho é apenas um caminho.
E não constitui insulto algum,
para si ou para os outros,
abandoná-lo quando assim ordena o seu coração.
Olhe cada caminho com cuidado e atenção.
Tente-o tantas vezes quantas julgar necessárias.
Então faça a si mesmo e apenas a si mesmo uma pergunta:
possui esse caminho um coração?
Em caso afirmativo, o caminho é bom.
Caso contrário, esse caminho não possui importância alguma.
Como cientista, não aceite nada como fundamental ou essencial,
transcenda o pensamento sem abandonar o compromisso com a ciência,
coloque a vida e o bem estar do seres vivos no cerne de seus objetivos
e explore a total amplitude e capacidade da consciência humana”*

*Ao meu filho Michel
e à todos que iluminam nossos caminhos.*

Abstract

The aim of radiation therapy is to deliver the dose as high and as uniform as possible to diseased tissue sparing all the other parts, that is healthy and critical tissues, without causing unwanted and unnecessary side effects for the patient.

Difficults to achieve this goal start with the determination of the three-dimensional volumes of interest and end up in realizing a three-dimensional uniform and maximal as possible, the dose distribution.

The technique of intensity-modulated radiotherapy (IMRT) as form of conformation in conventional radiation therapy is a real revolution.

On the other hand, the use of therapeutic charged particles, as protons and carbon ions, is the technology of the actual future which is really the challenge in conformation of dose to targets, thanks to energy deposition characteristics of hadronic beams.

The aim of this work is to review the basic physics concerning the treatment of localized tumors with charged particles by applying a semi-classical approach to obtain a dispersion in the equation of energy loss, originally derived by Hans Bethe and Felix Bloch.

On a second moment we use statistical methods (Goldhaber statistic model) to estimate the energy of fragment after nuclear fragmentation processes and, in addition, we obtain a expression for the nuclear reaction rate to introduce how the temperature on tumor region would affect it.

Resumo

O objetivo primordial da Radioterapia é fornecer ao tumor uma dose de radiação suficientemente alta e uniformemente distribuída, de forma a poupar os tecidos adjacentes saudáveis dos efeitos da radiação.

Alcançar esse objetivo em sua plenitude é muito difícil devido à vários fatores, como por exemplo uma determinação eficiente do volume a ser tratado (através da aquisição de imagens tomográficas da localização do tumor no corpo) e também a realização eficaz da distribuição da dose de radiação (que deve ser tridimensionalmente uniforme e alta o suficiente para erradicar a doença).

Atualmente, a técnica de intensidade modulada do feixe (IMRT) usada na Radioterapia Convencional desempenha um avanço importante para o tratamento de tumores situados perto de estruturas anatômicas complexas, como é o caso dos tumores de próstata e de cabeça e pescoço. Essa moderna técnica conformacional já é aplicada nos tratamentos de tumores em vários hospitais nacionais, e citamos, como exemplo, o Hospital Sírio e Libanês, em São Paulo.

No entanto, em países como os Estados Unidos, a Alemanha e o Japão, a radioterapia com partículas pesadas carregadas, como prótons e íons de carbono, tem sido desenvolvida há vários anos e demonstra sucesso absoluto no tratamento localizado de tumores devido a deposição de energia característica dos feixes hadrônicos.

A Hadronterapia, modalidade de tratamento ainda desconhecida no Brasil, é o objeto desse trabalho. Nele apresentamos a física básica envolvida no fenômeno da perda de energia dos projéteis, revisamos a dedução da conhecida fórmula de Bethe-Bloch e, utilizando uma aproximação semi-clássica para obtenção da seção de choque da reação, obtemos os efeitos de uma interação nuclear considerada como uma perturbação à interação coulombiana dominante. Aplicamos também o modelo estatístico de Goldhaber para o cálculo dos efeitos da fragmentação nuclear induzida pelo projétil e, partindo de conceitos utilizados em astrofísica, calculamos a taxa de reação para estimar, quantitativamente, a influência da temperatura na região do tumor neste processo.

Sumário

1	<i>Introdução</i>	3
1.1	Radiações	5
1.1.1	Radiação Ionizante	6
1.1.2	Efeitos Biológicos das Radiações Ionizantes	7
1.2	Radioterapia : Visão Geral	10
1.2.1	Processos da Radioterapia	11
1.2.2	Prescrição	14
1.2.3	Planejamento do Tratamento	15
2	<i>Hadronterapia</i>	19
2.1	Introdução	19
2.2	Vantagens físicas e radiobiológicas dos feixes de partículas	20
2.3	Aplicação Clínica	20
2.4	Resultados dos Tratamentos	22
3	<i>Equação de Bethe-Bloch</i>	30
3.1	Introdução	30
3.2	Niels Bohr e Hans Bethe: abordagens clássica e quântica da equação da perda de energia	31
3.3	Teoria Quântica de Espalhamento Dependente do Tempo	33
3.4	Formulação de Bethe: <i>Espalhamento Inelástico Interação Elétron-Átomo</i>	46
4	<i>Potencial de Coulomb: Alcance Infinito</i>	58
4.1	Introdução	58
4.2	Teoria de Espalhamento Clássica	59
4.2.1	Seção de Choque Clássica	63
4.2.2	Espalhamento de Coulomb Elástico - <i>Rutherford</i>	65

5	<i>Potencial Nuclear: Perturbação na Interação de Coulomb</i>	70
5.1	Abordagem Geral Semi-Clássica	70
5.2	Aplicação: <i>Perturbação por um Potencial Nuclear</i>	78
6	<i>Influência de $\delta\Theta$ na Fórmula de Bethe-Bloch</i>	84
7	<i>Fragmentação Nuclear e Taxa de Reação</i>	90
7.1	Introdução	90
7.2	Abordagem Estatística	91
7.2.1	Modelo Estatístico de Goldhaber	92
7.2.2	Alguns resultados interessantes:	96
7.3	Taxa de Reação	97
8	<i>Conclusões</i>	100

Capítulo 1

Introdução

A sensibilidade dos tecidos biológicos à radiação ionizante é conhecida desde 1895 [1] quando Röntgen, na época professor de Física da Universidade de Würzburg na Alemanha, pesquisando sobre descargas elétricas em tubos de raios catódicos, descobriu os raios-X e seus efeitos de interação através, entre outros, da radiografia da mão de sua esposa. Logo após, em 1896, Henry Becquerel descobre a Radioatividade, fato que marca o início histórico da Física Nuclear [2].

Estudos teóricos sobre o *Stopping Power* (ou seja, a quantidade de perda de energia por unidade de comprimento da trajetória) dos íons ao atravessar um material, na época de Bohr, Thomson e Rutheford, foi motivado pela necessidade de entender o processo de “freamento” dos íons para obter informações sobre a natureza dos átomos em estudo na época.

Essas análises teóricas começaram com os conhecidos e bem estruturados métodos clássicos [3], mas posteriormente desenvolveram-se análises quânticas [4, 5] e atualmente os códigos e simulações computacionais nos fornecem uma boa estimativa de comparação entre os dados experimentais e as explicações teóricas.

Atualmente, essas informações são importantes na área de ciência dos materiais (em análises sobre implantação de íons), medicina e muitos outros e muitas modificações no formalismo da teoria de Bethe-Bloch foram implementadas desde então, de acordo com a complexidade dos dados experimentais que apareceram no decorrer de décadas.

Desde então, pesquisas científicas são constantemente realizadas e a utilização da radiação ionizante para diversos fins, em particular na Medicina,

tem sido aprimorada.

Atualmente a radiação ionizante é aplicada em Medicina não somente para fins terapêuticos, como outrora, mas também é essencial na obtenção de imagens médicas (por exemplo, os raios- X na obtenção de imagens anatômicas e os radiofármacos em imagens funcionais) através das técnicas tomográficas CT, SPECT e PET¹ para diagnóstico, planejamento de tratamento em radioterapia e pesquisas sobre o funcionamento de órgãos, principalmente do cérebro, através das técnicas de ressonância magnética funcional.

Graças ao desenvolvimento desses modernos métodos de diagnóstico, as neoplasias são detectadas mais cedo, antes de gerar metástase, possibilitando deste modo adoção de formas de tratamento loco-regionais, ou seja somente cirurgia ou radioterapia.

Inicialmente utilizava-se em Radioterapia os raios- γ e os elétrons (Radioterapia Convencional) provenientes de fontes radioativas e de aceleradores lineares menos sofisticados.

A desvantagem dos raios- γ e dos elétrons se baseia no fato que eles depositam a maior parte de sua energia perto da superfície do corpo humano, dificultando a irradiação de regiões mais profundas ou de regiões estruturalmente complexas.

Atingir uma conformação máxima da dose de radiação restrita ao tecido alvo aumenta a probabilidade de esterelização do tumor, além de preservar os tecidos adjacentes e órgãos vitais saudáveis melhorando a qualidade de vida dos pacientes.

Para reduzir a “*dose de superfície*” no tratamento é necessário mover (girar) ou o paciente ou a fonte de radiação para assim distribuir de modo satisfatório a dose superficial e não causar danos às áreas saudáveis, adjacentes ao tecido alvo. Nesse princípio se baseiam as mais modernas técnicas de radioterapia, como a 3DCRT e IMRT².

Uma opção adicional de tratamento surgiu em 1945 quando Robert Wilson [6] sugeriu o uso de *partículas pesadas carregadas*, em particular os *prótons*, que devido a uma curva de perda de energia muito satisfatória no

¹Computer Tomography, Single Particle Emission Computer Tomography, Positron Emission Tomography, respectivamente

²“Three dimensional (3D) Conformal Radiationtherapy” e “Intensity Modulated Radiationtherapy”, respectivamente.

canal de entrada do feixe culminando no Pico de Bragg (um máximo de perda de energia no final da trajetória do projétil) e aos seus efeitos biológicos, se mostrou eficaz no tratamento de tumores mais profundos e radioresistentes.

Motivados pela beleza presente nos fenômenos de reações nucleares e em todo o benefício que as pesquisas em Física Nuclear trouxeram para o universo da Medicina, pretendemos nesse trabalho fornecer uma visão geral sobre as características desse tipo de tratamento, chamado *Hadronterapia* e, em particular no caso da hadronterapia com prótons (*Protonterapia*) nos aprofundar em cálculos que forneçam uma visão teórica mais detalhada dos efeitos da fragmentação nuclear decorrentes das interações entre o próton incidente e os núcleos dos elementos componentes dos tecidos biológicos (^{16}O , ^{12}C etc). E, tendo em vista os avanços tecnológicos na elaboração de equipamentos hospitalares cada vez mais sofisticados, analisar o papel desempenhado, durante todo o processo, pela temperatura do corpo humano através do cálculo das *taxas de reação* presentes.

Apesar das dificuldades de cálculo e da abrangência do assunto, como disse Fernando Pessoa, *“Deus quer, o homem sonha, a obra nasce... Quem quer passar além do Bojador tem que passar além da dor. Deus ao mar o perigo e o abismo deu, mas nele é que espelhou o céu.*

Portanto, sem receios dos vários “perigos”, embarquemos nessa viagem pelo “mar” de benefícios das Terapias com Radiação.

1.1 Radiações

Radiação é “*energia em trânsito*”, feixes energéticos emitidos por uma fonte e transmitidos através do vácuo ou, no nosso caso, através de meios materiais, como o corpo humano, depositando neles sua energia e que são classificados basicamente em [2]:

- **Radiações corpusculares:** feixes energéticos de partículas emitidas espontaneamente de núcleos instáveis como as partículas- α , elétrons (β^-) e pósitrons (β^+) ou produzidas por aceleradores e reatores nucleares como os prótons, nêutrons e íons mais pesados;
- **Radiações ondulatórias (ou eletromagnéticas):** feixes energéticos de ondas eletromagnéticas como os fótons de raios-X (produzidos quando

Tabela 1.1: Espectro Eletromagnético

Região	$\lambda(\text{\AA})$	$\lambda(\text{cm})$	$\nu(\text{Hz})$	$E(\text{eV})$
<i>Rádio</i>	$> 10^9$	> 10	$< 3 \times 10^9$	$< 10^{-5}$
<i>Micro-ondas</i>	$10^9 - 10^6$	$10 - 0.01$	$3 \times 10^9 - 3 \times 10^{12}$	$10^{-5} - 0.01$
<i>Infra-vermelho</i>	$10^6 - 7000$	$0.01 - 7 \times 10^{-5}$	$3 \times 10^{12} - 4.3 \times 10^{14}$	$0.01 - 2$
<i>Luz Visível</i>	$7000 - 4000$	$7 \times 10^{-5} - 4 \times 10^{-5}$	$4.3 \times 10^{14} - 7.5 \times 10^{14}$	$2 - 3$
<i>Ultravioleta</i>	$4000 - 10$	$4 \times 10^{-5} - 10^{-7}$	$7.5 \times 10^{14} - 3 \times 10^{17}$	$3 - 10^3$
<i>Raios-X</i>	$10 - 0.1$	$10^{-7} - 10^{-9}$	$3 \times 10^{17} - 3 \times 10^{19}$	$10^3 - 10^5$
<i>Raios-γ</i>	< 0.1	$< 10^{-9}$	$> 3 \times 10^{19}$	$> 10^5$

elétrons de alta energia colidem com um metal) e raios- γ (emitidos espontaneamente por alguns núcleos radioativos, chamados *Radioisótopos*);

No caso da radiação eletromagnética, seu espectro de radiação é bem conhecido, vide Fig. 1.1, e consistentemente explicado pela teoria proposta nas equações de Maxwell do Eletromagnetismo.

1.1.1 Radiação Ionizante

O termo *radiação ionizante* se refere a partículas capazes de produzir ionização em um meio, ou seja as partículas devem ter energia suficiente para “arrancar” elétron de um átomo³, formando o par íon positivo - íon negativo (β^-), ou de quebrar uma molécula (energia necessária da ordem de 5 a 7 eV), formando íons moleculares positivo e negativo [2].

De acordo com o tipo de partículas envolvidas, podemos classificar as radiações ionizantes como [2]:

³A energia necessária varia de intensidade para cada átomo

Figura 1.1: *Espectro da Radiação Eletromagnética*. Ver Tabela 1.1

- **Diretamente ionizantes:** partículas carregadas como elétrons, pósitrons, prótons, partículas- α e íons mais pesados;
- **Indiretamente ionizantes:** partículas não carregadas como fótons e nêutrons;

O limiar de energia abaixo do qual a radiação não é mais ionizante depende da aplicação, sendo que em Radiobiologia adota-se o valor de energia de $E = 12,4 \text{ eV}$.

1.1.2 Efeitos Biológicos das Radiações Ionizantes

As radiações ionizantes, diretas ou indiretas, agem no nosso organismo seguindo uma sequência de estágios em intervalos de tempo previamente determinados [2], a saber:

- 1º **Estágio Físico** com duração de aproximadamente 10^{-15} s , intervalo de tempo onde ocorrem as ionizações e as excitações dos átomos que constituem as moléculas;

- 2º **Estágio Físico-Químico** com duração de 10^{-6} s, logo após o estágio físico, quando ocorrem as quebras das ligações químicas da molécula (consequência da ionização de um de seus átomos);
- 3º **Estágio Químico** com duração de poucos segundos, quando os fragmentos quebrados das moléculas, originados no processo anterior, se ligam a moléculas importantes de proteína ou enzima;
- 4º **Estágio Biológico** com duração de dias, semanas ou anos, quando surgem efeitos bioquímicos ou fisiológicos que produzem alterações morfológicas e/ou funcionais de órgãos.

Após seguirem essa sequência de estágios, os efeitos biológicos se classificam quanto ao seu mecanismo de ação e quanto à sua natureza do seguinte modo:

- **Mecanismos de Ação dos Efeitos Biológicos:**

- i) **Direto:** quando a radiação age diretamente em moléculas importantes, como por exemplo o DNA (macromoléculas portadoras de informação genética) e os cromossomos do núcleo celular. Os danos ao DNA geram *anormalidades* nos cromossomos chamadas de *mutação* ou *aberração cromossômica*. A quebra nas duas fitas do DNA são as lesões mais importantes para produção de mutações e a ocorrência de mutações pode ser medida quantitativamente em função da dose de radiação ionizante;
- ii) **Indireto:** quando a radiação age na molécula de água, quebrando-a⁴, e produzindo componentes reativos como os *radicais livres*⁵;

- **Natureza dos Efeitos Biológicos:**

- a) **Determinísticos:** surgem quando a radiação causa ou a *morte* de um grande número de células de um dado tecido ou órgão ocasionando seu mal funcionamento ou perda de função, ou *reações inflamatórias* que podem modificar a permeabilidade das células e tecidos. São efeitos a curto prazo. A severidade do efeito é função

⁴Processo conhecido como *Radiólise*

⁵Radicais Livres são componentes reativos com número ímpar de elétrons

da dose, ou seja, quanto maior a dose de radiação maior será sua gravidade. Há um limiar de dose, que varia de acordo com o tecido envolvido, para o surgimento de efeito determinístico, ou seja abaixo de determinada dose, o número de células danificadas é pequeno de modo que o organismo não se resente. Esses efeitos surgem em tempos cada vez menores após a exposição à altas doses de radiação, o que acontecem em geral em acidentes nucleares e radiobiológicos ou mesmo na radioterapia.

- b) **Estocásticos:** são alterações que surgem nas células normais. São efeitos probabilísticos, por isso não aparecem em todas as pessoas irradiadas, e são sempre tardios (neste caso, temos o chamado *tempo de latência*, que corresponde ao período entre a exposição e a detecção do câncer). A probabilidade de ocorrência desses efeitos nas células aumenta proporcionalmente à intensidade da dose de radiação. Os principais são:
 - b.1) **Efeito Carcinogênico:** ocorre nas células somáticas;
 - b.2) **Efeito Hereditário:** resultam de mutação genética e aberração cromossômica nas células germinativas que pode ser repassado aos descendentes da pessoa irradiada;

Um paciente diagnosticado com câncer será considerado curado se não houver indício de recorrência do tumor primário ou metástase por 5 anos após o tratamento.

Em Radioterapia o parâmetro mais importante é a *dose absorvida*, ou seja a energia depositada por unidade de massa, cuja unidade é o Gray (Gy)⁶. A *dose total* é fornecida em pequenas frações de 2 – 4Gy por sessão.

O objetivo da radiação é tornar a célula cancerosa estéril⁷. As células cancerosas têm como característica uma reprodução acelerada e é na fase conhecida como *mitose*, que os danos às moléculas do DNA celular são decisivos.

Ao atravessar uma célula, a radiação ionizante causará danos às suas moléculas diretamente, através da ionização e/ou excitação, ou indiretamente

⁶ $1 \text{ Gy} = 1 \frac{\text{Joule}}{\text{Kg}} = 6.24 \times 10^{12} \frac{\text{MeV}}{\text{Kg}}$

⁷ A morte celular pode ocorrer devido à falência reprodutiva, necrose e apoptose. Para maiores detalhes ver [2]

pela produção de radicais livres que podem percorrer $\approx 1nm$ antes de interagir com as moléculas.

Uma estimativa da dimensão dos alvos biológicos é de $5 - 10nm$, sendo o diâmetro da célula em torno de $20\mu m$, o diâmetro do núcleo celular em torno de $6\mu m$ e o comprimento total do DNA humano de $1.8m$ (o diâmetro da hélice do DNA gira em torno de $2nm$).

Para obter o efeito desejado, a densidade de ionização deve se manter em torno de $100KeV/\mu m$, valor que coincide com uma distância média de $2nm$ entre dois eventos (ionizações), assumindo a energia por evento de aproximadamente $200eV$. Note que $2nm$ é a distância entre duas fitas de DNA.

Por outro lado, caso a densidade de ionização seja muito superior ao valor anterior, a probabilidade de morte celular por energia depositada decresce (ou seja, energia é desperdiçada em outros eventos que fogem do objetivo inicial).

Prótons com energia variando entre $\approx 0.5MeV$ e $250MeV$ têm densidade de ionização baixa. Por exemplo, prótons de $200MeV$ têm perda de energia média de $4.5MeV/cm$ na água. Isso implica que para fornecer $1Gy$ ao tecido biológico (basicamente composto de água) são necessários $\approx 1.4 \times 10^9$ prótons por cm^2 .

1.2 Radioterapia : Visão Geral

Radiooncologia é a disciplina clínica e científica dedicada ao direcionamento ou gerenciamento de radiação ionizante, combinada ou não com outras modalidades de tratamento, aos pacientes com câncer e outras doenças, mas também é responsável pela investigação das bases biológicas e físicas da Radioterapia e pelo treinamento de profissionais na área [16].

Radioterapia é uma modalidade clínica que trata do uso de radiações ionizantes no tratamento de pacientes com neoplasias malignas ou, ocasionalmente, benignas.

Tem como objetivo fornecer uma dose precisa de radiação à um volume definido de tumor com o mínimo de dano possível ao tecido sadio adjacente, buscando a erradicação do tumor, alta qualidade de vida e prolongamento de sobrevida.

Além do enfoque curativo, a Radioterapia também pode ser utilizada como um tratamento paliativo aos pacientes sem esperança de sobreviver por longo tempo na prevenção de sintomas decorrentes da doença tais como, dores e preservação do tecido ósseo e das funções orgânicas.

1.2.1 Processos da Radioterapia

O emprego da radiação ionizante nos serviços de radioterapia tem como finalidade precípua o *tratamento de tumores malignos*.

O princípio básico da ação da radiação sobre um tecido tumoral é a *ionização* que, direta ou indiretamente, é sofrida pelos seus átomos ou moléculas com conseqüente destruição das células malignas.

Como foi dito anteriormente, uma das maiores preocupações que se tem ao se utilizar o tratamento com a radioterapia é *maximizar o dano no tecido tumoral, preservando ao máximo, os tecidos vizinhos normais*. Isto é conseguido adequando-se devidamente a técnica de radiação ao caso específico, sendo que muitas vezes torna-se inevitável, o dano ao tecido normal.

O advento de novas fontes de radiação de características físicas e biológicas próprias (como os *hadrons*), e o conhecimento do modo pelo qual estas interagem com as células vivas, possibilitou novos métodos de tratamento em que a concentração de radiação no tecido tumoral é maior e menos danosa ao tecido sadio.

O tratamento radioterápico possui, basicamente, dois grandes grupos a saber:

1. **Teleterapia:** “*tele*” significa distância. Nesta categoria enquadram-se os feixes de raios-*X*, os feixes de raios- γ , os elétrons de alta energia, prótons etc. Esses feixes são utilizados através de dispositivo, contendo em seu interior uma fonte de radiação que, colocados aproximadamente há 1 metro de distância do paciente promovem a irradiação do volume alvo (ver Figura 1.3). Em teleterapia, o *risco ocupacional* é pequeno uma vez que, ao serem expostos, os pacientes ficam isolados, em sala blindada.

2. **Braquiterapia:** "*braqui*" significa curto, perto. A braquiterapia é um método de terapia no qual, uma ou várias fontes encapsuladas são utilizadas para liberar radiação alfa ou beta, a uma distância de poucos centímetros, através de aplicações intersticiais, intracavitárias ou superficiais (ver Figura 1.2). Em alguns casos, a braquiterapia torna-se o método de eleição, em razão da proximidade com a massa tumoral, diminuindo o risco de se aplicar uma dose inaceitável nos tecidos são adjacentes. Com relação a intensidade da fonte, a braquiterapia trabalha com Baixa Taxa de Dose (BTD) e Alta Taxa de Dose (ATD)⁸. Na BTD, a fonte permanece no paciente por períodos que vão de dias até os implantes permanentes, dependendo do tipo e localização do tumor e também da atividade da fonte. O advento de equipamentos modernos de ATD, que são adequados para alguns tipos de tumores, causou uma redução substancial do tempo de tratamento. Quanto ao tipo de carregamento, os equipamentos podem ser *manuals* ou *pneumáticos*. Os de carregamento manual, requerem treinamento específico do pessoal de enfermagem e técnicos uma vez que estarão diretamente em contato com a fonte. Já nos equipamentos pneumáticos, o carregamento é feito à distância, sendo os riscos de exposição ocupacional bastante reduzidos.

A utilização clínica da radiação ionizante é um processo complexo que envolve diferentes profissionais e uma variedade de funções interrelacionadas.

Primeiramente, deve-se definir o objetivo da terapia, ou seja, trata-se de terapia paliativa ou curativa.

- **Terapia Curativa:** é projetado que o paciente tenha uma probabilidade, mesmo que pequena, de sobrevida longa depois do tratamento.
- **Terapia Paliativa:** é recomendada se, na avaliação do médico, o paciente não dispõem de muito tempo de vida devido à gravidade ou adiantamento da doença. Deste modo pode-se amenizar sintomas de desconforto, como as dores por exemplo.

Uma probabilidade pequena de efeitos colaterais, mesmo que indesejável, é aceita nas terapias curativas. Entretanto, o mesmo não é generalizado para

⁸A diferença reside no tempo de exposição

Figura 1.2: *Braquiterapia com sementes de Iodo-125*. Imagem cedida gentilmente pelo Serviço de Radioterapia - Centro de Oncologia do Hospital Sírio e Libanês - SP.

os tratamentos paliativos, onde maiores condições iatrogênicas⁹ não são mais suportadas. Por exemplo: irradiação de medula pode ocasionar paralisia e do sistema nervoso central pode ocasionar cegueira.

Mesmo na palição é necessário fornecer altas doses de radiação (75% à 80% da dose de cura) para controlar o tumor durante o período de sobrevivência do paciente.

Nas terapias com intenção radical (*curativas*) é **extremamente importante** que o radioterapeuta planeje o tratamento de modo a fornecer a maior dose possível de radiação ao volume do tumor para assegurar ao máximo o controle da doença e, concomitantemente, manter o menor nível possível de dose nos tecidos sadios adjacentes.

⁹Iatrogenia significa “erro médico”

Figura 1.3: *Radioterapia Convencional 2D* (baseada em imagens de Raio-X) e *Radioterapia Conformacionada 3D* (baseada em imagens de Tomografia Computadorizada). Imagens cedidas gentilmente pelo Serviço de Radioterapia - Centro de Oncologia do Hospital Sirio e Libanês - SP.

1.2.2 Prescrição

A prescrição de Radioterapia no tratamento do câncer é baseada nos seguintes princípios:

1. Verificação da extensão do tumor (*"Estadiamento"*);
2. Características patológicas da doença e também das áreas de extensão; isso influi diretamente na escolha do tipo de tratamento;
3. Definição da meta de terapia (*"Cura"* ou *"Palição"*);
4. Selecionar modalidades de tratamento apropriadas, por exemplo: somente irradiação ou irradiação combinada com outras técnicas como quimioterapia, cirurgia, etc. Essa escolha tem impacto significativo no volume tratado e nas doses de radiação fornecidas;
5. Determinação do volume tratado e da dose de radiação optimal de acordo com a localização anatômica, tipo histológico, estágio, envolvimento regional de "nodos" (sistema linfático) e de outras características do tumor e das estruturas normais presentes em sua região;

Figura 1.4: *Relação entre as taxas de cura e os métodos de tratamento. Nos tumores localizados enfatizamos o uso de prótons e íons nas terapias com radiação.* Imagem extraída do site www.gsi.de

6. Avaliação periódica das condições gerais do paciente, como a resposta biológica do tumor ao tratamento e o “status” dos tecidos normais eventualmente irradiados.

Salientamos que, apesar do trabalho conjunto, nos departamentos de Radioterapia dos hospitais, de médicos radioterapeutas, físicos, dosimetristas e técnicos, **as decisões sobre o tipo tratamento e técnicas de terapia a serem utilizadas, assim como suas conseqüências, é de integral responsabilidade do médico radioterapeuta.** Mesmo com o desenvolvimento tecnológico atual, a perícia médica nunca será completamente descartada nesta modalidade de tratamento.

1.2.3 Planejamento do Tratamento

Devido à complexidade estrutural, diferentes doses de radiação são necessárias para diferentes probabilidades de controle do tumor, dependendo do tipo e do número inicial das células clonogênicas presentes.

Portanto, doses variadas de radiação devem ser fornecidas às diferentes porções do tumor (periférica e central) e também nos casos em que todo o

tumor central (ou GTV - “Gross Tumor Volume”) foi cirurgicamente removido.

O volume clínico do tumor (CVT - “Clinical Tumor Volume”) pode ser dividido basicamente em três compartimentos:

1. Macroscópico (visível e/ou palpável);
2. Microextensões nos tecidos adjacentes;
3. Doença sub-clínica (ou seja, presumida estar presente mas não é detectável mesmo ao nível microscópico);

Observamos que, a *metástase* é considerada inicialmente ao nível sub-clínico. É uma doença sistêmica, ou seja, células cancerosas de algum modo passam para o sistema hematopoético (sanguíneo) e se instalam em diferentes partes ou órgãos do corpo humano.

A precisão da irradiação é periodicamente verificada pelos *portais*, que são filmes ou imagens on-line (*Eletronic Portal Imaging*).

Os *portais* de tratamento devem cobrir todas as áreas do tumor e adicionalmente ter um margem para compensar imprecisões geométricas durante a irradiação.

De acordo com o ICRU 50, os volumes de interesse em um planejamento de tratamento são definidos como na Figura 1.5:

- PTV ou “Planning Target Volume”- fornece uma margem em torno do CTV para permitir alguma variação na organização do tratamento e de movimentos anatômicos, como por exemplo a respiração, durante a irradiação;
- CTV ou “Clinical Tumor Volume”- composto pelo GTV e pelas regiões potenciais de doença microscópica;
- GTV ou “Gross Tumor Volume”- as dimensões exatas do GTV são fornecidas pelas imagens de CT¹⁰; além da região central do tumor, o GTV deve incluir os linfonodos regionais anormais;

Figura 1.5: *Volumes de interesse para o planejamento do tratamento.* Imagem cedida gentilmente pelo Serviço de Radioterapia - Centro de Oncologia do Hospital Sirio e Libanês - SP

Para verificação de estruturas sensíveis no volume irradiado e das doses máximas, assim como do fracionamento, depositadas em tal volume utiliza-se as imagens de simulação 3D da Tomografia Computadorizada.

Para um planejamento optimal deve-se considerar:

1. Definição volumétrica do tumor e da anatomia do paciente (dados obtidos com o CT Scanner);
2. Simulação virtual de organização do feixe e reconstrução digital das radiografias obtidas por CT;
3. Planejamento do tratamento 3D para cálculo de dose volumétrica e determinação do plano;
4. Demarcação *in loco* no paciente para ajuste dos *portais de tratamento*;
5. Simulação física para verificar localização do portal no paciente.

¹⁰Computer Tomography

Além disso, para uma distribuição de dose adequada, utilizam-se peças auxiliares como blocos de proteção (conhecidos como *chumbos*), moldes, máscaras e imobilizadores (como o *Vaclock*).

Enfim, nesta seção foi dada uma visão geral, muito simplificada, de como se procede o planejamento de um tratamento em Radioterapia. Esses conhecimentos foram obtidos após um estágio de pesquisa no Hospital Sírio e Libanês, em São Paulo, ao qual agradecemos a grande colaboração e parabenizamos pelo ótimo serviço prestado aos seus pacientes.

A seguir, entraremos especificamente no ramo da Radioterapia utilizando, não elétrons ou fótons mas, partículas pesadas carregadas, como prótons ou íons de carbono, modalidade de tratamento conhecida como *Hadronterapia*.

Capítulo 2

Hadronterapia

2.1 Introdução

No início do século passado, o físico dinamarquês Niels Bohr já estudava o comportamento exibido pelas partículas carregadas ao interagirem com a matéria [3] e discutia que estas perdiam energia através de suas colisões com os átomos do material.

Mais tarde, em meados dos anos 30, Bethe e Bloch [4, 5] obtém uma expressão para a perda de energia utilizando a, então inovadora, mecânica quântica e o modelo do gás de Fermi. E, em 1946, um artigo pioneiro do físico Robert Wilson [6] introduz a possibilidade de utilização de prótons de alta energia para fins terapêuticos.

Desde então, pesquisas utilizando partículas carregadas pesadas, como prótons e íons mais pesados, aumentou drasticamente apesar da radiação de partículas não ser uma experiência comum no nosso cotidiano (ao contrário da influência diária que sofremos proveniente da radiação eletromagnética [31]).

Este interesse é causado principalmente [35] pela aplicação de feixes de partículas em terapias de tumores e pela necessidade de estudos sobre proteção em vôos espaciais de longa duração, devido à influência dos raios cósmicos.

As partículas pesadas carregadas exibem um mecanismo de interação com a matéria diferente do comportamento exibido pela radiação eletromagnética, como os raios-X, γ ou *bremssstrahlung*.

No caso da radiação eletromagnética, a intensidade do feixe primário decresce exponencialmente com a penetração e não possui alcance finito. Além disso, o espalhamento lateral do feixe primário é grande devido ao espalhamento Compton e ao espalhamento dos elétrons secundários.

Cerca de 53.000 pacientes [36] foram tratados, desde meados do século XX, por feixes oriundos de aceleradores de partículas, principalmente dos centros de pesquisa em física básica. Ou seja, aceleradores que não são integralmente adaptados para uso médico.

Apesar destas limitações tecnológicas, obteve-se resultados extremamente positivos no tratamento de vários tipos de tumores, com percentagens de controle local e sobrevida muito maior do que os resultados obtidos com a radioterapia convencional.

2.2 Vantagens físicas e radiobiológicas dos feixes de partículas

Como foi mencionado anteriormente, existe uma diferença de comportamento no que se refere à interação com a matéria das partículas pesadas carregadas em comparação à interação por radiação eletromagnética.

Partículas pesadas carregadas ao penetrarem na matéria dissipam sua energia principalmente através de interações diretas com os elétrons do material alvo. Como a massa do projétil é muito maior que a massa do elétron, a deflexão do projétil é muito pequena e somente processos de múltiplas colisões podem causar uma deflexão substancial do feixe de partículas.

2.3 Aplicação Clínica

Uma melhor distribuição de dose pode ser obtida através da detecção on-line da localização do feixe através das reações com emissão de pósitron.

Comparado à radioterapia convencional, se o feixe de próton for depositado com precisão adequada, a dose total de radiação aos tecidos normais fora do volume-alvo pode ser reduzida por um fator de 2 – 5.

Figura 2.1: Comparação entre a dose biológica efetiva de fótons e de partículas pesadas carregadas. Imagem extraída do site www.gsi.de

Mas isso é muito difícil devido à heterogeneidade dos tecidos. O alcance de um feixe de partículas carregadas é relativamente insensível à composição química do tecido, mas, é afetado diretamente pela densidade do material atravessado, ou seja quanto maior a densidade do tecido, menor é a capacidade de penetração do feixe em questão [37].

Ao atravessar regiões com variações (descontinuidades) de densidade, um maior número de prótons será espalhado para fora de uma região de maior densidade do que para dentro desta região, resultando em uma *underdose* de radiação antes da região de alta densidade e à uma *overdose* de radiação antes de uma região com baixa densidade [38].

Na Tabela 2.1 temos alguns valores significativos.

Um dos métodos utilizados para determinar e/ou controlar a penetração do feixe, é a ativação *in vivo* de núclídeos emissores de pósitron, como o ^{15}O e o ^{11}C . A detecção de ^{15}O é bastante atrativa devido à abundância de oxigênio no organismo (65%), apesar da sua meia-vida ser de 2min. Por exemplo, a meia-vida do ^{11}C é de 20min mas em compensação a presença de carbono em nosso organismo é de apenas 18% .

Munidos do conhecimento da localização do feixe, os terapeutas podem

Tabela 2.1: Densidade dos Tecidos do Corpo Humano

Tecido	Densidade (g/cm^3)
Osso	1.2 – 1.85
Tecidos moles (músculos, órgãos)	1.0
Gordura	0.9
Ar/Gás	10^{-3}

atingir uma distribuição de dose mais adequada, pois a penetração do feixe pode ser controlada pela intensidade de sua energia ou mesmo colocando absorvedores modulados [37, 38] na superfície para forçar o término de sua atuação no local apropriado apesar das inomogeneidades do tecido ao longo de sua trajetória.

2.4 Resultados dos Tratamentos

Nesta seção, através de imagens obtidas por diferentes centros especializados no tratamento com partículas pesadas, ilustramos a atuação e os benefícios da irradiação com feixes de íons de carbono e prótons de diferentes tipos de tumor, como os tumores de próstata (Fig. 2.5), de cabeça e pescoço (Fig. 2.3) e pálpebra (Fig. 2.6).

Na Figura 2.8 pode-se ter uma noção, em termos continentais, dos diferentes centros de tratamento e pesquisa nessa área. A grande maioria se concentra na Europa. Na América do Sul não possuímos ainda este tipo de facilidade mas acreditamos que, no futuro, com o advento de novas tecnologias de aceleradores mais baratos, possamos enfim oferecer este tipo de tratamento aos nossos doentes.

Vale lembrar que pesquisas recentes mostram que, no Brasil, o câncer está em 2º lugar em número de óbitos, perdendo apenas para as doenças cardiovasculares.

Figura 2.2: Visualização do feixe dentro do paciente através de imagens originadas por PET. A figura da direita mostra a distribuição da atividade dos íons de carbono medida durante a irradiação. Uma comparação entre as duas imagens nos revela a precisão do planejamento do tratamento utilizando esta nova técnica. Imagem extraída do site www.gsi.de

O câncer de mama ocupa o primeiro lugar no ranking, com 31.590 casos. Em seguida vem o câncer de estômago, com 22.330, e o de pulmão fica em terceiro lugar, com 20.835 ocorrências. O câncer de próstata também é um dos mais preocupantes e está em quarto lugar, com 20.820 casos. O de colo de útero tem 16.270 ocorrências.

Embora o câncer de mama lidere o ranking do número de casos, o de pulmão está no topo da lista em número de óbitos. Somente no ano de 2005 foram estimados 15.145 mortos. Em seguida vêm as vítimas de tumores de estômago (10.765 mortos), mama (8.670 mortos), próstata (7.320 mortos) e intestino (7.230 mortos).

Enfim, nos capítulos anteriores, oferecemos uma visão geral da Hadronterapia, comparando-a com a Radioterapia Convencional e mostrando, por imagens, como se procede a intervenção dos feixes nos volumes de tratamento.

A partir do Capítulo 3 nos restringiremos ao estudo teórico quantitativo das interações dos feixes de partículas pesadas carregadas com a matéria.

Figura 2.3: Comparação entre o planejamento de tratamento de um tumor na base do crânio com fótons (imagem à esquerda, utilizando IMRT com quatro feixes de irradiação) e com íons de carbono (imagem à direita, utilizando dois campos de irradiação). Imagem extraída do site www.gsi.de

Figura 2.4: A figura mostra o retrocesso da doença em um paciente com tumor na base do crânio após seis meses de tratamento com irradiação por íons de carbono. Imagem extraída do site www.gsi.de

Figura 2.5: Comparação entre o Tratamento do câncer de próstata com feixe de fótons de raio-X e prótons. Nota-se a diferença na dose de radiação depositada no tumor e regiões adjacentes nos dois tipos de tratamento. Imagem cedida gentilmente pelo Prof. Dr. J.de Boer da Universidade de Munique, Alemanha.

Figura 2.6: *Etapas do tratamento com feixe de prótons de uma gata diagnosticada com tumor maligno na pálpebra superior direita: a foto acima à esquerda mostra o volume do tumor; à direita a gata encontra-se posicionada para irradiação com feixe de prótons, aplicado verticalmente para cima, realizado na Universidade de Munique; abaixo vemos a gata após um ano de tratamento. Fotos cedidas pelo Prof. Dr. J. de Boer da Universidade de Munique, Alemanha.*

Figura 2.7: Acima, foto da sala de Tratamento no Instituto Paul Scherer. Logo abaixo vemos o comportamento dos feixes ao interagir com o volume alvo: irradiação com feixe único e com vários feixes incidindo em diferentes direções. Paul Scherer Institut - PSI, Suíça.

Figura 2.8: *Centros de tratamento e pesquisa em Hadronterapia. Obtido do site neurosurgery.mgh.harvard.edu/hcl*

Tabela 2.2: Centros de Pesquisa e Tratamento

INSTITUIÇÃO	INFORMAÇÕES
NPTC(Harvard)	http:// www.mgh.harvard.edu/depts/nptc/nptc.htm
LLUMC	http://proton.llu.edu
University of Califórnia	http://crocker.ucdavis.edu/cnl/research/eyet.htm
MPRI	http://www.iucf.indiana.edu
National Association for Proton Therapy	http://www.proton-therapy.org
TRIUMF	http://www.triumf.ca/welcome
TRIUMF - pión	http://www.triumf.ca/welcome
CPO - Orsay	http://www-sop.inria.fr
PSI	http://www.psi.ch/
Proton Oncological Therapy, Project of the ISS	http://top.iss.infn.it
TERA foundation	http://www.tera.it
Catania	http://lnsuni2.lns.infn.it/ catana/
GSI	http://www.gsi.de
The Svedborg Laboratory	http://www.tsl.uu.se
Clatterbridge Centre for Oncology	http://synaptic.mvc.mcc.ac.uk
ITEP	http://www.protontherapy.itep.ru
Tsukuba	http://www-medical.kek.jp
HIMAC	http://www.nirs.go.jp/ENG/particl.htm
NAC	http://medrad.nac.ac.za/index.htm

Capítulo 3

Equação de Bethe-Bloch

3.1 Introdução

Nos capítulos anteriores vimos que, ao analisarmos a interação da radiação com a matéria em várias aplicações, em particular na terapia de tumores, estamos interessados principalmente na perda de energia sofrida pela partícula carregada por unidade de comprimento de sua trajetória ao penetrar o tecido biológico.

De acordo com ICRU49, o *Stopping Power* em um material é definido como a perda média de energia por unidade de comprimento da trajetória que uma partícula carregada sofre quando o atravessa como consequência das interações coulombianas entre os elétrons e os núcleos atômicos sendo influenciado por duas contribuições: o *Stopping Power Eletrônico* (maior contribuição devido às colisões inelásticas com os elétrons) e o *Stopping Power Nuclear* (contribuição bem menor, devido às colisões elásticas).

Nas colisões inelásticas a energia da partícula incidente, com carga Z_{proj} e, $e > 0$, varia de um estado inicial para um estado de energia final. Essa variação de energia é absorvida pelo elétron do átomo que compõem o alvo (de número atômico Z_{alvo}) levando o átomo a um estado de excitação ou ionizando-o.

Devido às suas diversas aplicações, tanto em áreas da física básica como da física aplicada, existe um contínuo interesse na obtenção de dados referentes ao *stopping power* e ao alcance de partículas carregadas pesadas.

Em particular, no Report ICRU49 podemos verificar tabelas de dados

obtidos com ênfase em materiais de interesse para radiologia e para a dosimetria biomédica, assim como uma descrição básica da teoria e dos métodos de medida dos *stopping powers* para prótons e partículas- α .

A abordagem quântica para obtenção do *stopping power* foi introduzida por Hans Bethe e Felix Bloch [20, 21], que consideraram, em sua análise, o formalismo da teoria de espalhamento quântica dependente do tempo no cálculo da seção de choque inelástica¹.

Adiante mostraremos a dedução da equação da perda de energia de Bethe-Bloch [20, 21, 24, 25].

3.2 Niels Bohr e Hans Bethe: abordagens clássica e quântica da equação da perda de energia

Uma partícula carregada incidindo na matéria colide com os elétrons e com os núcleos dos átomos-alvo.

As conseqüências dessas colisões variam de acordo com a massa da partícula.

Os elétrons atômicos recebem apreciáveis quantidades de energia da partícula incidente sem causar uma significativa deflexão do projétil; enquanto que os núcleos, por serem mais massivos, absorvem muito pouca energia do projétil mas por outro lado, devido à sua carga maior, causam o espalhamento da partícula incidente.

Portanto, a perda de energia de um projétil ocorre principalmente devido às colisões com os elétrons, e sua deflexão devido às interações com os núcleos atômicos em seu caminho de incidência.

Niels Bohr se interessou muito pelo estudo da interação de partículas com a matéria [26], e obteve uma expressão clássica (3.1) que descreve razoavelmente a perda de energia de partículas- α e núcleos mais pesados.

¹A abordagem clássica para obtenção da equação de perda de energia foi proposta inicialmente por Niels Bohr em 1913 [3] e uma comparação das teorias quântica e clássica pode ser vista em [25]

Suponha que existam N átomos por unidade de volume com Z elétrons em cada átomo [25]. Os Z elétrons podem ser divididos em grupos especificados pelo índice j , com f_j elétrons possuindo a mesma frequência w_j . Cada elétron portanto, neste modelo, é considerado como um oscilador harmônico. Cada oscilador j com amplitude de oscilação f_j e frequência w_j . As amplitudes de oscilação satisfazem a regra de adição $\sum_j f_j = Z$.

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_{\text{clássica}} = 4\pi N Z \frac{z^2 e^4}{m v^2} \left[\ln B_{\text{clássica}} - \frac{v^2}{2c^2} \right] \quad (3.1)$$

onde

$$B_{\text{clássica}} = 1.123 \frac{\gamma v}{< w > b_{\min}} = 1.123 \frac{\gamma^2 m v^3}{z e^2 < w >}$$

e $< w >$ é o valor médio da frequência calculado como

$$\ln < w > = \frac{1}{Z} \sum_j f_j \ln w_j$$

e $b_{\min} = \frac{z e^2}{\gamma m v^2}$

No entanto, ao analisar o comportamento de interação para elétrons, mésons, prótons e mesmo para partículas- α mais energéticas, a expressão (3.1) superestima a perda de energia consideravelmente, pois para partículas mais leves devemos considerar modificações quânticas que irão restringir o resultado clássico.

Os efeitos quânticos importantes são:

- A natureza discreta da transferência de energia;
- As limitações devido à natureza ondulatória das partículas e ao princípio de incerteza.

Mais detalhes podem ser obtidos na seção 13.3 da referência [25].

Levando em consideração os efeitos quânticos, principalmente no cálculo dos valores de parâmetros de impacto $b_{\min}$ e $b_{\max}$, Hans Bethe deduz, em 1930, uma expressão da seguinte forma:

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_{\text{quântica}} = 4\pi N Z \frac{z^2 e^4}{mv^2} \left[\ln \left(\frac{2\gamma^2 mv^2}{\hbar < w > } \right) - \frac{v^2}{c^2} \right] \quad (3.2)$$

Note que na expressão (3.2) considerou-se um $b_{\min}^{\text{quântico}} = \frac{\hbar}{\gamma mv}$. A razão entre os valores clássico e quântico de $b_{\min}$ será:

$$\eta = \frac{ze^2}{\hbar v}$$

conhecido como *parâmetro de Sommerfeld*.

Para $\eta > 1$, usamos o tratamento clássico de Bohr com a expressão (3.1). Isso ocorre no caso de partículas incidentes altamente carregadas mas relativamente lentas.

Para $\eta < 1$, temos $b_{\min}^{\text{quântico}} > b_{\min}^{\text{clássico}}$ os efeitos quânticos devem ser considerados, levando à equação (3.2).

Para partículas ultrarelativísticas, a perda de energia observada é menor do que a prevista pela equação (3.2), especialmente em substâncias muito densas. Os efeitos da densidade do meio foram tratados teoricamente por Fermi e mais detalhes sobre esse tópico podem ser obtidos na Seção 13.4 da referência [25].

3.3 Teoria Quântica de Espalhamento Dependente do Tempo

De modo geral, podemos desenvolver na mecânica quântica o formalismo teórico sobre espalhamento utilizando uma abordagem independente do tempo (que trata somente os casos de espalhamento elástico) ou dependente do tempo (que permite uma abordagem teórica de processos mais gerais).

Veremos que, com a condição de contorno apropriada para tratar os processos de espalhamento, chegaremos ao mesmo resultado obtido no formalismo independente do tempo, ou seja à equação de Lippmann-Schwinger.²

Os processos de espalhamento, assim como os fenômenos associados à emissão de radiação ou decaimento de partículas instáveis, apresentam uma hamiltoniana não perturbada H_0 com espectro contínuo e um termo perturbativo V independente do tempo.

Como estamos interessados em obter a expressão para o *stopping power* de uma partícula carregada, estaremos lidando basicamente com interações inelásticas.

Neste enfoque, o processo de espalhamento é concebido como uma transição de um estado estacionário inicial de partícula livre para um estado estacionário final, modificado pela presença de um potencial V .

Seja $|\psi; t\rangle$ uma solução da equação de Schrödinger dependente do tempo³:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) |\psi; t\rangle = 0. \quad (3.3)$$

A hamiltoniana $H = H_0 + V$ é independente do tempo, sendo H_0 a hamiltoniana não perturbada do sistema e V o termo de interação.

Note que a equação (3.3) é uma equação diferencial não homogênea.

Uma condição de contorno apropriada para a análise dos processos de espalhamento é que em tempos remotos, ou seja para $t \rightarrow -\infty$, a partícula é considerada livre.

Pode-se então dizer que, para tempos $t \ll 0$, $|\psi; t\rangle \Rightarrow |\psi_0; t\rangle$, sendo $|\psi_0; t\rangle$ solução da equação diferencial homogênea (3.4).

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) |\psi_0; t\rangle = 0. \quad (3.4)$$

²A teoria quântica formal de espalhamento é desenvolvida em vários livros textos. Neste trabalho utilizamos, essencialmente, as referências [9, 10, 20, 21, 24, 27, 28]

³Note que, no caso independente do tempo, a equação de Schrödinger é da forma $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

O estado $|\psi_0; t\rangle$ deve ser construído de forma a assegurar que em $t \approx 0$ os sistemas estejam no alcance um do outro.

Reescrevendo (3.3) temos:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) |\psi; t\rangle = V |\psi; t\rangle. \quad (3.5)$$

Para resolver (3.5) introduzimos o operador de Green tal que:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) G(t - t') = \delta(t - t'), \quad (3.6)$$

e, de acordo com a condição de contorno, devemos impor em $G(t - t')$ que a interação da partícula em t' tenha efeito somente para $t > t'$.

Assim, impomos a condição de contorno *retardada*

$$G_+(t - t') = 0 \quad \text{para} \quad t < t'$$

gerando uma solução para (3.5) da forma⁴

$$G_+(t - t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') \exp -\frac{i}{\hbar} H_0(t - t'). \quad (3.7)$$

Combinando as soluções homogênea e particular teremos como solução geral de (3.3)

$$|\psi^{(+)}; t\rangle = |\psi; t\rangle_0 + \int_{-\infty}^{+\infty} G_+(t - t') V |\psi^{(+)}; t'\rangle dt' \quad (3.8)$$

onde

⁴ $\theta(x)$ é conhecida como função degrau definida como

$$\theta(x) = \begin{matrix} 0 & x < 0 \\ 1 & x \geq 0 \end{matrix}$$

Note que $(d/dt)\theta(t) = \delta(t)$.

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) |\psi_0; t\rangle = 0.$$

A notação $|\psi^{(+)}; t\rangle$ utilizada em (3.8) mostra que a solução tende à partícula livre $|\psi_0; t\rangle$ para $t \rightarrow -\infty$ e, deste modo, existirão somente *ondas espalhadas emergentes*.

Como estamos interessados nos estados $|\psi^{(+)}; t\rangle$ que são autoestados da hamiltoniana H , podemos denotar esses autoestados por

$$|\psi^{(+)}; t\rangle = |\psi^{(+)}\rangle \exp\left(\frac{-iE_{\psi_0}}{\hbar}t\right). \quad (3.9)$$

Do mesmo modo que temos os autoestados de H_0

$$|\psi_0; t\rangle = |\psi_0\rangle \exp\left(\frac{-iE_{\psi_0}}{\hbar}t\right). \quad (3.10)$$

Note que, como estamos trabalhando com estados que pertencem a um espectro contínuo, devemos assumir o mesmo autovalor de energia E_{ψ_0} para ambos os autoestados.

Aplicando (3.9), (3.10) e (3.7) em (3.8) temos

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\psi_0\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 \exp\left[\frac{i}{\hbar}(H_0 - E_{\psi_0})t\right] V |\psi^{(+)}\rangle dt. \quad (3.11)$$

A integral na expressão (3.11) oscilaria indefinidamente se não fosse a hipótese de que o potencial V deve ser acionado adiabaticamente, ou seja bem lentamente, e para isso ele deve se comportar como

$$V \rightarrow \lim_{\epsilon \rightarrow 0} V \exp(\epsilon t).$$

Como consequência desta hipótese teremos:

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\psi_0\rangle - \frac{i}{\hbar} \lim_{t'' \rightarrow -\infty} \int_{-t''}^0 \exp \left[\frac{i}{\hbar} (H_0 - E_{\psi_0} - i\epsilon\hbar)t' \right] V |\psi^{(+)}\rangle dt'. \quad (3.12)$$

Resolvendo (3.12) obtemos

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\psi_0\rangle - \frac{1}{H_0 - E_{\psi_0} - i\epsilon\hbar} \left[1 - \lim_{t'' \rightarrow -\infty} \exp \left[\left(\frac{i}{\hbar} (H_0 - E_{\psi_0}) + \epsilon \right) t'' \right] \right] V |\psi^{(+)}\rangle. \quad (3.13)$$

Note que, na expressão (3.13), ao fazermos $t'' \rightarrow -\infty$ obtemos a *Equação de Lippmann-Schwinger* (3.14) análoga ao caso da formulação perturbativa independente do tempo dos processos de espalhamento⁵. Deste modo,

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\psi_0\rangle + \frac{1}{E_{\psi_0} - H_0 + i\epsilon\hbar} V |\psi^{(+)}\rangle. \quad (3.14)$$

Considerando que os autoestados $\{|\psi_0\rangle\}$ formam um conjunto completo de autoestados de H_0 , podemos então escrever, a partir da expressão (3.14) o seguinte:

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\psi_0\rangle + \sum_{\psi'_0} \frac{1}{E_{\psi_0} - E_{\psi'_0} + i\epsilon\hbar} |\psi'_0\rangle \langle\psi'_0| V |\psi^{(+)}\rangle. \quad (3.15)$$

⁵Para maiores detalhes, inclusive dos diferentes aspectos para escolha do termo ϵ nos dois formalismos, vide Capítulo 7 na referência [21]

Introduzimos o *operador de onda de Møller* [11], responsável pela transformação de estados de ondas livres em estados de espalhamento, ou seja,

$$\Omega^{(\pm)}|\psi_0\rangle = |\psi^{(\pm)}\rangle. \quad (3.16)$$

Substituindo (3.16) em (3.14) obtemos:

$$\Omega^{(+)}|\psi_0\rangle = [1 + G_0^+(E_{\psi_0}) V \Omega^{(+)}] |\psi_0\rangle. \quad (3.17)$$

A expressão (3.17) significa que o operador $\Omega^{(+)}$ e $[1 + G_0^+(E_{\psi_0}) V \Omega^{(+)}]$ produzem estados equivalentes quando agem em um estado de partícula livre com energia E_{ψ_0} . Note que usamos a notação $G_0^+(E_{\psi_0})$ para a função de Green da partícula livre.

Isso também pode ser expresso pela equação de Lippmann-Schwinger

$$\Omega^{(+)}(E_{\psi_0}) = 1 + G_0^+(E_{\psi_0}) V \Omega^{(+)}(E_{\psi_0}). \quad (3.18)$$

A notação $\Omega^{(+)}(E_{\psi_0})$ significa que operadores de onda de Møller são independentes do valor da energia, mas suas respectivas equações de Lippmann-Schwinger se aplicam somente nos espaço de estados com a energia específica E_{ψ_0} que aparece no argumento da função de Green.

Definindo o *operador de transição* $\mathbf{T}$ como

$$\mathbf{T} = V \Omega^{(+)}, \quad (3.19)$$

seus elementos de matriz serão da forma:

$$T_{\psi'_0, \psi_0} = \langle \psi'_0 | V | \psi^{(+)} \rangle = \langle \psi'_0 | \mathbf{T} | \psi_0 \rangle. \quad (3.20)$$

A *matriz de transição*, ou *matriz-T* (3.20), nos fornece a amplitude, ou probabilidade, de transição do autoestado inicial de H_0 , $|\psi_0\rangle$, para um autoestado de espalhamento de H_0 , $|\psi'_0\rangle$.

Substituindo (3.16) e (3.19) em (3.15) e usando (3.20) teremos:

$$\begin{aligned}
 |\psi^{(+)}\rangle &= |\psi_0\rangle + \sum_{\psi'_0} \frac{1}{E_{\psi_0} - E_{\psi'_0} + i\epsilon\hbar} |\psi'_0\rangle \langle\psi'_0| T_{\psi'_0, \psi_0} |\psi_0\rangle. \\
 &= \left(1 + \frac{1}{E_{\psi_0} - H_0 + i\epsilon\hbar} \mathbf{T}\right) |\psi_0\rangle.
 \end{aligned}
 \tag{3.21}$$

Escrevemos então uma equação para $\mathbf{T}$ em termos de V , usando (3.20) em (3.15), na forma

$$T_{\psi'_0, \psi_0} = V_{\psi'_0, \psi_0} + \sum_{\psi''_0} \frac{V_{\psi'_0, \psi''_0} T_{\psi''_0, \psi_0}}{E_{\psi_0} - E_{\psi''_0} + i\epsilon\hbar}
 \tag{3.22}$$

o que equivale a

$$\mathbf{T} = V + V \frac{1}{E_{\psi_0} - H_0 + i\epsilon\hbar} \mathbf{T}.
 \tag{3.23}$$

A solução iterativa para a matriz de transição $\mathbf{T}$ (3.23), considerando os termos de ordem superior, será:

$$\mathbf{T} = V + V \frac{1}{E_{\psi_0} - H_0 + i\epsilon\hbar} V + V \frac{1}{E_{\psi_0} - H_0 + i\epsilon\hbar} V \frac{1}{E_{\psi_0} - H_0 + i\epsilon\hbar} V + \dots
 \tag{3.24}$$

De posse da expressão (3.24) do operador de transição, substituindo em (3.20), obtemos a forma de seus elementos de matriz como:

$$T_{\psi'_0, \psi_0} = \langle\psi'_0|V|\psi_0\rangle + \langle\psi'_0|V \frac{1}{E_{\psi_0} - H_0 + i\epsilon\hbar} V|\psi_0\rangle + \dots
 \tag{3.25}$$

Assumimos agora que os estados não perturbados são autoestados normalizados, em uma caixa de lados com comprimento L , no espaço dos momentos, ou seja, $|\psi_0\rangle \Leftrightarrow |\mathbf{k}\rangle$ e $|\psi'_0\rangle \Leftrightarrow |\mathbf{k}'\rangle$.

Vamos lembrar que, pela teoria de espalhamento quântica não perturbativa e independente do tempo, definimos a *amplitude de espalhamento* $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ como:

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \psi_0(\mathbf{k}') | V | \psi^{(+)}(\mathbf{k}) \rangle, \quad (3.26)$$

assim como a *Seção de Choque de Espalhamento Elástico*, $\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{el}$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{el} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \quad (3.27)$$

Substituindo (3.16) na equação (3.26) obtemos:

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \psi_0(\mathbf{k}') | V | \Omega^{(+)} | \psi_0(\mathbf{k}) \rangle. \quad (3.28)$$

Note que se compararmos (3.28) com (3.25) temos uma expansão em séries da amplitude de espalhamento tal que:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \\ &= -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} T_{k', k}, \end{aligned} \quad (3.29)$$

onde n representa o número de vezes que o *operador potencial* V atua (Figura 3.1). Explicitamente podemos escrever:

Figura 3.1: *Interpretação Física do Termo de Segunda Ordem da Aproximação de Born* $f^{(2)}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$

$$f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle \quad (3.30)$$

$$f^{(2)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | V \frac{1}{E_{\psi_0} - H_0 + i\epsilon\hbar} V | \mathbf{k} \rangle \quad (3.31)$$

Note que, a abordagem adotada escrevendo a equação (3.21) com a introdução do operador de transição $\mathbf{T}$ em comparação com a formulação para obtenção da amplitude de espalhamento (3.26) são equivalentes.

No entanto, o operador de transição $\mathbf{T}$ nos permite aplicar, de forma mais elegante, a teoria de perturbação dependente do tempo para obter a amplitude de espalhamento e, deste modo, calcularmos a seção de choque da reação.

Voltando agora ao tratamento perturbativo, um objetivo importante desta abordagem do problema de condições iniciais (3.3) consiste no cálculo da *probabilidade de transição*, induzida por uma perturbação independente do tempo, de um estado estacionário não perturbado inicial para estados estacionários finais, também não perturbados, que fazem parte de um espectro contínuo ou quase-contínuo.

Começaremos com a dedução da expressão para a seção de choque de espalhamento elástico e em seguida faremos as modificações necessárias para obtenção da seção de choque de espalhamento inelástico.

A *Seção de Choque Quântica de Espalhamento Elástico* pode ser obtida da seguinte maneira:

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{inel} = \frac{1}{|\mathbf{J}_{inc}|} \frac{dW}{d\Omega}$$

onde W é a *probabilidade de transição por unidade de tempo* e

$$\mathbf{J}_{inc} = \frac{\hbar}{m_{proj}} \Im(\psi_{inc}^* \nabla \psi_{inc}) = \frac{v_{proj}}{L^3}$$

é o fluxo de partículas incidentes.

A *probabilidade de transição* de um estado $|\mathbf{k}\rangle$ para outro estado $|\mathbf{k}'\rangle$, com $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ mas $|\mathbf{k}| = k = k' = |\mathbf{k}'|$, $P(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')$, é obtida considerando as expressões (3.11), (3.21) e (3.24), pela expansão em série de Dyson da amplitude $c_{\mathbf{k}'}(t)$ tal que:

$$P(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = |c_{\mathbf{k}(0)}(t) + c_{\mathbf{k}(1)}(t) + c_{\mathbf{k}(2)}(t) + \dots|^2, \quad (3.32)$$

onde o termo de menor ordem não nulo será:

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}}^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \mathbf{k}' | V(t') | \mathbf{k} \rangle dt' \\ &= -\frac{i}{\hbar} V \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^t dt' \exp(\epsilon t') \exp(\omega_{k'k} t') \\ &= -\frac{i}{\hbar} V \frac{\exp(\epsilon t + i\omega_{k'k} t)}{\epsilon + i\omega_{k'k}}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Note que na amplitude dependente do tempo (3.33) introduzimos a *frequência de Bohr* do problema não perturbado

$$\omega_{k\ k'} \equiv \frac{E_k - E_{k'}}{\hbar}.$$

e lembrando da condição adiabática:

$$V \rightarrow \lim_{\epsilon \rightarrow 0} V \exp(\epsilon t).$$

Portanto, a probabilidade de transição de encontrar $|\mathbf{k}'\rangle$ no tempo t , em *primeira ordem de aproximação*⁶, será:

$$\begin{aligned} P(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') &\approx |c_k^1(t)|^2 \\ &= \frac{|\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2}{\hbar^2} \frac{\exp(2\epsilon t)}{\omega_{k\ k'}^2 + \epsilon^2} \end{aligned} \quad (3.34)$$

Temos então que a *taxa de transição* $W_{\mathbf{k} \rightarrow \{\mathbf{k}'\}}$ (a probabilidade de transição por unidade de tempo), para o conjunto de estados $\{\mathbf{k}'\}$, de um estado incidente de momento $\mathbf{k}$, será:

$$W_{\mathbf{k} \rightarrow \{\mathbf{k}'\}} = \frac{d}{dt} |c_k^1(t)|^2 = \frac{2\epsilon \exp(2\epsilon t)}{\omega_{k\ k'}^2 + \epsilon^2} \frac{|\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2}{\hbar^2}. \quad (3.35)$$

Para t finito, ou seja, no limite $\epsilon \rightarrow 0$, escrevemos a equação acima como⁷:

⁶A ação de um potencial externo sobre uma partícula, cujo momento inicial é suficientemente grande para que essa ação possa ser bem representada em primeira ordem de teoria de perturbações é uma aplicação importante da Regra Áurea de Fermi. Essa aproximação, para o problema de espalhamento, é conhecida como *Aproximação de Born*.

⁷Usamos nesta passagem o resultado:

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2}. \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned}
W_{\mathbf{k} \rightarrow \{\mathbf{k}'\}} &\approx \frac{2\pi}{\hbar^2} \delta(\omega_k - \omega_{k'}) |\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2 \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_k - E_{k'}) |\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2.
\end{aligned}
\tag{3.37}$$

A função δ representa a conservação da energia⁸.

Por outro lado, a expressão (3.37) pode ser re-escrita como:

$$W_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = \int d\Omega_{\mathbf{k}'} \frac{dW}{d\Omega_{\mathbf{k}'}} , \tag{3.38}$$

sendo $\int d\Omega_{\mathbf{k}'}$ a integral sobre os ângulos que definem a direção do momento final $\mathbf{k}'$ e $\frac{dW}{d\Omega_{\mathbf{k}'}}$ fornece a *distribuição angular* da probabilidade de transição total $W_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}$.

De fato, como as transições ocorrem em espectro de energia contínuo (ou quase-contínuo), podemos integrar (3.37) no espaço dos momentos, lembrando da quantização de caixa da função de onda plana com a condição de completeza no contínuo dada por:

$$1 = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \int d^3k |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|.$$

Deste modo,

⁸A expressão (3.37) é uma forma alternativa de escrevermos a *Regra Áurea de Fermi*. De fato, no tratamento perturbativo do espalhamento de um feixe de partículas por um potencial, no qual o hamiltoniano não perturbado é o hamiltoniano livre, o espectro de estados finais não perturbados é denso e fortemente degenerado. Deste modo, os elementos da matriz de transição $T_{k',k}$ dependerão muito fracamente da energia. Para maiores detalhes vide Referência [28], *Métodos de Aproximação*.

$$\begin{aligned}
\frac{dW}{d\Omega_{\mathbf{k}'}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \int (k')^2 dk' \delta(E_k - E_{k'}) |\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2 \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \int (k')^2 dk' \delta \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 (k')^2}{2m} \right) |\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2 \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \left(\frac{k' m}{\hbar^2} \right) |\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2.
\end{aligned} \tag{3.39}$$

No cálculo da integral acima lembrar que $k^2 dk = d \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \frac{2m}{\hbar^2} \frac{k}{2}$.

Finalmente, a *Seção de Choque de Espalhamento Elástico* será da forma:

$$\begin{aligned}
\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{inel} &= \frac{1}{|J_{inc}|} \frac{dW}{d\Omega} \\
&= \left(\frac{k'}{k} \right) \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle \right|^2 \\
&= |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2,
\end{aligned} \tag{3.40}$$

já que $k = k'$ mas lembrando que $\hat{\mathbf{k}} \neq \hat{\mathbf{k}}'$.

A seção de choque de espalhamento inelástico pode ser obtida facilmente a partir da discussão até agora apresentada.

Neste caso, temos que especificar o estado quântico do átomo tanto no estado inicial da partícula incidente quanto no seu estado final. Definimos estes estados $|\mathbf{k}, 0\rangle$ e $|\mathbf{k}', n\rangle$, respectivamente, onde $|n\rangle$ é o estado quântico do átomo em questão.

Deste modo, teremos pela conservação de energia, $E_k = E_{k'} + I$ onde I é a energia de ionização do átomo dada pela diferença $I \equiv E_n - E_0$, E_n representando a energia do estado excitado $|n\rangle$.

Assim a seção de choque inelástica, de acordo com a expressão (3.40), seria:

$$\begin{aligned}
\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{inel} &= \frac{1}{|J_{inc}|} \frac{dW}{d\Omega} \\
&= \left(\frac{k'}{k} \right) \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}', n | V' | \mathbf{k}, 0 \rangle \right|^2
\end{aligned}
\tag{3.41}$$

onde V' é a interação responsável pela transição inelástica.

Aplicaremos na próxima seção a equação (3.41) na dedução da fórmula de perda de energia de Bethe Bloch.

3.4 Formulação de Bethe: *Espalhamento Inelástico* *Interação Elétron-Átomo*

Apresentamos, nesta seção, as considerações de Hans Bethe para a obtenção da equação (3.2)⁹

Pensemos nas interações de um feixe de elétrons com átomos (alvo) no estado fundamental. Existem duas possibilidades de eventos a ocorrer:

- 1 *Espalhamento Elástico*: espalhamento elástico do elétron incidente SEM excitação do átomo-alvo:

$$e^- + \text{átomo}(\text{estado fundamental}) \Rightarrow e^- + \text{átomo}(\text{estado fundamental})$$

- 2 *Espalhamento Inelástico*: espalhamento do elétron incidente (energia cinética do elétron espalhado é menor do que a do elétron incidente) COM excitação (ionização) do átomo-alvo:

$$e^- + \text{átomo}(\text{estado fundamental}) \Rightarrow e^- + \text{átomo}(\text{estado excitado})$$

⁹Originalmente vide referência [20]

Nos restringiremos a analisar o segundo caso.

O sistema inicial $e^- + \text{átomo}(\text{estado fundamental})$ pode ser representado por $|\mathbf{k}, 0\rangle$, onde $\mathbf{k}$ refere-se ao vetor de onda do elétron incidente e $|0\rangle$ ao estado fundamental do átomo-alvo.

De acordo com o modelo do gás de Fermi (normalização considerando uma caixa de volume L^3), podemos escrever a função de onda normalizada correspondente à $|\mathbf{k}, 0\rangle$ como:

$$|\mathbf{k}, 0\rangle \Longleftrightarrow \frac{1}{L^{3/2}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \psi_0$$

Analogamente, supondo um elétron com vetor de onda final $\mathbf{k}'$ e a excitação do átomo-alvo para um estado $|n\rangle$, a função de onda normalizada final do sistema pode ser escrita como¹⁰:

$$|\mathbf{k}', n\rangle \Longleftrightarrow \frac{1}{L^{3/2}} \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) \psi_n$$

As **energias inicial e final do átomo-alvo** são E_0 e E_n respectivamente.

Os **momentos inicial e final da partícula espalhada** são $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ e $\mathbf{p}' = \hbar\mathbf{k}'$, respectivamente.

O elétron incidente pode interagir com o centro de massa do sistema (ou seja o núcleo, em repouso na origem do sistema de coordenadas) e também com os elétrons do átomo-alvo.

Sendo assim o potencial de interação V apropriado para nossa análise tem a forma:

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{z Z e^2}{r} + \sum_{i=1}^Z \frac{z e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} \quad (3.42)$$

Da expressão para a seção de choque inelástica (3.40) observamos que é essencial calcularmos os elementos da matriz de transição em primeira ordem de aproximação $\langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle$.

¹⁰Note que $n = 0$ para espalhamento elástico e $n \neq 0$ para espalhamento inelástico

Portanto, usando a interação (3.42) e as funções de onda normalizadas teremos:

$$\langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle = \frac{1}{L^3} \int d\mathbf{r} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_Z) V(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_Z). \quad (3.43)$$

com $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}'$.

Lembramos a transformação abaixo, citada em [4], para facilitar o cálculo da transformada de Fourier de um potencial V_{eff} proporcional à amplitude de espalhamento (como é o caso acima), a saber,

$$\begin{aligned} \int V_{eff}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} &= -\frac{1}{q^2} \int V_{eff}(\mathbf{r}) \nabla^2 \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= -\frac{1}{q^2} \int \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \nabla^2 V_{eff}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \end{aligned}$$

podemos escrever (3.43) da seguinte forma:

$$\langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle = \frac{1}{L^3} \left(-\frac{1}{q^2} \right) \int \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \nabla^2 V_{eff}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (3.44)$$

onde

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = \int \psi_n^*(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_Z) V(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_Z) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_Z. \quad (3.45)$$

Substituindo a forma do potencial de interação (3.42) em (3.45) resulta que:

$$\nabla^2 V_{eff}(\mathbf{r}) = -4\pi e^2 z \left[Z \delta_{n0} \delta(\mathbf{r}) - \sum_{i=1}^Z \int \psi_n^*(\mathbf{r}_i) \psi_0(\mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) d\mathbf{r}_i \right]. \quad (3.46)$$

O primeiro termo na expressão (3.46) se refere ao campo do núcleo-alvo (considerado como uma partícula pontual situada na origem do sistema de coordenadas)¹¹. O segundo termo resulta do potencial dos elétrons do átomo-alvo, que pode também ser descrito em termos de uma *densidade de elétrons* $\rho_n(\mathbf{r})$.

Então, definindo $\rho_n(\mathbf{r})$ como

$$\begin{aligned} \rho_n(\mathbf{r}) &\equiv \sum_{i=1}^Z \int \psi_n^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{i-1}, \mathbf{r}, \mathbf{r}_{i+1}, \dots, \mathbf{r}_Z) \psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{i-1}, \mathbf{r}, \mathbf{r}_{i+1}, \dots, \mathbf{r}_Z) \prod_{j \neq i} d\mathbf{r}_j \\ &= \sum_{i=1}^Z Z \int \psi_n^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_Z) \psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_Z) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \prod_j d\mathbf{r}_j \end{aligned}$$

podemos escrever (3.46) da seguinte forma:

$$\nabla^2 V_{eff}(\mathbf{r}) = -4\pi e^2 z [Z \delta_{n0} \delta(\mathbf{r}) - \rho_n(\mathbf{r})], \quad (3.47)$$

o que equivale a um potencial efetivo da forma:

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = z e^2 \left[\frac{Z \delta_{n0}}{r} - \int \frac{\rho_n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \right]. \quad (3.48)$$

Analisando a expressão (3.48) obtemos:

¹¹O termo δ_{n0} aparece da ortonormalidade de ψ_n e ψ_0

- Para espalhamento elástico, temos $n = 0$ e sendo assim

$$V_{eff}^{(0)}(\mathbf{r}) = z e^2 \left[\frac{Z}{r} - \int \frac{\rho_0(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \right] \quad (3.49)$$

com

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^Z \int |\psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{i-1}, \mathbf{r}, \mathbf{r}_{i+1}, \dots, \mathbf{r}_Z)|^2 \prod_{j \neq i} d\mathbf{r}_j.$$

- Para espalhamento inelástico, $n \neq 0$, substituindo (3.47) em (3.44) obtemos

$$\langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle = \frac{1}{L^3} \left(-\frac{4\pi z e^2}{q^2} \right) \int \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \rho_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (3.50)$$

Definindo o *fator forma de transição*, $F_n(\mathbf{q})$, como

$$\begin{aligned} F_n(\mathbf{q}) &= \int \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \rho_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= \int \psi_n^*(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_Z) \sum_{i=1}^Z \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i) \psi_0(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_Z) \end{aligned}$$

podemos escrever (3.50) como segue

$$\langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle = \frac{1}{L^3} \left(-\frac{4\pi z e^2}{q^2} \right) F_n(\mathbf{q}). \quad (3.51)$$

Substituindo (3.51) em (3.40) e escrevendo o resultado em termos do *raio de Bohr*,

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m_e},$$

temos que a seção de choque diferencial de espalhamento inelástico assume a forma :

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{inel} (0 \rightarrow n) = 4 \frac{z^2}{a_0^2} \frac{1}{q^4} \left(\frac{k'}{k} \right) |F_n(\mathbf{q})|^2. \quad (3.52)$$

Quando o elétron atravessa a matéria, a maioria de suas colisões envolverá pequenas transferências de momento e, portanto, espalhamento em pequenos ângulos.

Sabendo que:

$$q^2 = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta$$

temos

$$q dq = k k' \sin \theta d\theta$$

e

$$dq = - \frac{d(\cos \theta) k k'}{q}$$

podemos escrever¹²

$$\frac{d\sigma}{dq} = \frac{2\pi q}{k k'} \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

¹²Para calcularmos a perda de energia é melhor converter a seção de choque total em função do momento transferido.

Figura 3.2: *Momento Transferido*

Reescrevendo (3.52) em função do momento transferido $\mathbf{q}$ obtemos:

$$\frac{d\sigma}{dq} (0 \rightarrow n) = \frac{8\pi z^2}{k^2 a_0^2} \frac{1}{q^3} |F_n(\mathbf{q})|^2. \quad (3.53)$$

Lembrando que E_n é a energia do estado excitado $|n\rangle$ do átomo-alvo, temos que σ_n é a seção de choque total¹³ para excitar esse estado.

A perda de energia do elétron por unidade de comprimento de sua trajetória, conhecida por *stopping power*, pode ser calculada pela expressão:

$$\frac{dE}{dx} = \xi \sum_n (E_n - E_0) \sigma_n, \quad (3.54)$$

onde ξ é a densidade de átomos no meio (número de átomos por unidade de volume).

Para obter σ_n devemos integrar (3.53) no espço dos momentos. Então,

$$\begin{aligned} \sigma_n &= \int q dq \frac{d\sigma_n}{dq} \\ &= \frac{8\pi z^2}{k^2 a_0^2} \int_{q_{min}}^{q_{max}} dq \frac{1}{q^3} |F_n(\mathbf{q})|^2, \end{aligned} \quad (3.55)$$

¹³Obtida integrando a expressão (3.53) no espaço do momento transferido $\mathbf{q}$

onde q_{min} e q_{max} são estimados abaixo.

Sabemos que

$$q^2 = (k)^2 + (k')^2 - 2kk' \cos \theta$$

expressão que pode ser reescrita como¹⁴

$$q^2 = (k - k')^2 + 4kk' \sin^2 \frac{\theta}{2}.$$

Como a variação angular de θ é tal que $0 < \theta < \pi$ teremos:

- Para $\theta = 0$:

$$\begin{aligned} q_{min} &= k - k' \\ &= \frac{p - p'}{\hbar} \\ &= \frac{\Delta p}{\hbar} \end{aligned} \tag{3.56}$$

Mas, pela conservação de energia, devemos ter

$$k' = \sqrt{k^2 - \lambda^2}$$

onde $\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m_e} \equiv E_n - E_0$ é a *energia de excitação*.

A igualdade acima se verifica pois a partícula incidente perderá sua energia excitando os elétrons atômicos, e portanto

$$q_{min} = \frac{E_n - E_0}{\hbar v}$$

onde v é a velocidade de incidência do projétil, lembrando que $dE/dp = v$.

¹⁴Usamos a identidade $\cos \theta = 1 - 2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$

- Para $\theta = \pi$:

$$q_{max} = k' + k \approx 2k \quad (3.57)$$

Verificados os limites de integração, nos preocuparemos agora com a resolução da integral na equação (3.55).

Substituindo (3.55) em (3.54) obtemos:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{8\pi z^2 \xi}{k^2 a_0^2} \sum_n \int_{q_{min}}^{q_{max}} \frac{dq}{q^3} (E_n - E_0) |F_n(\mathbf{q})|^2. \quad (3.58)$$

Como os limites de integração na equação (3.58) dependem da energia E_n , para transformarmos a expressão da perda de energia, de uma soma sobre todos os estados atômicos finais n , em uma integração no momento transferido q devemos reescrever (3.54) da seguinte forma:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{8\pi z^2 \xi}{k^2 a_0^2} \int_{\bar{q}_{min}}^{\bar{q}_{max}} \frac{dq}{q^3} \sum_n (E_n - E_0) |F_n(\mathbf{q})|^2, \quad (3.59)$$

onde os limites de integração $\bar{q}_{min}$ e $\bar{q}_{max}$ indicam que eles agora representam uma média de valores e são independentes de n .

A soma sobre n pode ser calculada exatamente usando alguns artifícios matemáticos (*Regra de Soma Dipolar de Thomas-Reich-Kuhn- TRK*).

De fato,

$$\begin{aligned}
\sum_n (E_n - E_0) |F_n(\mathbf{q})|^2 &= \sum_{n=0} (E_n - E_0) \langle 0 | \sum_{i=1}^Z \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i) |n\rangle \langle n | \sum_{i=1}^Z \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i) |0\rangle \\
&= \sum_{n=0} (E_n - E_0) \langle 0 | \mathcal{O}_{\mathbf{q}}^\dagger |n\rangle \langle n | \mathcal{O}_{\mathbf{q}} |0\rangle \\
&= \sum_{n=0} \langle 0 | \mathcal{O}_{\mathbf{q}}^\dagger |n\rangle \langle n | H \mathcal{O}_{\mathbf{q}} |0\rangle - \langle 0 | \mathcal{O}_{\mathbf{q}}^\dagger |n\rangle \langle n | \mathcal{O}_{\mathbf{q}} H |0\rangle \\
&= \langle 0 | \mathcal{O}_{\mathbf{q}}^\dagger H \mathcal{O}_{\mathbf{q}} |0\rangle - \langle 0 | \mathcal{O}_{\mathbf{q}}^\dagger \mathcal{O}_{\mathbf{q}} H |0\rangle \\
&= \langle 0 | \mathcal{O}_{\mathbf{q}}^\dagger [H, \mathcal{O}_{\mathbf{q}}] |0\rangle
\end{aligned}$$

Por outro lado, a aproximação dipolar dos operadores $\mathcal{O}_{\mathbf{q}}$ nos fornece:

$$\mathcal{O}_{\mathbf{q}} \approx Z + i \sum_{i=1}^Z \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i = Z + i \mathbf{q} \cdot \mathbf{d}$$

e

$$\mathcal{O}_{\mathbf{q}}^\dagger \approx Z - i \sum_{i=1}^Z \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i = Z - i \mathbf{q} \cdot \mathbf{d},$$

onde $\mathbf{d} = \sum_{i=1}^Z \mathbf{r}_i$ é o *operador momento de dipolo* dos elétrons no átomo-alvo.

Então, tomando a direção z ao longo de $\mathbf{q}$ e sabendo que $\langle 0 | \mathcal{O}_{\mathbf{q}}^\dagger [H, \mathcal{O}_{\mathbf{q}}] |0\rangle$ é um *comutador duplo*, podemos escrever:

$$\begin{aligned}
\langle 0 | \mathcal{O}_{\mathbf{q}}^\dagger [H, \mathcal{O}_{\mathbf{q}}] |0\rangle &= \langle 0 | (\mathbf{q} \cdot \mathbf{d}) \mathbf{q} \cdot [H, \mathbf{d}] |0\rangle \\
&= q^2 \langle 0 | d_3 [H, d_3] |0\rangle \\
&= \frac{q^2}{2} \langle 0 | [d_3 [H, d_3]] |0\rangle.
\end{aligned}$$

Mas,

$$[H, d_3] = -i\hbar \sum_{i=1}^Z \frac{(p_3)_i}{m_e}.$$

Então, usando o resultado $[r_l, p_m] = i\hbar\delta_{lm}$ temos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{q^2} \langle 0 | \mathcal{O}_{\mathbf{q}}^\dagger [H, \mathcal{O}_{\mathbf{q}}] | 0 \rangle &= -\frac{i\hbar}{2m_e} \langle 0 | [d_3, \sum_{i=1}^Z (p_3)_i] | 0 \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m_e} Z. \end{aligned} \quad (3.60)$$

É interessante observar que o resultado (3.60), não obstante ter sido obtido pela expansão dos operadores $\mathcal{O}_{\mathbf{q}} = \sum_{i=1}^Z \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i)$, é válido em geral para o mesmo operador, desde que o potencial de interação não dependa do momento.

Substituindo (3.60) em (3.59), a equação da perda de energia, para qualquer partícula incidente, toma a forma:

$$\begin{aligned} \left. \frac{dE}{dx} \right|_{Bethe} &= \frac{4\pi\hbar^2 z^2}{m_e k^2 a_0^2} Z \xi \int_{\bar{q}_{min}}^{\bar{q}_{max}} \frac{dq}{q} \\ &= \frac{4\pi\hbar^2 z^2}{m_e k^2 a_0^2} Z \xi \ln \left(\frac{\bar{q}_{max}}{\bar{q}_{min}} \right). \end{aligned} \quad (3.61)$$

Mas $\bar{q}_{min} = \frac{\langle E_n - E_0 \rangle}{\hbar v} = \frac{I}{\hbar v}$, $\bar{q}_{max} = 2k = 2\frac{m_e v}{\hbar}$ e $a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m_e}$ então substituindo em (3.61) obtemos a forma final da equação de Bethe-Bloch para a perda de energia de um elétron incidente na matéria:

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_{Bethe} = \frac{4\pi e^4 z^2}{m_e v^2} Z \xi \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I} \right) \quad (3.62)$$

onde I é um parâmetro relacionado com o valor médio da energia de excitação $E_n - E_0$, ze é a carga da partícula incidente (projétil), Z o número atômico do átomo-alvo, m_e é a massa do elétron (note que a massa do elétron irá aparecer, fora do logaritmo, mesmo que o projétil não seja um elétron) e v a velocidade do projétil.

Neste capítulo seguimos os passos de Hans Bethe na dedução quântica da equação da perda de energia inicialmente proposta classicamente por Niels Bohr.

A partir de agora, obteremos a perda de energia considerando uma perturbação por um potencial nuclear e os efeitos da agitação térmica.

Capítulo 4

Potencial de Coulomb: Alcance Infinito

4.1 Introdução

O potencial de interação coulombiana (ou eletrostática) entre duas partículas pontuais com carga elétrica $Z_{alvo}e$ e $Z_{proj}e$ é dado por:

$$V_c(r) = \frac{q_{alvo}q_{proj}}{r} \quad (4.1)$$

Esse potencial de *alcance infinito*, devido à massa nula do fóton, deve ser tratado de forma diferenciada ao analisarmos os casos de espalhamento.

O hamiltoniano $\mathcal{H}$ concernente a este potencial, no referencial do CM¹, é dado por:

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + \frac{q_{alvo}q_{proj}}{r}, \quad (4.2)$$

onde μ é a massa reduzida do sistema.

¹Centro de Massa

De acordo com a Mecânica Quântica, o método empregado no cálculo da amplitude de espalhamento, $f(\theta, \phi)$ no caso de interações por potenciais centrais de curto alcance², satisfazendo a condição de contorno assintótica

$$\Psi(r) \longrightarrow A \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right), \quad (4.3)$$

não se aplica no caso de sistemas com interações coulombianas.

De fato, o significado físico da forma assintótica de $\Psi(r)$ (4.3) seria que, a grandes distâncias do centro de espalhamento, a função de onda de espalhamento estacionária se superpõe em uma função de onda plana de vetor de onda $\mathbf{k}$ e uma função de onda esférica emergente com amplitude dependente dos ângulos θ e ϕ , e inversamente proporcional a distância r entre as duas partículas.

Veremos adiante que, no caso de interações por potenciais centrais de longo alcance, como o coulombiano, a função de onda incidente será distorcida devido à interação mesmo na região assintótica devido ao alcance infinito deste potencial, o que sugere um tratamento diferenciado na obtenção da função de onda de espalhamento.

4.2 Teoria de Espalhamento Clássica

No estudo do espalhamento entre duas partículas de massa m_1 e m_2 , de acordo com a teoria clássica, é necessário conhecer o ângulo de deflexão Θ após a colisão entre ambas, o que requer encontrar a solução das equações de movimento $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_1(t)$ e $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_2(t)$ para uma dada lei de interação.

A energia potencial de interação entre duas partículas m_1 e m_2 depende somente da distância entre elas, ou seja do módulo da diferença entre seus *raios vetores* $\mathbf{r}_1$ e $\mathbf{r}_2$.

A Lagrangiana $\mathcal{L}$ de um sistema deste tipo é da forma:

$$\mathcal{L} = \frac{\mu}{2} \dot{\mathbf{r}}^2 - V(r) \quad (4.4)$$

²Potenciais que se comportam de forma que $V(r) \longrightarrow 0$ mais rápido do que $\frac{1}{r}$ a medida que $r \rightarrow \infty$

onde

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (4.5)$$

é a *massa reduzida*, e

$$\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (4.6)$$

é o *vetor posição relativo* ao *centro de massa* do sistema, ou seja

$$m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2 = 0. \quad (4.7)$$

Portanto, de acordo com a equação (4.4), o movimento de duas partículas interagentes é equivalente ao movimento de uma partícula sob ação de um campo externo $V(r)$, que por depender somente da distância r é dito *central*.

A deflexão de uma partícula massa m_1 se movendo em um campo externo central $V(r)$ (provocado pela partícula m_2), ou seja a energia potencial do campo depende somente da distância r da partícula à um ponto fixo (centro do campo) obedece às leis de conservação de energia e momento angular.

Devido à conservação do momento angular $\mathbf{L}$ em relação ao centro de massa para sistemas sob ação de um campo central, a trajetória de uma partícula em tal situação se restringe à um único plano perpendicular à $\mathbf{L}$.

De fato, o momento angular de uma partícula de massa m é dado por

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{p} \quad (4.8)$$

onde $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ é o momento linear da partícula. Como $\mathbf{L}$ é perpendicular à $\mathbf{r}$ e é constante temos que, durante o movimento, o raio vetor $\mathbf{r}$ da partícula se mantém no plano perpendicular à $\mathbf{L}$.

Assim, a trajetória de uma partícula sob ação de um campo central permanece em um plano e, usando as coordenadas polares (r, ϕ) neste plano, podemos escrever a lagrangiana (4.4) na forma:

$$\mathcal{L} = \frac{\mu}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) - V(r). \quad (4.9)$$

Do conceito de *coordenada cíclica* (ϕ é cíclica, pois não aparece explicitamente na equação (4.9)), temos que para tal coordenada

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = 0, \quad (4.10)$$

ou seja, teremos um *momento generalizado* associado à coordenada ϕ tal que

$$p_\phi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}}. \quad (4.11)$$

Para interações devido à um campo central, a conservação do momento angular $\mathbf{L}$ nos fornece³

$$L = L_z = \mu r^2 \dot{\phi} = \text{constante}. \quad (4.12)$$

De acordo com a lei de conservação de energia

$$E = \dot{r} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} + \dot{\phi} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} - \mathcal{L} \quad (4.13)$$

podemos escrever para a *energia total* E do sistema a expressão

$$E = \frac{\mu}{2} \dot{r}^2 + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) \quad (4.14)$$

donde resulta a *equação de movimento*

$$\dot{r} = \sqrt{\frac{2}{\mu} (E - V(r)) - \frac{L^2}{\mu^2 r^2}}. \quad (4.15)$$

³A coordenada ϕ é o ângulo de rotação em torno do eixo-z.

Substituindo a expressão (4.12) na equação (4.15) e lembrando que $\dot{r} = \frac{dr}{dt}$ e $\dot{\phi} = \frac{d\phi}{dt}$ obtemos:

$$\phi(L) = - \int_{r_{min}}^{r_{max}} \frac{\partial}{\partial L} \left(\sqrt{2\mu(E - V(r)) - \frac{L^2}{r^2}} \right) dr. \quad (4.16)$$

A equação (4.16) é conhecida como a *equação da trajetória* do movimento por fornecer a relação entre r e ϕ .

Da expressão (4.14), os valores de r para os quais $\frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) = E$ determinam os limites do movimento em relação à distância do *centro espalhador* (ou seja, do centro do campo $V(r)$). Isso é satisfeito quando temos a *velocidade radial* $\dot{r} = 0$ na equação (4.15).

Note que, a condição $\dot{r} = 0$ não significa que a partícula estará em repouso (como aconteceria no movimento unidimensional), pois existe a *velocidade angular* $\dot{\phi} \neq 0$. Mas indica o *ponto de retorno* da trajetória, onde a partícula muda seu tipo de movimento.

No caso de r ser limitado somente pela condição $r \geq r_{min}$, o movimento é *infinito*, ou seja a partícula procede e retorna ao infinito após interagir com o campo. Essa condição se aplica nos casos de espalhamento, cuja órbita é hiperbólica.⁴

O *ângulo de deflexão* (ou *de espalhamento*) Θ , para a qual a partícula sofre espalhamento ao interagir com um campo central $V(r)$, é dado por [19, 22, 23]:

$$\Theta(L) = |\pi - 2\phi_0(L)| \quad (4.17)$$

onde $\phi_0(L)$ é dado por:

$$\phi_0(L) = - \int_{r_0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial L} \left(\sqrt{2\mu(E - V(r)) - \frac{L^2}{r^2}} \right) dr \quad (4.18)$$

⁴Caso contrário o movimento é *finito* e a trajetória da partícula se restringe ao anel formado pelos círculos de raio $r = r_{min}$ e $r = r_{max}$.

Figura 4.1: Representação *Espalhamento Coulombiano* (elástico): b é o parâmetro de impacto; Θ é o ângulo de deflexão da trajetória do projétil.

onde r_0 é a *distância de máxima aproximação* da partícula incidente ao centro de espalhamento determinada pela condição $\dot{r} = 0$ na equação (4.15).

4.2.1 Seção de Choque Clássica

No cotidiano das aplicações físicas não estudamos a deflexão (espalhamento) de uma única partícula, mas o espalhamento de um feixe de partículas idênticas, incidentes com velocidade uniforme $\mathbf{v}$.

Como essas partículas incidem com diferentes valores do parâmetro de impacto b , elas espalharão de acordo com diferentes ângulos de deflexão Θ .

Seja dN o número de partículas espalhadas por unidade de tempo entre os ângulos Θ e $\Theta + d\Theta$. Como o número de partículas espalhadas é proporcional à densidade do feixe incidente, usa-se a razão [19, 22, 23]

$$d\sigma = \frac{dN}{n} \quad (4.19)$$

onde n é o número de partículas por unidade de tempo que atravessam uma unidade de área da seção de choque do feixe (supondo um feixe com densidade uniforme em sua seção de choque).

Se o ângulo de espalhamento $\Theta(b)$ for uma função monotonicamente decrescente do parâmetro de impacto b , existe uma relação biunívoca entre ambos e deste modo somente as partículas com parâmetros de impacto entre $b(\Theta)$ e $b(\Theta) + b(\Theta)$ serão espalhadas para ângulos entre Θ e $\Theta + d\Theta$.

Portanto, o número de partículas espalhadas dN é igual ao produto de n pela área do anel circular de raios b e $b + db$, ou seja:

$$dN = 2\pi b db \quad (4.20)$$

e assim temos que a *seção de choque* $d\sigma$ será da forma:

$$d\sigma = 2\pi b db. \quad (4.21)$$

Para mostrar a dependência entre a seção de choque $d\sigma$ e o ângulo de espalhamento Θ escrevemos a expressão (4.21) da seguinte maneira:

$$d\sigma = 2\pi b(\Theta) \left| \frac{db(\Theta)}{d\Theta} \right| d\Theta. \quad (4.22)$$

A seção de choque deve se referir ao elemento de ângulo sólido $d\Omega$ (não ao elemento de ângulo plano $d\Theta$). O ângulo sólido entre os cones com ângulos verticais Θ e $\Theta + d\Theta$ é dado por:

$$d\Omega = 2\pi \sin \Theta d\Theta. \quad (4.23)$$

Substituindo (4.23) em (4.22) obtemos a expressão para a seção de choque clássica

$$\frac{d\sigma(\Theta)}{d\Omega} = \frac{b(\Theta)}{\sin \Theta} \left| \frac{db}{d\Theta} \right|. \quad (4.24)$$

Note que, em particular no caso do espalhamento pelo potencial de Coulomb, como a força de Coulomb é simétrica ($1/r^2$), o espalhamento possuirá simetria cilíndrica em torno do eixo de incidência do feixe e deste modo a seção de choque é independente do ângulo azimutal ϕ . Isso nos permite trabalhar com a geometria dos anéis circulares acima aplicada para tratar o espalhamento coulombiano.

A Seção de Choque Total de Espalhamento é dada integrando (4.24) no ângulo sólido Ω :

$$\sigma_{Total} = \int_{\Omega} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = 2\pi \int_0^{\pi} \frac{d\sigma(\Theta)}{d\Omega} \sin(\Theta) d\Theta. \quad (4.25)$$

4.2.2 Espalhamento de Coulomb Elástico - *Rutherford*

Como o núcleo possui uma distribuição de carga elétrica, ele pode ser estudado através do espalhamento eletrostático (devido *campo Coulombiano*) de um feixe de partículas carregadas.

O espalhamento de partículas carregadas em um campo Coulombiano, ou seja devido à um potencial central $V(r)$ da forma (4.1) (potencial repulsivo), pode ser elástico ou inelástico.

O *Espalhamento de Coulomb Elástico* tem o nome especial de **Espalhamento de Rutherford**.

Basicamente, assumindo que o *núcleo-alvo* seja suficientemente massivo a ponto de manter o centro de espalhamento em repouso, a partícula incidente se aproxima do alvo ao longo de uma linha reta que, na ausência da força repulsiva (ou seja, na condição de *partícula livre*), passaria a uma distância b do centro espalhador, b é chamado *parâmetro de impacto*.

Como $L = \mu r^2 \dot{\phi} = \mu v b$ e $v = \sqrt{\frac{2E_{cm}}{\mu}}$ então

$$L = \sqrt{2E_{cm}} b. \quad (4.26)$$

Substituindo a expressão (4.26) na equação (4.18), obtemos uma equação para $\phi_0(b)$ da forma

$$\phi_0(b) = - \int_{r_0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial b} \left(\sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_{cm}} - \frac{b^2}{r^2}} \right) dr. \quad (4.27)$$

No caso de um potencial coulombiano puro, de acordo com (4.1),

$$V_c(r) = \frac{q_{proj}q_{alvo}}{r}. \quad (4.28)$$

Introduzindo o *parâmetro de Sommerfeld* η ,

$$\eta = \frac{q_{proj}q_{alvo}}{\hbar v}, \quad (4.29)$$

e⁵

$$\alpha = \frac{q_{proj} q_{alvo}}{2E} \quad (4.30)$$

temos que

$$\eta = k\alpha. \quad (4.31)$$

Deste modo, substituindo (4.28) e (4.30) na equação (4.27) teremos

$$\phi_c(b_c) = b_c \int_{r_c}^{\infty} \frac{dr}{r \sqrt{r^2 - 2\alpha r - b_c^2}}. \quad (4.32)$$

⁵ α é a metade da distância de maior aproximação em colisões frontais (ou seja, supondo $b = 0$ e na expressão $\dot{r} = \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_{cm}} - \frac{b^2}{r^2}} = 0$; quando $2\alpha \ll R$, onde $R = 1.3(A_{alvo}^{1/3} + A_{proj}^{1/3})$, os efeitos das interações nucleares são importantes.

Para encontrar a distância de máxima aproximação r_c fazemos

$$\sqrt{r_c^2 - 2\alpha r_c - b_c^2} = 0$$

donde resulta

$$r_c = \alpha + \sqrt{\alpha^2 + b_c^2}. \quad (4.33)$$

A solução da integral (4.32) é da forma⁶

$$\begin{aligned} \phi_c(b_c) &= \frac{\pi}{2} - \arcsin\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + b_c^2}}\right) \\ &= \arccos\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + b_c^2}}\right) \\ &= \arccos\left(\frac{\alpha}{b_c \sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{b_c^2}}}\right) \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\phi_c(b_c) = \arctan\left(\frac{b_c}{\alpha}\right) \quad (4.35)$$

Mas, $\phi_c(b_c) = \frac{\pi}{2} - \frac{\Theta_c}{2}$ então de (4.35) teremos,

$$\tan\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\Theta_c}{2}\right) = \frac{b_c}{\alpha}$$

de onde resulta

$$b_c = \alpha \cot\left(\frac{\Theta_c}{2}\right), \quad (4.36)$$

⁶Ver referência [12]

ou, invertendo para obter a expressão para a função de deflexão coulombiana,

$$\Theta_c(b_c) = 2 \operatorname{arccot} \left(\frac{b_c}{\alpha} \right). \quad (4.37)$$

Para encontrarmos a seção de choque clássica (4.24), derivando (4.36) em relação a Θ obtemos,

$$\frac{db}{d\Theta} = -\frac{\alpha}{2} \frac{1}{\sin^2 \left(\frac{\Theta}{2} \right)}.$$

Substituindo em (4.24) e lembrando que $\sin \Theta = 2 \sin \frac{\Theta}{2} \cos \frac{\Theta}{2}$ teremos

$$\frac{d\sigma_{Ruth}}{d\Omega} = \frac{\alpha^2}{4} \frac{1}{\sin^4 \left(\frac{\Theta_c}{2} \right)}. \quad (4.38)$$

conhecida como a *Seção de Choque de Espalhamento de Rutherford*, originalmente obtida por Rutherford ao estudar o espalhamento de partículas- α pelos núcleos atômicos⁷.

Note que a expressão (4.38) diverge para $\Theta_c \rightarrow 0$. Fisicamente, o alcance infinito da interação de Coulomb deflete o projétil para qualquer valor do parâmetro de impacto b . Portanto, colisões com $b \rightarrow \infty$ contribuem para que $\Theta_c = 0$, tornando a Seção de Choque Total de Rutherford infinita.

De fato, por definição, a seção de choque total σ_{Total} é o número de partículas espalhadas em todas as direções por unidade de tempo por unidade de intensidade do feixe incidente [19]. O campo coulombiano tem alcance infinito e, portanto, deflexões muito pequenas de uma partícula incidente ocorrerão quando esta incidir com parâmetro de impacto muito grande. Assim, todas as partículas em um feixe incidente (seja qual for sua extensão lateral) serão espalhadas e devem ser consideradas no cálculo da seção de choque total de espalhamento, tornando-a infinita, no caso do campo coulombiano.

⁷Esta expressão clássica é idêntica à expressão quântica no limite não-relativístico.

O valor infinito para σ_{Total} ocorrerá, na mecânica clássica, sempre que o potencial de espalhamento for não nulo para qualquer distância considerada⁸.

Somente se o campo de força sofrer um “desligamento” (*cut off*), ou seja for nulo a partir de uma certa distância, teremos uma seção de choque finita. Fisicamente, isso acontece para o campo coulombiano de um núcleo como consequência da presença dos elétrons atômicos, que blindam o núcleo e efetivamente cancelam sua carga à grandes distâncias.

⁸Na mecânica quântica, nem todos os potenciais de longo alcance geram divergência no σ_{Total} . Neste caso, todos os potenciais que decaem mais rápido que $1/r^2$, à grandes distâncias do centro de espalhamento ($r \rightarrow \infty$), produzirão seções de choque totais de espalhamento finitas.

Capítulo 5

Potencial Nuclear: Perturbação na Interação de Coulomb

Vamos considerar agora a situação em que um potencial de curto alcance é adicionado à interação pelo potencial de Coulomb.

5.1 Abordagem Geral Semi-Clássica

Nesta seção estudaremos como obter uma expressão para a equação de trajetória da partícula espalhada (4.18) supondo que, ao potencial coulombiano $V_c(r)$ (4.1), seja adicionada uma pequena perturbação¹ δV .

Pequenas perturbações no potencial de interação coulombiana originarão variações na trajetória da partícula espalhada.

Como vimos anteriormente, a trajetória da partícula espalhada pelo potencial $V(r)$ é fornecida pela expressão (4.18):

$$\phi(L) = - \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{\partial}{\partial L} \left(\sqrt{2\mu(E - V(r)) - \frac{L^2}{r^2}} \right) dr. \quad (5.1)$$

¹Como veremos adiante, neste trabalho essa correção (perturbação) será um potencial nuclear de curto alcance da forma $\delta V = V_N(r) = V_0 \exp(-\frac{r(t)-R}{a})$

Supondo que o potencial coulombiano $V_c(r)$ seja perturbado de forma que

$$V(r) = V_c + \delta V, \quad (5.2)$$

teremos:

$$\begin{aligned} \sqrt{2\mu(E - V(r)) - \frac{L^2}{r^2}} &= \sqrt{2\mu(E - (V_c + \delta V)) - \frac{L^2}{r^2}} + \\ &+ \sqrt{2\mu(E - V_c) - \frac{L^2}{r^2} - 2\mu\delta V}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Expandindo a expressão acima² em torno de $2\mu\delta V$ até primeira ordem obtemos:

$$\begin{aligned} \sqrt{2\mu(E - V_c) - \frac{L^2}{r^2} - 2\mu\delta V} &\approx \sqrt{2\mu(E - V_c) - \frac{L^2}{r^2}} + \\ &- \frac{1}{2} \frac{2\mu\delta V}{\sqrt{2\mu(E - V_c) - \frac{L^2}{r^2}}}. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Então,

$$\phi_{pert}(L) = \phi_c(L) + \delta\phi(L). \quad (5.5)$$

De fato, substituindo (5.4) em (5.1) obtemos:

$${}^2\sqrt{a-x} \approx \sqrt{a} - \frac{1}{2\sqrt{a}}x + \mathcal{O}(x^2)$$

$$\begin{aligned}\phi_{pert}(L) = & - \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{\partial}{\partial L} \left(\sqrt{2\mu(E - V_c(r)) - \frac{L^2}{r^2}} \right) dr + \\ & + \frac{1}{2} \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{\partial}{\partial L} \left(\frac{2\mu\delta V}{\sqrt{2\mu(E - V_c(r)) - \frac{L^2}{r^2}}} \right) dr.\end{aligned}\quad (5.6)$$

Analogamente, considerando o parâmetro de impacto b :

$$\phi_{pert}(b) = \phi_c(b) + \delta\phi(b) \quad (5.7)$$

Deste modo, lembrando que

$$dr = \frac{r^2}{L} \sqrt{2\mu(E - V_c) - \frac{L^2}{r^2}} d\phi$$

e o ângulo azimuthal ϕ é tal que $0 < \phi < \pi$, obtemos uma expressão para a perturbação na equação da trajetória de coulomb na forma:

$$\delta\phi(L) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial L} \left[\frac{2\mu}{L} \int_0^\pi r^2 \delta V d\phi \right]. \quad (5.8)$$

Por outro lado, explicitando a dependência temporal em (5.8) podemos escrever

$$\delta\phi(L) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial L} \left[\frac{2\mu}{L} \int_0^\pi r^2 \delta V \frac{d\phi}{dt} dt \right]. \quad (5.9)$$

Lembrando que $\frac{d\phi}{dt} = \dot{\phi} = \frac{L}{\mu r^2}$ e $0 < t < \infty$ resulta de (5.9)

$$\delta\phi(L) = \frac{\partial}{\partial L} \left[\int_0^\infty \delta V dt \right] \quad (5.10)$$

ou, em função do parâmetro de impacto b ,

$$\delta\phi(b) = \frac{\partial}{\partial b} \left[\int_0^\infty \delta V \, dt \right] \quad (5.11)$$

As equações (5.10) e (5.11) são gerais e na próxima seção consideraremos uma possível aplicação de acordo com o assunto estudado em nossa pesquisa.

Portanto, como a dependência entre Θ e ϕ é linear (ver (4.17)), o ângulo de deflexão clássico modifica-se de acordo com a perturbação δV de modo que:

$$\Theta_{pert}(b) = \Theta_c(b) + \delta\Theta(b), \quad (5.12)$$

onde $\delta\Theta(b) = -2\delta\phi(b)$.

Conseqüentemente, a seção de choque clássica adquire a seguinte forma com a inserção do termo perturbativo:

$$\frac{d\sigma_{pert}}{d\Omega} = \frac{b_{pert}}{\sin \Theta(b_{pert})} \left| \frac{db}{d\Theta(b_{pert})} \right| \quad (5.13)$$

Mas, o ângulo de deflexão $\Theta(b)$ define um ângulo θ a partir de um parâmetro de impacto b_0 , no caso da *deflexão perturbada*, como mostra a Figura 5.1. E se consideramos a deflexão de Rutherford (potencial de coulomb não perturbado), o parâmetro de impacto seria b_c , para o mesmo valor do ângulo θ .

Portanto, como $\Theta(b_0) = \Theta(b_c) = \theta$ temos que:

$$\frac{d\sigma_{pert}^{Ruth}/d\Omega}{d\sigma_{Ruth}/d\Omega} = \frac{b_0}{b_c} \frac{d\Theta/db(b_0)}{d\Theta/db(b_c)} \quad (5.14)$$

Forma da Função de Deflexão de Espalhamento

Figura 5.1: *Perturbação na Função de Espalhamento Coulombiana*

Como $b_c > b_0^3$, podemos expandir b_0 em torno de b_c até primeira ordem tal que:

$$\begin{aligned}\Theta(b_0) &= \Theta(b_0 - b_c + b_c) \\ &\approx \Theta(b_c) + (b_0 - b_c) \frac{d\Theta}{db}(b_c).\end{aligned}\quad (5.15)$$

Mas, pela expressão (5.12) podemos escrever:

$$\Theta(b_0) = \Theta_c(b_0) + \delta\Theta(b_0)$$

e também,

³Para potenciais perturbativos atrativos, como o caso de $\delta V = V_N$

$$\Theta(b_c) = \Theta_c(b_c) + \delta\Theta(b_c).$$

Então, substituindo as igualdades acima em (5.15) temos:

$$\Theta(b_0) = \Theta_c(b_c) + \delta\Theta(b_c) + (b_0 - b_c) \frac{d\Theta_c}{db}(b_c) + (b_0 - b_c) \frac{d}{db} \delta\Theta_c(b_c), \quad (5.16)$$

Como $\Theta(b_0) = \Theta(b_c)$,

$$\delta\Theta(b_c) + (b_0 - b_c) \frac{d\Theta_c}{db}(b_c) + (b_0 - b_c) \frac{d}{db} \delta\Theta_c(b_c) = 0 \quad (5.17)$$

donde resulta,

$$(b_0 - b_c) \approx -\frac{\delta\Theta(b_c)}{\frac{d\Theta_c}{db}(b_c)}, \quad (5.18)$$

analogamente,

$$\frac{b_0}{b_c} = 1 - \frac{\delta\Theta(b_c)}{b_c \frac{d\Theta_c}{db}(b_c)}, \quad (5.19)$$

onde, lembrar que $\delta\Theta(b_c) = -2\delta\phi(b_c)$.

Por outro lado, usando o mesmo raciocínio anterior, podemos expandir $\frac{d\Theta}{db}(b_0)$ em torno de b_c até primeira ordem tal que:

$$\begin{aligned}
\frac{d\Theta}{db}(b_0) &= \frac{d\Theta}{db}(b_0 - b_c + b_c) \\
&\approx \frac{d\Theta}{db}(b_c) + (b_0 - b_c) \frac{d^2\Theta}{db^2}(b_c) \\
&= \frac{d\Theta_c}{db}(b_c) + \frac{d}{db}\delta\Theta(b_c) + (b_0 - b_c) \left[\frac{d^2\Theta_c}{db^2}(b_c) + \frac{d^2}{db^2}\delta\Theta(b_c) \right] \\
&\approx \frac{d\Theta_c}{db}(b_c) + \frac{d}{db}\delta\Theta(b_c) + (b_0 - b_c) \frac{d^2\Theta_c}{db^2}(b_c). \tag{5.20}
\end{aligned}$$

Substituindo (5.18) em (5.20) temos:

$$\frac{d\Theta}{db}(b_0) = \frac{d\Theta_c}{db}(b_c) + \frac{d}{db}\delta\Theta(b_c) - \frac{\frac{d^2\Theta_c}{db^2}(b_c)}{\frac{d\Theta_c}{db}(b_c)} \delta\Theta(b_c), \tag{5.21}$$

donde resulta:

$$\frac{\frac{d\Theta}{db}(b_0)}{\frac{d\Theta_c}{db}(b_c)} = 1 + \frac{\frac{d}{db}\delta\Theta(b_c)}{\frac{d\Theta_c}{db}(b_c)} - \frac{(\frac{d^2\Theta_c}{db^2}(b_c))^2}{(\frac{d\Theta_c}{db}(b_c))^2} \delta\Theta(b_c). \tag{5.22}$$

Então, substituindo as equações (5.19) e (5.22) na expressão para a seção de choque levando em consideração o termo perturbativo $\delta\Theta$, (5.14), obtemos:

$$\frac{d\sigma_{pert}^{Ruth}/d\Omega}{d\sigma_{Ruth}/d\Omega} = \left(1 - \frac{\delta\Theta(b_c)}{b_c \frac{d\Theta_c}{db}(b_c)} \right) \left[1 + \frac{\frac{d}{db}\delta\Theta(b_c)}{\frac{d\Theta_c}{db}(b_c)} - \frac{\frac{d^2\Theta_c}{db^2}(b_c)}{(\frac{d\Theta_c}{db}(b_c))^2} \delta\Theta(b_c) \right]. \tag{5.23}$$

Tomando (5.23) até primeira ordem em $\delta\Theta(b_c)$ obtemos:

$$\frac{d\sigma_{pert}^{Ruth}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{Ruth}}{d\Omega} \left[1 - \frac{\delta\Theta(b_c)}{b_c \frac{d\Theta_c}{db}(b_c)} - \frac{\frac{d^2\Theta_c}{db^2}(b_c)}{(\frac{d\Theta_c}{db}(b_c))^2} \delta\Theta(b_c) + \frac{\frac{d}{db}\delta\Theta(b_c)}{\frac{d\Theta_c}{db}(b_c)} \right]. \tag{5.24}$$

Ou, reescrevendo o último termo da soma acima,

$$\frac{d\sigma_{pert}^{Ruth}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{Ruth}}{d\Omega} \left[1 - \frac{\delta\Theta(b_c)}{b_c \frac{d\Theta_c}{db}(b_c)} - \frac{\frac{d^2\Theta_c}{db^2}(b_c)}{(\frac{d\Theta_c}{db}(b_c))^2} \delta\Theta(b_c) + \frac{d}{d\Theta_c} \delta\Theta(b_c) \right], \quad (5.25)$$

onde,

$$\Theta_c(b_c) = 2 \operatorname{arccot} \left(\frac{b_c}{\alpha} \right),$$

$$\frac{d\Theta_c}{db}(b_c) = \frac{-2\alpha}{(\alpha^2 + b_c^2)},$$

$$\frac{d^2\Theta_c}{db^2}(b_c) = \frac{4\alpha b_c}{(\alpha^2 + b_c^2)^2}.$$

Substituindo as expressões acima em (5.24) obtemos:

$$\frac{d\sigma_{pert}^{Ruth}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{Ruth}}{d\Omega} \left[1 + \frac{\alpha^2 + b_c^2}{2\alpha b_c} \delta\Theta(b_c) - \frac{b_c}{\alpha} \delta\Theta(b_c) - \frac{\alpha^2 + b_c^2}{2\alpha} \frac{d}{db} \delta\Theta(b_c) \right], \quad (5.26)$$

ou, simplificando,

$$\frac{d\sigma_{pert}^{Ruth}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{Ruth}}{d\Omega} \left[1 + \frac{\alpha^2 - b_c^2}{2\alpha b_c} \delta\Theta(b_c) - \frac{\alpha^2 + b_c^2}{2\alpha} \frac{d}{db} \delta\Theta(b_c) \right], \quad (5.27)$$

com

$$\delta\Theta(b_c) = -2\delta\phi(b_c)$$

e $\delta\phi(b_c)$ obtido pela expressão (5.11).

5.2 Aplicação: *Perturbação por um Potencial Nuclear*

Vamos agora aplicar os resultados obtidos na seção 5.1 considerando uma perturbação de curto alcance, ou seja uma interação nuclear.

No caso de um projétil pesado carregado incidindo no corpo humano e interagindo com o tecido biológico (cuja composição é essencialmente de H_2O) teremos, por exemplo considerando o próton, uma reação do tipo $p + {}^{16}O$.

Como o próton possui carga, ao interagir com o átomo de oxigênio, ele sofrerá espalhamento coulombiano (devido às interações eletrostáticas com os elétrons do alvo). Mas, por outro lado, com energias acima [50] de $E_{lab} = 150MeV$ os efeitos das interações nucleares devem ser considerados.

Interações nucleares, de curto alcance, são comumente relacionadas [39] a uma função tipo Fermi, também conhecida como *Potencial de Woods-Saxon*

$$V_N(r) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)} \quad (5.28)$$

onde os parâmetros a (*espessura nuclear*), R e V_0 são ajustáveis de acordo com os dados experimentais e possuem aproximadamente os seguintes valores: $a \approx 0.65fm$, R é o *raio médio* dado por

$$R = 1.25A_{nucleo}^{1/3}$$

e a profundidade V_0 do poço de potencial é da ordem de $V_0 = 50MeV$.

Note que $R < R_S$, onde

$$R_S \approx 1.4(A_{proj}^{1/3} + A_{alvo}^{1/3})$$

é um raio relacionado ao tamanho do sistema com A_i o número de massa dos seus componentes.

Lembrando que estamos efetuando um tratamento perturbativo ao potencial de coulomb, podemos considerar as regiões do espaço com parâmetros de impacto b suficientemente grandes⁴. Em outras palavras, consideraremos as regiões $r \gg R$ onde o potencial nuclear é suficientemente pequeno para ser aproximado assintoticamente pela expressão

$$V_N(r) = -V_0 \exp\left(-\frac{r-R}{a}\right) = -V'_0 \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \quad (5.29)$$

com $V'_0 > 0$ e $V'_0 = V_0 \exp\left(\frac{R}{a}\right)$.

Neste caso, podemos utilizar o raciocínio da seção 5.1 e calcular $\delta\phi$, que representa a perturbação no ângulo de deflexão de Rutherford devido à interação nuclear $V_N(r) = \delta V$.

Deste modo, pela equação (5.11) escrevemos:

$$\delta\phi(b) = \frac{\partial}{\partial b} \int_0^\infty -V'_0 \exp\left(-\frac{r(t)}{a}\right) dt. \quad (5.30)$$

Como a maior contribuição à deflexão na trajetória é devido ao potencial coulombiano (lembre-se que a interação nuclear é somente uma perturbação à interação eletrostática dominante), a equação da trajetória $r(t)$, pode ser expandida em torno do ponto de retorno r_c como segue

$$r(t) \approx r_c + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 r(t)}{dt^2} \right|_{r_c} t^2. \quad (5.31)$$

Substituindo (5.31) em (5.30) resulta

⁴Lembrar que, para parâmetros de impacto $b \rightarrow \infty$, a função de deflexão coulombiana $\Theta_c \rightarrow 0$

$$\begin{aligned}
\delta\phi(b) &= \frac{\partial}{\partial b} \left[\int_0^\infty -V'_0 \exp \left(- \frac{r_c + \frac{1}{2} \frac{d^2 r(t)}{dt^2} \Big|_{r_c} t^2}{a} \right) dt \right] \\
&= \frac{\partial}{\partial b} \left[-V'_0 \exp \left(- \frac{r_c}{a} \right) \int_0^\infty \exp \left(- \frac{1}{2a} \frac{d^2 r(t)}{dt^2} \Big|_{r_c} t^2 \right) dt \right].
\end{aligned}$$

A integral acima é do tipo gaussiana cuja solução é dada por⁵,

$$\delta\phi(b) = \frac{\partial}{\partial b} \left(V_N(r_c) \sqrt{\frac{\pi a}{2\ddot{r}(t)|_{r_c}}} \right) \quad (5.32)$$

Ao usarmos a lagrangeana (4.9), nós resolvemos o problema combinando as equações de Lagrange para a coordenada ϕ , que expressam a conservação da energia e do momento angular, em um único resultado - a equação da trajetória (ou da órbita) da partícula espalhada.

Mas, analogamente, podemos utilizar a equação de Lagrange para a coordenada r ,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} = 0. \quad (5.33)$$

Usando a equação (4.9) obtemos

$$\mu(\ddot{r} - r\dot{\phi}^2) = -\frac{\partial V(r)}{r}. \quad (5.34)$$

Como a maior contribuição ao movimento é devido ao potencial de coulomb $V_c(r)$, substituindo (4.1) em (5.34) teremos:

$$^5 \int_0^\infty \exp(-\xi^2 x^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{4\xi^2}}$$

$$\begin{aligned}
\ddot{r}(t) &= \frac{q_{proj} q_{alvo}}{\mu r^2(t)} + r(t) \dot{\phi}^2(t) \\
&= \frac{q_{proj} q_{alvo}}{\mu r^2(t)} + r(t) \frac{L_z^2}{\mu_2 r^3(t)} \\
&= \frac{1}{\mu r^3(t)} (\mu q_{proj} q_{alvo} r(t)) + L_z^2 \\
&= \frac{1}{\mu r^3(t)} (\mu q_{proj} q_{alvo} r(t)) + 2E_{cm} b^2. \tag{5.35}
\end{aligned}$$

Por outro lado, na expressão (5.32), notamos que a contribuição significativa no cálculo é fornecida pela exponencial do potencial nuclear e portanto podemos supor

$$\delta\phi(b) \approx \sqrt{\frac{\pi a}{2\ddot{r}(t)|_{r_c}}} \left(\frac{\partial V_N(r_c)}{\partial b} \right)$$

Calculando a componente radial⁶ da aceleração, (5.35), no ponto de retorno r_c e substituindo na expressão acima teremos uma forma geral para o cálculo analítico da perturbação no potencial coulombiano pelo potencial nuclear, a saber:

$$\delta\phi(b) = -\frac{\mu b}{a} (\alpha + \sqrt{\alpha^2 + b^2}) V_N(r_c) \left(\frac{\pi a}{2(\alpha^2 + b^2)(\mu q_{proj} q_{alvo} - 2E_{cm}(\alpha - \sqrt{\alpha^2 + b^2}))} \right)^{1/2}.$$

Lembrando que

$$\alpha = \frac{q_{proj} q_{alvo}}{2E_{cm}}$$

concluimos nosso cálculo de $\delta\phi(b)$ com a expressão

⁶ $\ddot{\mathbf{r}} = (\ddot{r} - r\dot{\phi}^2)\hat{\mathbf{e}}_r + (r\ddot{\phi} + 2\dot{r}\dot{\phi})\hat{\mathbf{e}}_\phi$

$$\delta\phi(b) = -\frac{\mu b}{2a} \left(\alpha + \sqrt{\alpha^2 + b^2} \right) \left(\frac{\pi a}{(\alpha^2 + b^2) E_{cm} [\alpha(\mu - 1) + \sqrt{\alpha^2 + b^2}]} \right)^{1/2} V_N(r_c) \quad (5.36)$$

De posse desse resultado, podemos calcular a Seção de Choque Clássica de Rutherford Perturbada de acordo com a equação (5.27) tal que:

$$\frac{d\sigma_{pert}^{Ruth}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{Ruth}}{d\Omega} \left[1 - \left(\frac{\alpha^2 - b_c^2}{\alpha b_c} \right) \delta\phi(b_c) + \left(\frac{\alpha^2 + b_c^2}{\alpha} \right) \frac{d}{db} \delta\phi(b_c) \right] \quad (5.37)$$

Por outro lado, lembrando que

$$\frac{d\sigma_{Ruth}}{d\Omega} \propto \frac{1}{q^4},$$

a expressão (5.37) implica uma dependência em q ligeiramente modificada. No contexto quântico, a presença do potencial espalhador complexo implica uma dispersão no momento transferido. Por isso, no lugar de seu valor assintótico, $|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|$, o momento transferido seria dado por uma distribuição a ser calculada dentro da teoria quântica de espalhamento.

No contexto semi-clássico, podemos incluir o efeito do potencial nuclear modificando a dependência de q no ângulo, ou seja

$$q \implies q + \delta q. \quad (5.38)$$

Deste modo teremos, sendo C uma constante,

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma_{pert}^{Ruth}}{d\Omega} &= \frac{C}{(q + \delta q)^4} \\
&\approx \frac{C}{q^4} - \frac{4C\delta q}{q^5} \\
&= \frac{C}{q^4} \left[1 - \frac{4\delta q}{q} \right]
\end{aligned}
\tag{5.39}$$

Comparando as expressões (5.37) e (5.39) temos que:

$$\frac{4\delta q}{q} \equiv \left(\frac{\alpha^2 - b_c^2}{\alpha b_c} \right) \delta\phi(b_c) - \left(\frac{\alpha^2 + b_c^2}{\alpha} \right) \frac{d}{db} \delta\phi(b_c). \tag{5.40}$$

Para energias muito altas teremos $\alpha \ll b_c$ e podemos assim simplificar as expressões (5.40) e (5.36) resultando:

$$\frac{4\delta q}{q} \equiv \left(\frac{b_c}{\alpha} \right) \delta\phi(b_c) - \left(\frac{b_c^2}{\alpha} \right) \frac{d}{db} \delta\phi(b_c) \tag{5.41}$$

$$\delta\phi(b_c) \approx -\frac{\mu b_c}{2a} \left(\frac{\pi a}{E_{cm} b_c} \right)^{1/2} V_N(b_c) \tag{5.42}$$

onde $V_N(b_c) = -V'_0 \exp(-\frac{b_c}{a})$.

Capítulo 6

Influência de $\delta\Theta$ na Fórmula de Bethe-Bloch

Como vimos ao deduzir a Fórmula de Bethe-Bloch, o alcance e a perda de energia por unidade de comprimento da trajetória de uma partícula não relativística atravessando a matéria é determinada pelas seções de choque das colisões atômicas inelásticas e pela energia de ionização do átomo.

Lembramos que a equação geral do *stopping power* é dada por (Ver expressões 3.54 e 3.55):

$$\frac{dE}{dx} = \xi \sum_n (E_n - E_0) \sigma_n$$

onde

$$\sigma_n = \frac{8\pi z^2}{k^2 a_0^2} \int_{q_{min}}^{q_{max}} dq \frac{1}{q^3} |F_n(\mathbf{q})|^2$$

Podemos reescrever a expressão acima do seguinte modo:

$$\sigma_n = \frac{8\pi z^2}{k^2 a_0^2} \int_{q_{min}}^{q_{max}} q dq \frac{1}{q^4} |F_n(\mathbf{q})|^2. \quad (6.1)$$

Deste modo, usando o raciocínio do capítulo anterior teremos:

$$\begin{aligned}
\sigma_n^{mod} &\approx \frac{8\pi z^2}{k^2 a_0^2} \int_{q_{min}}^{q_{max}} q dq |F_n(\mathbf{q})|^2 \left[\frac{1}{q^4} - \frac{4\delta q}{q^5} \right] \\
&= \frac{8\pi z^2}{k^2 a_0^2} \int_{q_{min}}^{q_{max}} q dq \frac{1}{q^4} |F_n(\mathbf{q})|^2 \left[1 - \frac{4\delta q}{q} \right]
\end{aligned}
\tag{6.2}$$

onde δq é um valor médio da correção para a seção de choque de Rutherford, de acordo com a expressão (5.38), devido à interação nuclear.

Substituindo (6.2) na expressão da perda de energia e utilizando (3.61) resulta:

$$\begin{aligned}
\left. \frac{dE}{dx} \right|_{Bethe}^{mod} &\approx \frac{8\pi z^2 \xi}{k^2 a_0^2} \int_{\bar{q}_{min}}^{\bar{q}_{max}} q dq \frac{1}{q^4} \sum_n (E_n - E_0) |F_n(\mathbf{q})|^2 \left[1 - \frac{4\delta q}{q} \right] \\
&= \left. \frac{dE}{dx} \right|_{Bethe} - \frac{4\pi z^2 Z e^2 \xi}{k^2 a_0} \left(\left. \frac{4\delta q}{q} \right|_{min} - \left. \frac{4\delta q}{q} \right|_{max} \right)
\end{aligned}
\tag{6.3}$$

onde, a_0 é o raio de Bohr, k é o vetor de onda incidente e, para $\alpha \ll b_c$ temos de acordo com a expressão (5.41):

$$\frac{4\delta q}{q} \equiv \left(\frac{b_c}{\alpha} \right) \delta\phi(b_c) - \left(\frac{b_c^2}{\alpha} \right) \frac{d}{db} \delta\phi(b_c),$$

com

$$\delta\phi(b_c) = \frac{\mu V'_0}{2} \left(\frac{\pi b_c}{a E_{cm}} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{b_c}{a} \right).$$

Lembrando que

$$\bar{q}_{min} = \frac{\langle E_n - E_0 \rangle}{\hbar v_{proj}} = \frac{I}{\hbar v_{proj}},$$

$$\bar{q}_{max} = 2k = \frac{m_{proj} v_{proj}}{\hbar}$$

e

$$b_c = \alpha \tan^{-1} \left(\frac{\theta_c}{2} \right)$$

obtemos¹

$$b_c^{max} = \alpha \frac{2k}{\bar{q}_{min}} \sqrt{1 - \left(\frac{\bar{q}_{min}}{2k} \right)^2} \approx \frac{2m_{proj} v_{proj}^2 \alpha}{I} \quad (6.4)$$

e

$$b_c^{min} = 0. \quad (6.5)$$

Note que fisicamente ao parâmetro de impacto b_c^{max} corresponde o valor mínimo do momento transferido, q_{min} , assim como para $b_c^{min} = 0$, ou seja, nas colisões frontais, teremos o máximo do momento transferido.

Portanto, como $\left. \frac{4\delta q}{q} \right|_{max} = 0$, substituindo (6.4) em (6.3) obtemos o seguinte:

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_{Bethe}^{mod} \approx \left. \frac{dE}{dx} \right|_{Bethe} - \frac{4\pi z^2 Z e^2 \xi}{k^2 a_0} \left(\left. \frac{4\delta q}{q} \right|_{min} \right) \quad (6.6)$$

¹Nesta aproximação usamos o fato que $mv^2 \gg I$

onde²

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{4\delta q}{q} \right|_{min} &= \left(\frac{b_c^{max}}{\alpha} \right) \delta\phi(b_c^{max}) - \left(\frac{(b_c^{max})^2}{\alpha} \right) \frac{d}{db} \delta\phi(b_c^{max}) \\
 &\approx \frac{\mu V'_0}{2} \left(\frac{\pi\alpha}{aE_{cm}} \right)^{1/2} \left(\frac{2m_{proj}v_{proj}^2}{I} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{2\alpha m_{proj}v_{proj}^2}{Ia} \right) \left[1 + \frac{2m_{proj}v_{proj}^2}{Ia} \right].
 \end{aligned}
 \tag{6.7}$$

Substituindo (6.7) em (6.6):

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{dE}{dx} \right|_{Bethe}^{mod} &\approx \left. \frac{dE}{dx} \right|_{Bethe} - \frac{4\pi z^2 Z e^2 \xi}{m_{proj}^2 v_{proj}^2 a_0} \left(\frac{\mu V'_0}{2} \right) \left(\frac{\pi\alpha}{aE_{cm}} \right)^{1/2} \left(\frac{2m_{proj}v_{proj}^2}{I} \right)^{3/2} \times \\
 &\times \exp\left(-\frac{2\alpha m_{proj}v_{proj}^2}{Ia} \right) \left[1 + \frac{2m_{proj}v_{proj}^2}{Ia} \right].
 \end{aligned}
 \tag{6.8}$$

$$\text{Mas, } E_{cm} = \frac{E_{lab}}{1 + \frac{m_{proj}}{m_{alvo}}} = \frac{2m_{proj}v_{proj}^2}{1 + \frac{m_{proj}}{m_{alvo}}}.$$

Então, considerando $1 \ll \frac{2m_{proj}v_{proj}^2}{Ia}$ e escrevendo (6.8) em função da energia de incidência do projétil teremos:

²Aqui também foi usado o fato que $m_{proj}v_{proj}^2 \gg I$

$$\begin{aligned} \left. \frac{dE}{dx} \right|_{Bethe}^{mod} \approx & \left. \frac{dE}{dx} \right|_{Bethe} - \left(\frac{128\pi z^3 Z e^2}{a} \right)^{3/2} \left(\frac{\xi V_0}{a_0 I^{5/2}} \right) \left(\frac{1}{m_{proj}} + \frac{1}{m_{alvo}} \right)^2 \\ & \times (E_{lab})^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{a} \left[\frac{2zZe^2 \left[1 + \frac{m_{proj}}{m_{alvo}} \right]}{I} - R \right] \right). \end{aligned} \quad (6.9)$$

onde z é o número atômico do projétil, Z é o número atômico do alvo, $a \approx 0.65 fm$ é a difusividade nuclear, $V_0' = V_0 \exp(R/a)$ com $V_0 = 50 MeV$ e $R = 1.25 A_{alvo}^{1/3}$, a_0 é o raio de Bohr, I é o valor médio da energia de excitação, ξ é a densidade de átomos no meio e E_{lab} é a energia incidente do projétil no sistema do laboratório.

Note que, na expressão (6.9), $\left. \frac{dE}{dx} \right|_{Bethe}$ é dada pela equação (3.61), a saber:

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_{Bethe} = \frac{4\pi\hbar^2 z^2}{m_e k^2 a_0^2} Z \xi \ln \left(\frac{\bar{q}_{max}}{\bar{q}_{min}} \right).$$

com $\bar{q}_{min} = \frac{I}{\hbar v_{proj}}$ e $\bar{q}_{max} = 2k = 2 \frac{m_{proj} v_{proj}}{\hbar}$.

Do mesmo modo, escrevendo (3.61) explicitamente em função da energia de incidência do projétil teremos:

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_{Bethe} = \frac{4\pi\hbar^2 (ze)^2}{2a_0 m_{proj} E_{lab}} Z \xi \ln \left(\frac{4E_{lab}}{I} \right). \quad (6.10)$$

Combinado então as equações (6.9) e (6.10) obtemos a expressão final para a equação de Bethe-Bloch modificada devido à interação nuclear, a saber:

$$\begin{aligned}
\frac{dE}{dx} \Big|_{Bethe}^{mod} &\approx \frac{2\pi\hbar^2 (ze)^2 Z\xi}{a_0 m_{proj}} \left(\frac{1}{E_{lab}} \right) \ln \left(\frac{4E_{lab}}{I} \right) + \\
&- \left(\frac{128\pi z^3 Z e^2}{a} \right)^{3/2} \left(\frac{\xi V_0}{a_0 I^{5/2}} \right) \left(\frac{1}{m_{proj}} + \frac{1}{m_{alvo}} \right)^2 \times \\
&\times (E_{lab})^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{a} \left[\frac{2zZe^2 \left[1 + \frac{m_{proj}}{m_{alvo}} \right]}{I} - R \right] \right).
\end{aligned}
\tag{6.11}$$

Como esperado, considerando que para o ^{16}O temos o potencial de excitação médio dado pela expressão empírica $I = 12Z + 7$ [eV] no valor de $I_{^{16}O} = 0.103keV$ (ver referência [29]), o segundo termo da expressão (6.11) é muito pequeno, representando menos de 1% do valor de $\frac{dE}{dx} \Big|_{Bethe}$.

Capítulo 7

Fragmentação Nuclear e Taxa de Reação

7.1 Introdução

Como podemos constatar no decorrer deste trabalho, a utilização de hadrons (partículas pesadas carregadas, como prótons e íons de carbono) em Medicina como opção de tratamento de vários tipos de tumores mais profundos e/ou localizados em regiões de difícil acesso devido à proximidade de órgãos vitais, é um objeto de pesquisa que vem sendo aprimorado, desde meados do século passado, em países como os Estados Unidos, a Alemanha e o Japão, entre outros.

Enquanto um hadron, por exemplo um próton, incide no corpo humano e percorre uma certa distância, ele vai gradativamente perdendo energia através de colisões inelásticas com os átomos, no nosso caso principalmente de oxigênio (responsável por 61% na composição total dos tecidos biológicos), até atingir o final de sua trajetória onde, então, ele exibe um máximo de perda de energia (Pico de Bragg). Todo o seu comportamento é descrito teoricamente pela Fórmula de Bethe-Bloch estudada e analisada nos capítulos anteriores.

O próton, ou os íons, incidentes perdem energia principalmente devido às interações com os elétrons dos átomos (matéria). Devido às variações no número de colisões, esta perda de energia é tratada por processos estatísticos [51], e originam um alargamento contínuo na distribuição espacial e de energia do íon no alvo.

No entanto, além da perda de energia por colisões atômicas, o próton com energia de incidência acima de 150MeV pode induzir fragmentações dos núcleos que gerarão outros pequenos núcleos com energia cinética pequena assim como prótons secundários com aproximadamente $2/3$ da energia do próton incidente.

Neste capítulo, com base em nosso artigo ([30]), analisaremos com mais detalhes a teoria em que se baseia o Modelo Estatístico de Goldhaber para o cálculo da energia cinética dos fragmentos resultantes das colisões e usaremos conceitos pertinentes ao ramo da Astrofísica Nuclear, a saber o cálculo da *Taxa de Reação*, para estimarmos a influência da temperatura nestes processos.

7.2 Abordagem Estatística

A emissão de fragmentos é uma característica presente nas reações nucleares quando envolvem energias a partir de um valor intermediário e principalmente na faixa de altas energias [44].

Um dos primeiros modelos para descrever esse tipo de fenômeno foi proposto por Bowman et al. [44] conhecido como *abrasion-ablation model*.

Nessa proposta, a fragmentação nuclear ocorreria em dois estágios:

- 1° Primeiramente os nucleons, situados na parte mais externa dos núcleos, são "arrancados" (*abraded*) a medida que dois íons energéticos passa em relação um ao outro;
- 2° Em seguida, o projétil excitado e os fragmentos do alvo decaem por emissão de partículas.

Várias modificações se seguiram no modelo original, com a inserção de novas considerações, a medida que os dados experimentais as solicitavam e as possibilidades de cálculos computacionais se aprimoravam, mas a idéia básica do processo conservou-se inalterada.

Carlson et al. [43] aprimoraram o *abrasion-ablation model* considerando, como dados de entrada nos cálculos computacionais, a seção de choque total nucleon-nucleon, a densidade dos núcleos-alvo e o balanço de energia, que determina a temperatura dos resíduos.

Tabela 7.1: Fragmentação do ^{16}O

^{15}O	$\sigma = 42mb$
^{15}N	$\sigma = 23mb$
^{14}N	$\sigma = 31mb$
^{13}C	$\sigma = 28mb$
^{12}C	$\sigma = 36mb$

Tabela 7.2: Fragmentação do ^{12}C

^{11}C	$\sigma = 55mb$
^{11}B	$\sigma = 30mb$

O resultado do cálculo da seção de choque dos fragmentos resultantes nas colisões do próton $E_{lab}^{proton} = 180\text{MeV}$ com os alvos ^{16}O e ^{12}C (alvos especialmente escolhidos considerando a composição química dos tecidos do corpo humano) estão indicados nas tabelas 7.1 e 7.2¹.

Note que estas seções de choque são muito pequenas se comparadas com as atômicas (da ordem de 10^4 barns).

Para calcular as energias desses fragmentos (tanto do alvo como do projétil, caso por exemplo da incidência de íons de carbono) residuais utilizamos o modelo estatístico de Goldhaber [45].

7.2.1 Modelo Estatístico de Goldhaber

No sistema de referência (em repouso) do projétil, a distribuição de momento dos fragmentos residuais, resultantes de colisões entre íons pesados relativísticos e vários alvos nucleares [45, 8], mostra seguir a forma

$$\exp\left(-\frac{p^2}{2\zeta^2}\right), \quad (7.1)$$

¹Agradecimento ao Prof. Brett Carlson.

Figura 7.1: Processo de Fragmentação Nuclear

ou seja, curvas gaussianas com espessura $\varsigma \approx m_\pi c$, não importando a massa do fragmento.

Esses modelos de desintegração foram entendidos [45] como um processo governado pela distribuição de momento de cada nucleon do projétil antes da colisão, e dados mais precisos mostraram que ς^2 varia com o número de massa do fragmento residual de acordo com a expressão

$$\varsigma^2 = \varsigma_0^2 \frac{A(F - A)}{(F - 1)} \quad (7.2)$$

com $\varsigma_0 \approx 90 \text{ MeV}/c^2$.

Deste modo, a distribuição de momento dos *projéteis-fragmentos* são explicados em termos do momento quadrático médio dos nucleons no projétil original.

De fato, suponha um alvo com massa A (ou seja, o alvo possui A nucleons) em repouso. Portanto, no centro de massa do alvo, temos $\mathbf{p}_A = 0$, em outras palavras, neste referencial cada os A nucleons do alvo possuem momento total nulo.

Vide Figura 7.1.

Se um fragmento de massa F é originado após um processo de colisão com o alvo de massa A , qual seria o momento total quadrático médio, $\mathbf{p}_F^2$, do fragmento?

²Dado experimental

Usando o modelo do Gás de Fermi, os nucleons no alvo possuem, cada um, o momento quadrático médio $\langle \mathbf{p}_i \rangle = \frac{3}{5} p_{Fermi}^2$ onde $p_{Fermi} \approx 230 MeV/c$ é o momento de Fermi para o oxigênio $[45]^3$.

Portanto, de $\mathbf{p}_A = 0$ temos,

$$\mathbf{p}_A^2 = \left(\sum_i^A \mathbf{p}_i \right)^2 = 0$$

o que implica pela consevação do momento,

$$\left\langle \left[\sum_i^A \mathbf{p}_i \right]^2 \right\rangle = A \langle \mathbf{p}_i^2 \rangle + \sum_{i \neq j} \langle \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j \rangle = 0 \quad (7.3)$$

Tomando a média em todos os $i \neq j$ temos,

$$\sum_{i \neq j} \langle \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j \rangle = A(A-1) \langle \langle \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j \rangle \rangle$$

e assim,

$$\langle \langle \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j \rangle \rangle = - \frac{\langle \mathbf{p}^2 \rangle}{A-1}. \quad (7.4)$$

Como vimos, o fragmento de massa F emitido do núcleo-alvo A tem distribuição de momento descrita por uma função gaussiana (ver Figura 7.2) de largura ς^2 (dispersão do momento do fragmento), como mostra a expressão 7.1, sendo então

³De fato, identificando $\varsigma_0^2 = \frac{1}{3} \langle \mathbf{p}^2 \rangle$ obtemos $\varsigma_0^2 = \frac{(\hbar k_{Fermi})^2}{5}$ e portanto, $p_{Fermi} = \hbar k_{Fermi} = \sqrt{5} \varsigma_0 \approx 230 MeV/c$ para o ^{16}O , considerando o valor teórico de $\varsigma_0 = 100 MeV/c$.

Figura 7.2: Distribuição de Momento do Fragmento de massa F

$$\begin{aligned}
 \zeta^2 &= \frac{1}{3} \langle \mathbf{p}_F^2 \rangle \\
 &= \frac{1}{3} \left\langle \sum_i^F \mathbf{p}_i^2 + \sum_{i \neq j}^F \langle \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j \rangle \right\rangle \\
 &= \frac{1}{3} F \langle \mathbf{p}_i^2 \rangle + F(F-1) \langle \langle \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j \rangle \rangle
 \end{aligned}$$

Usando (7.4)⁴ obtemos:

$$\begin{aligned}
 \zeta^2 &= \frac{1}{3} \frac{F(A-F)}{A-1} \langle \mathbf{p}_i^2 \rangle \\
 &= \frac{F(A-F)}{A-1} \frac{1}{5} (\hbar k_{Fermi})^2.
 \end{aligned} \tag{7.5}$$

⁴Note que a identificação $\zeta^2 = \frac{1}{3} \langle \mathbf{p}_F^2 \rangle$ é feita por tomarmos somente uma das três componentes do momento do fragmento, $\mathbf{p}_F$, para fins de cálculo da sua dispersão (largura da gaussiana).

Portanto, a faixa de energia interna do fragmento de massa F , sem levar em consideração as interações entre seus nucleons, será da ordem de⁵:

$$\begin{aligned} E_F &\approx \frac{\zeta^2}{2m_0 F} \\ &= \left(\frac{A - F}{A - 1} \right) \frac{1}{5} \frac{p_{Fermi}^2}{2m_0} \end{aligned} \quad (7.6)$$

7.2.2 Alguns resultados interessantes:

Conhecendo a expressão geral (7.6) podemos obter alguns dados interessantes sobre a energia cinética dos fragmentos das reações.

Vimos na seção anterior que, no caso do ^{16}O , temos $p_{Fermi} \approx 230 MeV/c$. Substituindo esse valor em (7.6) obtemos em MeV a seguinte expressão para E_F :

$$E_F \approx 5.7 \left(\frac{A - F}{A - 1} \right) \quad (7.7)$$

lembrando que A é a massa do núcleo-alvo (neste caso $A = 16$) e F é a massa do fragmento residual (ver tabela 7.1).

Na Tabela 7.3 fornecemos as energias E_F de cada resíduo, resultante da fragmentação do oxigênio, assim como seus respectivos alcances na água⁶.

Note que as energias dos núcleos (fragmentos) da Tabela 7.3 são muito pequenas indicando que esses núcleos podem atuar como alvos ionizados para o feixe incidente de prótons.

⁵Lembrar que, ao considerar um gás ideal de Fermi, teremos como energias permitidas $E = \frac{p^2}{2m}$

⁶Dados sobre o alcance das partículas foram obtidos utilizando o código STOPX, que opera baseado na equação (3.54). Agradecimento à Profa. Alinka Lépine.

Tabela 7.3: Energias e Alcance (em água) dos fragmentos do ^{16}O

$E_{15\text{O}} = 0.38\text{MeV}$	$x_{15\text{O}} = 1.08\mu\text{m}$
$E_{15\text{N}} = 0.38\text{MeV}$	$x_{15\text{N}} = 1.135\mu\text{m}$
$E_{14\text{N}} = 0.76\text{MeV}$	$x_{14\text{N}} = 1.76\mu\text{m}$
$E_{13\text{C}} = 1.14\text{MeV}$	$x_{13\text{C}} = 2.6\mu\text{m}$
$E_{12\text{C}} = 1.52\text{MeV}$	$x_{12\text{C}} = 3.06\mu\text{m}$

Além disso, as partículas produzidas na fragmentação percorrem distâncias que não ultrapassam a dimensão celular (diâmetro da célula da ordem de $20\mu\text{m}$; diâmetro do núcleo celular da ordem de $6\mu\text{m}$).

Essas interações (partículas) secundárias, provavelmente com efeitos pequenos, podem no entanto ocasionar uma pequena dispersão na fórmula de perda de energia de Bethe-Bloch, como visto no Capítulo 6.

7.3 Taxa de Reação

No cálculo da *taxa da reação*, ou seja, da produção de energia na reação nuclear que estamos estudando, devemos levar em consideração a agitação térmica no interior dos núcleos envolvidos e por isso utilizamos a distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann com um fator apropriado.

No caso de uma reação tendo como projétil o próton, com $E_{lab} = 180\text{MeV}$, incidente num alvo de massa A temos que, no centro de massa a energia será:

$$E_{cm} = \frac{E_{lab}}{1 + \frac{1}{A}} = \frac{A}{A+1} \frac{1}{2} m_0 v^2 = \frac{1}{2} \mu v^2 \quad (7.8)$$

Para a produção de j espécies, a taxa de reação R é dada por:

$$R_j = N_{alvo} \int \sigma_j(E_{cm}) \exp\left(-\frac{E_{cm}^{alvo}}{kT}\right) v d^3v, \quad (7.9)$$

onde $v = \sqrt{2\mu E_{cm}}$ é a velocidade relativa, com $\mu = \frac{A}{A+1} m_0$, $\sigma(E_{cm})$ a seção de choque (vide Tabela (7.1), N_{alvo} é a densidade de núcleos no alvo, m_0 a massa do nucleon ($m_0 c^2 \approx 931 \text{ MeV}$) e $E_{cm}^{alvo} = \frac{1}{2} \frac{A}{(A+1)^2} m_0 v^2$ é a energia cinética do núcleo-alvo no centro de massa do sistema $p + A$.

A equação para obtermos a taxa de reação, ou seja, a quantidade de colisões que ocorrem por unidade de tempo, é muito comum em Astrofísica para calcular a produção de elementos nas estrelas. Nesse contexto, a utilização da distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann pra os alvos primários é um procedimento usual para incorporar os efeitos térmicos nesses cálculos.

De fato, a distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann, já normalizada, tem a forma geral:

$$P(v) = \left(\frac{\mu}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{\mu v^2}{kT} \right) \quad (7.10)$$

No caso de sistemas gerais $A + B$, a taxa de reação R_{AB} é dada pela expressão:

$$R_{AB} = \frac{1}{1 + \delta_{AB}} \int \sigma(E) N v P(v) d^3v, \quad (7.11)$$

onde δ_{AB} é o delta de Kroenecker que considera o caso das reações entre partículas idênticas (por exemplo, no caso de $p + p$ temos $\delta_{pp} = 1$ e assim teremos um fator multiplicativo $1/2$), $\sigma(E)$ é a seção de choque que depende da energia (caso a energia seja muito baixa pode ser considerada constante) e N é a densidade de partículas (ou seja, o número de partículas por volume).

Substituindo (7.10) em (7.11) obtemos a expressão:

$$R_{AB} = \left(\frac{1}{1 + \delta_{AB}} \right) \left(\frac{\mu}{2\pi kT} \right)^{3/2} N \int_0^\infty 4\pi \sigma(E(v)) \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{\mu v^2}{kT} \right) d^3v, \quad (7.12)$$

semelhante à expressão (7.9).

Qualitativamente, caso tenhamos uma seção de choque constante, podemos interpretar essa grandeza como a quantidade de elementos por unidade de tempo que serão gerados de um certo número de partículas em um dado volume que colidem com velocidade média $\bar{v}$.

Na faixa de energia correspondente à energia de Fermi do fragmento, dada pelas equação (7.6), a seção de choque pode ser considerada constante (como função de E_{cm}) e podemos calcular analiticamente a integral gaussiana na equação (7.9) fornecendo o resultado:

$$R_j = 2\pi N_{alvo} \sigma_j(E_{cm}) \left\{ \frac{1}{\lambda^2} - \frac{1}{\lambda} \exp(-\lambda v_F^2) \left[\frac{v_F^2}{2} + \frac{1}{\lambda} \right] \right\} \quad (7.13)$$

onde $\lambda = \frac{1}{2} \frac{Am_0}{(A+1)^2} \frac{1}{kT}$ e v_F é dada pela equação (7.6) pois

$$E_F \approx \frac{\sigma^2}{2m_0F} = \frac{v_F^2}{2m_0F}, \quad (7.14)$$

donde resulta

$$R_j = 2\pi N_{alvo} \sigma_j(E_{cm}) \left\{ \frac{4(k_bT)^2(A+1)^4}{(Am_0)^2} + \right. \\ \left. - \frac{(k_bT)(A+1)^2}{\frac{1}{2}Am_0} \left[\frac{k_bT}{2} + \frac{k_bT(A+1)^2}{\frac{1}{2}Am_0} \right] \exp \left(-\frac{A}{(A+1)^2F} \right) \right\} \quad (7.15)$$

A temperatura deve influenciar muito pouco a taxa de reação, mas seria importante considerar a equação (7.15) para analisar os efeitos de possíveis variações de temperatura nas diferentes regiões do tecido, principalmente na região dos tumores onde existe um gradiente de temperatura devido à alta atividade de reprodução celular.

Capítulo 8

Conclusões

Nesta dissertação estudamos correções, devido à influência das interações nucleares, que deveriam contribuir na dispersão da curva da perda de energia das partículas pesadas carregadas (em particular, de prótons com energia de 180MeV) ao atravessarem a matéria.

Além disso, calculamos as energias dos resíduos resultantes da fragmentação do ^{16}O e seus respectivos alcances na água (localização do Pico de Bragg dos fragmentos).

Como dito no começo deste trabalho, um cientista deve colocar a vida e o bem estar do seres vivos no cerne de seus objetivos.

Muitas pesquisas têm sido realizadas e muitos trabalhos publicados orientados especialmente às possíveis causas, tratamentos e métodos de diagnóstico eficientes no combate ao câncer.

A radioterapia com partículas pesadas carregadas é uma perspectiva de melhores condições de vida e, em alguns casos, de cura para muitos dos pacientes diagnosticados com câncer.

A literatura sobre o assunto tratado neste trabalho é muito ampla e diversificada e o leitor encontrará, nas referências bibliográficas como também no Apêndice, material suficiente para o seu aprofundamento em outros tópicos pertinentes.

Os efeitos estudados nesta contribuição, como os decorrentes do potencial nuclear, da possível fragmentação do núcleo ou mesmo do projétil (no caso da incidência de íons de carbono, por exemplo) e da agitação térmica são

muito pequenos. Conseqüentemente, a dispersão na curva de Bethe-Bloch, acima mencionada, também é pequena.

No entanto, a medida que novos equipamentos são desenvolvidos e novos hadrons são utilizados como projéteis (por exemplo, os íons de carbono) tornando as terapias com radiação cada vez mais precisas e multifuncionais (por exemplo, na irradiação com íons pesados se obtém imagens *in vivo* da interação do feixe com o tecido), tais correções devem ser aprimoradas e levadas em consideração.

Esperando que *nascendo a idéia não morra*, este trabalho, além de uma considerável contribuição na área de pesquisa em física básica, deve ser interpretado como uma pedra inicial de estímulo para a possível implementação, em nosso país, dessa modalidade de tratamento.

Bibliografia Adicional

- M. L. Goldberger, "The Interaction of High Energy Neutrons and Heavy Nuclei", *Phys. Rev.* **74**, 1269 (1948).
- F. C. Barker and R. E. Peierls, "On the Definition of the Effective Range of Nuclear Forces", *Phys. Rev.* **75**, 312 (1949).
- H. A. Bethe, "Theory of the Effective Range in Nuclear Scattering", *Phys. Rev.* **76**, 38 (1949).
- G. F. Chew and M. L. Goldberger, "On the Analysis of Nucleon-Nucleon Scattering Experiments", *Phys. Rev.* **75**, 1637 (1949).
- S. Fernbach et al., "The Scattering of High Energy Neutrons by Nuclei", *Phys. Rev.* **73**, 1352 (1949).
- M. Abramowitz, H. A. Antosiewicz, "Coulomb Wave Functions in the Transition Region", *Phys. Rev.* **96**, 75 (1954).
- L. C. Biedenharn et al., "Coulomb Functions for Large Charges and Small Velocities", *Phys. Rev.* **97**, 542 (1955).
- M. L. Goldberger and K. M. Watson, "Concerning the Notion of *Time Interval* in S-Matrix Theory", *Phys. Rev.* **127**, 2284 (1962).
- M. L. Goldberger and K. M. Watson, "Measurement of Time Correlations for Quantum-Mechanical Systems", *Phys. Rev.* **134**, B919 (1964).
- <http://www.inca.gov.br>
- H. A. Weidenmüller, "Theory of (p,p') and (p,n) reactions through the isobaric analogue resonances", *Nuclear Physics A* **99**, 289 (1967).

- P. J. Karol, "Nucleus-nucleus reaction cross sections at high energies: Soft-spheres model", *Phys. Rev. C* **11**, 1203 (1975).
- W. T. Chu et al., "Instrumentation for Treatment of Cancer using Proton and Light-Ion Beams", *Rev. Sci. Instrum.* **64**, 2055 (1993).
- M. Scholz, G. Kraft, "Radiobiological aspects of Therapy Planning for Heavy Charged Particle Beams", *Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH*, **GSI-93-51 PREPRINT** Juli 1993.
- M. Krämer, G. Kraft, "Heavy Ion Track Structure Calculations", *Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH* **GSI-94-08 PREPRINT**, Januar 1994.
- M. Scholz, G. Kraft, "Calculation of Survival in Charged Particle and Neutron Beams on Track Structure", *Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH* **GSI-95-20 PREPRINT** März 1995.
- J. F. Sutcliffe, "A review of *in vivo* experimental methods to determine the composition of the human body", *Phys. Med. Biol.* **41**, 791 (1996).
- G. Gordon Steel, "From Targets to Genes: a brief history of Radiosensitivity", *Phys. Med. Biol.* **41**, 205 (1996).
- I. Schall et al., "Charge-changing Nuclear Reactions of Relativistic Light-Ion Beams passing through Thick Absorbers", *Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH* **GSI-96-21 PREPRINT** Mai 1996.
- G. Kraft et al., "Physics of Particle Tracks and Radiation Damage to Chromatin", *Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH*, **GSI-96-59 PREPRINT** November 1996.
- G. Kraft, "Radiobiology of Heavy Charged Particles", *Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH*, **GSI-96-60 PREPRINT** November 1996.
- A. Lennox, "Neutron and Proton Therapy in the Treatment of Cancer", *Fermi National Accelerator Laboratory*, **FERMILAB-Conf-96/211** August 1996.

- H. Homeyer, H. E. Mahnke, "Modern Applications of High Energy Ion Beams: from "single-event burnout" to human eye cancer treatment", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **120**, 303 (1996).
- G. Faldt and C. Wilkin, "Scattering Wave Functions at Bound States Poles",
arXiv:quant-ph/9610032 v1 21 Oct 1996.
- T. Bortfeld, "An analytical approximation of the Bragg curve for Therapeutic Proton Beams", *Medical Physics* **24**, 2024 (1997).
- K. Prelec, "Ions and Ion Accelerators for Cancer Treatment", *Fizika B* **6**, 177 (1997).
- S. Ménard et al., "Interaction of a high-energy proton beam with a thick target: a model description", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* **400**, 255 (1997).
- M. Scholz et al., "Computation of Cell Survival in Heavy Ion Beams for Therapy - The Model and its Approximation", *Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH*, **GSI-97-06 PREPRINT** Januar 1995.
- J. Medin and P. Andreo, "Monte Carlo calculated stopping-power ratios, waterâir, for clinical proton dosimetry (50-250 MeV)", *Phys. Med. Biol.* **42**, 89 (1997).
- Radiologische Universitätsklinik Heidelberg, Deutsches Krebsforschungszentrum Heidelberg (DKFZ) and Gesellschaft für Schwerionenforschung Darmstadt (GSI), "Construction of a Clinical Therapy Facility for Cancer Treatment with Ion Beams - A Project Proposal", September 1998.
- S. Agosteo et al., "Secondary Neutron and Photon Dose in Proton Therapy", *Radiotherapy and Oncology* **48**, 293 (1998).
- H. Paganetti, "Calculation of the spatial variation of relative biological effectiveness in a therapeutic proton field for eye treatment", *Physics in Medicine and Biology* **43**, 2147 (1998).
- J. F. Ziegler, "The Stopping of Energetic Light Ions in Elemental Matter", *J. Appl. Phys./Rev. Appl. Phys.* **85**, 1249 (1999).

- I. Tomlinson and W. Bolmer, "Selection, the mutation rate and cancer: Ensuring that the tail does not wag the dog", *Nature Medicine* **Vol. V**, 11 (January 1999).
- C. Tsallis, "Nonextensive Statistics: Theoretical, Experimental and Computational Evidences and Connections", *Brazilian Journal of Physics* **29**, no. 1, March 1999.
- B. Gottschalk, R. Platais and H. Paganetti, "Nuclear Interactions of 160 MeV Protons stopping in cooper: A test of Monte Carlo Nuclear Models", *Medical Physics* **26** (12), 2597 (1999).
- J. J. W. Lagendijk, "Hyperthermia Treatment Planning", *Phys. Med. Biol.* **45**, R61 (2000).
- T. E. Wheldon, "Radiation Physics and Genetic Targeting: new directions for Radiotherapy", *Phys. Med. Biol.* **45**, R77 (2000).
- C. Gruppen, "Tumour Therapy with Particle Beams", **arXiv:physics/0004015 10 Apr 2000**.
- L. Cella et al., "New Techniques in Hadrontherapy: Intensity Modulated Proton Beams", *First International Workshop on Space Radiation Research and Eleventh Annual NASA Space Radiation Health Investigators' Workshop*, May 2000.
- E. A. Blakely, "New Measurements for Hadrontherapy and Space Radiation: Biology", *First International Workshop on Space Radiation Research and Eleventh Annual NASA Space Radiation Health Investigators' Workshop*, May 2000.
- B. Jones and R. G. Dale, "Estimation of Optimum Dose per Fraction for High-LET Radiations: Implications for Proton Radiotherapy", *Int. J. Radiation Oncology Biol. Phys.* **48**, 1549 (2000).
- V. Latora and A. Rapisarda, "Dynamical Quasi-Stationary States in a system with long-range forces", **arXiv:cond-mat/0006112 v1 07 Jun 2000**.
- J. Miller, "Recent measurements for Hadrontherapy and Space Radiation: Nuclear Physics", *1st International Workshop on Space Radiation*

Research and 11th Annual NASA Space Radiation Health Investigators' Workshop - Arona - Italy, May 27-31, 2000.

- E. J. Hall, "Genomic Instability, Bystander Effect, Cytopalsmic Irradiation and other phenomena that may achieve fame without fortune", First International Workshop on Space Radiation Research and Eleventh Annual NASA Space Radiation Health Investigators' Workshop, *Physica Medica* **XVII**, Supplement 1, 21 (2001).
- L. Judas and M. Lokajicek, "Cell Inactivation by Ionizing Particles and the Shapes of Survival Curves", *J. Theor. Biol.* **210**, 15 (2001).
- P. Kunderat et al., "Cell Inactivation by Diverse Ions along their tracks", *Institute of Physics, Academy of Sciences of the Czech Republic*.
- J. Kiefer, "Space radiation research in the new millenium - from where we come and where we go", First International Workshop on Space Radiation Research and Eleventh Annual NASA Space Radiation Health Investigators' Workshop, *Physica Medica* **XVII**, Supplement 1, 1 (2001).
- G. Kraft, "What we can learn from Heavy Ion Therapy for Radioprotection in Space", First International Workshop on Space Radiation Research and Eleventh Annual NASA Space Radiation Health Investigators' Workshop, *Physica Medica* **XVII**, Supplement 1, 13 (2001).
- U. Amaldi, "The Italian Hadrontherapy Project CNAO", First International Workshop on Space Radiation Research and Eleventh Annual NASA Space Radiation Health Investigators' Workshop, *Physica Medica* **XVII**, Supplement 1, 33 (2001).
- J. Miller, "Recent measurements for Hadrontherapy and Space Radiation: Nuclear Physics", 1st International Workshop on Space Radiation Research and 11th Annual NASA Space Radiation Health Investigators' Workshop, *Physica Medica* **XVII**, Supplement 1, 45 (2001).
- A.J. Lennox, "Accelerators for Cancer Therapy", *Radiation Physics and Chemistry* **61**, 223 (2001).
- A.J. Lomax, "Intensity Modulated Proton Therapy: A clinical example", *Medical Physics* **28** (3), 317 (2001).

- R. L. Clough, "High-Energy Radiation and Polymers: A review of commercial processes and emerging applications", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **185**, 8 (2001).
- X. Yan et al., "Measurement of neutron dose equivalent to proton therapy patients outside of the proton radiation field", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* **476**, 429 (2002).
- Y. Takada, "Optimum solution of dual-ring double-scattering system for an incident beam with given phase space for proton beam spreading", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* **485**, 255 (2002).
- A. K. Solomon, "Physics and Cancer", *Physics Today*, September 2002.
- A. L. Boyer et al., "Radiation in the Treatment of Cancer", *Physics Today*, September 2002.
- M. Goitein et al., "Treating Cancer with Protons", *Physics Today*, September 2002.
- A. L. Boyer, "The Physics of Intensity-Modulated Radiation Therapy", *Physics Today*, September 2002.
- R. K. Tripathi et al., "A Method for Calculating Proton-Nucleus Elastic Cross-Sections", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **194**, 229 (2002).
- H. Paganetti et al., "Relative Biological Effectiveness (RBE) Values for Proton Beam Therapy", *Int. J. Radiation Oncology Biol. Phys.* **53**, 407 (2002).
- H. Paganetti, "Nuclear Interactions in Proton Therapy: dose and relative biological effect distributions originating from primary and secondary particles", *Physics in Medicine and Biology* **47**, 747 (2002).
- E. B. Hug et al., "Proton Radiotherapy in Management of Pediatric Base of Skull Tumors", *Int. J. Radiation Oncology Biol. Phys.* **52**, 1017 (2002).

- H. Suit, "The Gray Lecture 2001: Coming Technical Advances in Radiation Oncology", *Int. J. Radiation Oncology Biol. Phys.* **53**, 798 (2002).
- V. Lebedev and S. Nagaitsev, "Particle Diffusion due to Coulomb Scattering", *Fermi National Accelerator Laboratory*, **FERMILAB-Conf-02/099-T** June 2002.
- A. J. Kreiner and A. A. Burlón, "Novel Applications of Particle Accelerators to Radiotherapy", *Heavy Ion Physics* **16**, 243 (2002).
- K. H. Schmidt et al., "Future Prospects for Secondary-Beam Production", *Nuclear Physics A* **701**, 115c (2002).
- A. de Vismes et al., "Proton Reaction Cross- Section Measurements on Stable and Neutron-Rich Nuclei as a Probe of the Nucleon-Nucleus Interaction", *Nuclear Physics A* **706**, 295 (2002).
- Shi-Lun Guo et al., "Proton Tracks in Bubble Detector", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **198**, 135 (2002).
- D. Coelho et al., "Induction of Apoptosis by high linear energy transfer (high-LET) radiation: role of p53", *Can. J. Physiol. Pharmacol.* **80**, 644 (2002).
- E. G. D. Cohen, "Statistics and Dynamics", *Physica A* **305**, 19 (2002).
- E. G. D. Cohen and L. Rondoni, "Particle, maps and irreversible thermodynamics", *Physica A* **306**, 117 (2002).
- G. Wilk and Z. Wlodarczyk, "Application of nonextensive statistics to Particle and Nuclear Physics", *Physica A* **305**, 227 (2002).
- G. Wilk and Z. Wlodarczyk, "The imprints of nonextensive statistical mechanics in high-energy collisions", *Chaos, Solitons and Fractals* **13**, 581 (2002).
- L. Rondoni and E. G. D. Cohen, "On some derivations of Irreversible Thermodynamics from dynamical system theory", *Physica D* **168-169**, 341 (2002).

- G. Noël et al., "Le Traitement par Faisceaux de Particules: Hadronthérapie partie I: Bases Physiques et Expérience Clinique de la Protonthérapie", *Cancer/Radiothérapie* **7**, 321 (2003).
- C. Barbieri and W. H. Dickhoff, "Effects of Nuclear Fragmentation on Single Particle and Collective Motions at Low Energy", *Proceedings of the Tenth International Conference on Nuclear Reaction Mechanisms*, Varenna, June 2003.
- J. Al-Khalili et al., "Many-body approach to proton emission and the role of spectroscopic factors", *Phys. Rev. C* **68**, 024314 (2003).
- H. D. Suit, "Protons to Replace Photons in External Beam Radiation Therapy?", *Clinical Oncology* **15**, S29 (2003).
- W. K. Weyrather and J. Debus, "Particle Beams for Cancer Therapy", *Clinical Oncology* **15**, S23 (2003).
- J. F. Fowler, "What can we expect from Dose Escalation using Proton Beams?", *Clinical Oncology* **15**, S10 (2003).
- M. Goitein and M. Jermann, "The Relative Costs of Proton and X-Ray Radiation Therapy", *Clinical Oncology* **15**, S37 (2003).
- A. M. Leroi et al., "Cancer Selection", *Nature Reviews / Cancer* **Vol. III**, 266 (March 2003).
- C. Beck, "Superstatistics, escort distributions and applications", **arXiv:cond-mat/0312134 v1 04 dec 2003**.
- M. Rybczynski et al., "Rapidity spectra analysis in terms of non-extensive statistic approach", *Nuclear Physics B (Proc. Suppl.)* **122**, 325 (2003).
- C. Beck and E. G. D. Cohen, "Supestatistics", *Physica A* **322**, 267 (2003).
- C. Beck, "Generalized Statistical Mechanics of Cosmic Rays", **arXiv:cond-mat/0301354 v1 20 Jan 2003**.
- J.J. Wilkens and U. Oelfke, "Analytical Linear Energy Transfer Calculations for Proton Therapy", *Medical Physics* **30** (5), 806 (2003).

- L. Levrel et al., "Local Simulation Algorithms for Coulomb Interactions",
arXiv:cond-mat/0409350 v1 14 sep 2004.
- F. Michor et al., "Dynamics of Cancer Progression", *Nature Reviews / Cancer* **Vol. IV**, 197 (March 2004).
- S. I. Striganov, "On the Theory and Simulation of Multiple Coulomb Scattering of Heavy Charged Particles", *Fermi National Accelerator Laboratory*, **FERMILAB-Conf-04/056-AD** April 2004.
- E. O. Alt et al., "Coulomb Fourier Transformation: A Novel Approach to Three-Body Scattering with Charged Particles", *Phys. Rev. C* **69**, 034002 (2004).
- B. Jones and P. Price, "Proton Therapy: Expanding Clinical Indications", *Clinical Oncology* **16**, 324 (2004).
- U. Amaldi, "Cancer Therapy with Particle Accelerators", *Nuclear Physics A* **654**, 375c (2004).
- M. J. Berryman et al., "Fluctuations and Noise in Cancer Development",
arXiv:q-bio.CB/0404009 v1 7 Apr 2004.
- A. Iomin et al., "On Tumor Development: Fractional Transport Approach",
arXiv:q-bio.TO/0406001 v1 1 Jun 2004.
- S. C. Roy and G. A. Sandison, "Scattered Neutron Dose Equivalent to a Fetus from Proton Therapy of the Mother", *Radiation Physics and Chemistry* **71**, 997 (2004).
- K. Kettern et al., "Formation of Short-Lived Positron Emitters in Reactions of Protons of Energies up to 200MeV with the Target Elements Carbon, Nitrogen and Oxygen", *Applied Radiation and Isotopes* **60**, 939 (2004).
- H. Kato et al., "Results of the first prospective study of Carbon Ion Radiotherapy for Hepatocellular Carcinoma with Liver Cirrhosis", *Int. J. Radiation Oncology Biol. Phys.* **59**, 1468 (2004).

- D. C. Weber et al., "A treatment planning comparison of Intensity Modulated Photon Therapy and Proton Therapy for Paraspinal Sarcomas", *Int. J. Radiation Oncology Biol. Phys.* **58**, 1596 (2004).
- D. C. Weber et al., "Proton beam Therapy for Meningiomas", *Int. J. Radiation Oncology Biol. Phys.* **58**, 1601 (2004).
- S. M. Qaim, "Use of Cyclotrons in Medicine", *Radiation Physics and Chemistry* **71**, 917 (2004).
- M. Masa, S. Cebrat and D. Stauffer, "Does Telomere Elongation in Cloned Organisms lead to a longer lifespan if Cancer is considered?", **arXiv:q-bio.PE/0408026 v1 30 Aug 2004**.
- C. A. Wemple et al., "MINERVA - a multi-modal radiation treatment planning system", *Applied Radiation and Isotopes* **61**, 745 (2004).
- D. T. L. Jones et al., "Proton Therapy at iThemba LABS", *Radiation Physics and Chemistry* **71**, 983 (2004).
- L. Kodjikian et al., "Survival after Proton-Beam Irradiation of Uveal Melanomas", *American Journal of Ophthalmology*, June 2004.
- B. A. Jereczek-Fossa et al., "Radiotherapy-induced thyroid disorders", *Cancer Treatment Reviews* **30**, 369 (2004).
- D. Zink et al., "Nuclear Structure in Cancer Cells", *Nature Reviews* **4**, September 2004.
- O. Bertolami, "What is fair to ask Society to fund?", *International Symposium on "Science, Knowledge and the Market"*, Instituto Superior Técnico, Lisbon, Portugal, 21-23 October 2004.
- H. Touchette and C. Beck, "Asymptotics of Superstatistics", **arXiv:cond-mat/0408091 v1 04 Aug 2004**.
- F. S. Navarra, "Information Theory approach (extensive and nonextensive) to high-energy multiparticle production processes", *Physica A* **340**, 467 (2004).
- C. Beck and E. G. D. Cohen, "Superstatistical Generalization of the Work Fluctuation Theorem", *Physica A* **344**, 393 (2004).

- C. Beck, "Superstatistics: theory and applications", *Continuum Mech. Thermodyn.* **16**, 293 (2004).
- R. van Zon and E. G. D. Cohen, "Non-equilibrium thermodynamics and fluctuations", *Physica A* **340**, 66 (2004).
- Jan Naudts and Erik Van der Straeten, "The Grand Canonical Ensemble in Generalized Thermostatistics", *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **P12002** (2004).
- Peter Hänggi and Gert-Ludwig Ingold, "Fundamental Aspects of Quantum Brownian Motion", **arXiv:quant-ph/0412052 v1 07 Dec 2004**.
- C. Tsallis, "Nonextensive Statistical Mechanics, Anomalous Diffusion and Central Limit Theorems", **arXiv:cond-mat/0412132 v1 06 Dec 2004**.
- Pasquale Calabrese and Andrea Gambassi, "On the definition of a unique effective temperature for non-equilibrium critical systems", *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **P07013** (2004).
- Antony Lomax et al., "Treatment Planning and Verification of Proton Therapy using Spot Scanning: Initial Experiences", *Medical Physics* **31**, No. 11, 3150 (2004).
- Matthias Fippel and Martin Soukup, "A Monte Carlo dose calculation algorithm for Proton Therapy", *Medical Physics* **31**, No. 8, 2263 (2004).
- M. Saiful Huq et al., "Over the foreseeable future, the growth in technical complexity of radiation therapy will continue to drive demand for more medical physicists", *Medical Physics* **31**, No. 11, 2939 (2004).
- Jan J. Wilkens, "Evaluation of Radiobiological effects in Intensity Modulated Proton Therapy: New strategies for Inverse Treatment Planning", *Medical Physics* **31**, No. 10, 2934 (2004).
- James G. Mechalakos et al., "Results of a one year survey of output for linear accelerators using IMRT and non-IMRT techniques", *Journal of Applied Clinical Medical Physics* **5**, No. 1, 64 (2004).

- Craig S. Moore et al., "Quality assurance of registration of CT and MRI data sets for treatment planning of radiotherapy for head and neck cancers", *Journal of Applied Clinical Medical Physics* **5**, No. 1, 25 (2004).
- E. Berthelet et al., "CT slice index and thickness: Impact on organ contouring in radiation treatment planning for prostate cancer", *Journal of Applied Clinical Medical Physics* **4**, No. 4, 365 (2004).
- H. Jiang and H. Paganetti, "Adaptation of GEANT4 to Monte Carlo dose calculations based on CT data", *Medical Physics* **31** (10), 2811 (2005).
- H. Paganetti, H. Jiang and A. Trofimov, "4D Monte Carlo simulation of Proton Beam Scanning: modelling of variations in time and space to study the interplay between scanning pattern and time-dependent patient geometry", *Physics in Medicine and Biology* **50**, 983 (2005).
- H. Jiang, H. Paganetti and H. Suit, "A case study on patient effective doses during Proton Radiation Treatment", *The Monte Carlo Method: Versatility Unbounded in a Dynamic Computing World*, Chattanooga, Tennessee, April 17-21, 2005, American Nuclear Society.
- E. Boman, J. Tervo and M. Vauhkonen, "Modelling the transport of ionizing radiation using the finite element method", *Physics in Medicine and Biology* **50**, 265 (2005).
- A.G. Molokanov and F. Spurný, "Biological weighted effective dose in 205 MeV clinical proton beam", *Physics in Medicine and Biology* **50**, 281 (2005).
- W. Luo et al., "Particle selection and beam collimation system for Laser-Accelerated Proton Beam Therapy", *Medical Physics* **32** (3), 794 (2005).
- J. Wilkens and U. Oelfke, "Optimization of Radiobiological Effects in Intensity Modulated Proton Therapy", *Medical Physics* **32** (2), 455 (2005).
- [http://physics.iop.org/IOP/Press/PR19\(05\)](http://physics.iop.org/IOP/Press/PR19(05))

- G. J. Naga Raju et al., "Trace elemental analysis in cancer-afflicted tissues of penis and testis by PIXE technique", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **229**, 457 (2005).
- wro05 A.J. Wroe et al., "The role of nonelastic reactions in absorbed dos distributions from therapeutic proton beams in different medium", *Medical Physics* **32** (1), 37 (2005).
- tep05 Ya. A. Teplova et al., "Energy loss calculations for fast light ions in celluloid including charge-exchange processes", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **230**, 73 (2005).
- J. A. Scheer et al., "High negative ion yield from light molecule scattering", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **230**, 330 (2005).
- M. Draxler et al., "High resolution time-of-flight low energy ion scattering", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **230**, 398 (2005).
- C. Potiriadis et al., "Influence of the target thickness on the backward and forward electron emission characteristics induced by protons incident on thin carbon foils", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **230**, 466 (2005).
- H. Ammi et al., "Mean excitation energies extracted from stopping power measurements of protons in polymers by using the modified Bethe- Bloch formula", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **230**, 68 (2005).

Referências Bibliográficas

- [1] W.C. Röntgen, "On a new kind of rays", *Journal of the Franklin Institute* **141**, 183 (1896).
- [2] E. Okuno, "Efeitos das Radiações Ionizantes e Não-Ionizantes", Notas de aula do curso de graduação em Física, Instituto de Física, Universidade de São Paulo (2003).
- [3] N. Bohr, "On the Theory of the Decrease of Velocity of Moving Electrified Particles on Passing through Matter", *Phil. Mag.* **25**, 10 (1913).
- [4] H. Bethe, "Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlung durch Materie", *Ann. Phys.* **5**, 325 (1930)
- [5] F. Bloch, "Bremsvermögen von Atomen mit mehreren Elektronen", *Z. Phys.* **81**, 363 (1933a).
- [6] R.R. Wilson, "Radiological Use of Fast Protons", *Radiology* **47**, 487 (1946).
- [7] S. Fraga, J. Karwowski and K. M. S. Saxena, "*Handbook of Atomic Data*", Amsterdam; New York: Elsevier Scientific Pub. Co. (1976).
- [8] C. A. Bertulani, M. S. Hussein and G. Münzenberg, "*Physics of Radioactive Beams*", Huntington, New York: Nova Science Publishers, Inc. (2001).
- [9] C. J. Joachain, "*Quantum Collision Theory*", North-Holland Pub. Co. (1983).
- [10] A. Messiah, "*Quantum Mechanics*", Volume II, North-Holland Pub. Co.

- [11] L. F. Canto and M. S. Hussein, "*Scattering Theory of Molecules, Atoms and Nuclei*", to be published.
- [12] H-J. Bartsch, "*Taschenbuch mathematischer Formeln*", Fachbuchverlag Leipzig (1999).
- [13] J. Mathews and R. L. Walker, "*Mathematical Methods of Physics*", 2nd Edition, Addison-Wesley Pub. Co. Inc. (1970).
- [14] G. Arfken, "*Mathematical Methods of Physics*", 2nd Edition, Academic Press New York and London (1970).
- [15] F. M. Khan, "*The Physics of Radiation Therapy*", Williams & Wilkins (1992).
- [16] C. A. Perez and L. W. Brady, "*Principles and Practice of Radiation Oncology*", 3rd Edition.
- [17] "*Radiotherapy in Cancer Management: A practical manual*", Published on behalf of the WHO-World Health Organization.
- [18] M. Abramowitz and I. Stegun, "*Handbook of Mathematical Functions*", Dover, NY (1972).
- [19] H. Goldstein, "*Classical Mechanics*", 2nd Edition, Addison-Wesley Publishing Co. (1981).
- [20] H. A. Bethe and R. W. Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics*, 2nd Edition, W. A. Benjamin, Inc. (1968).
- [21] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Revised Edition, Addison Wesley Publishing Co. (1994).
- [22] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Mechanics*, 3rd Edition, Butterworth-Heinemann (1993).
- [23] J. B. Marion and S. T. Thornton, *Classical Dynamics of Particles and Systems*, 4th Edition, Saunders College Publishing (1995).
- [24] K. Gottfried, *Quantum Mechanics*, W.A. Benjamin Inc. (1966).
- [25] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 2nd Edition, Wiley (1975).

- [26] Niels Bohr Collected Works, *Volume 8 : The Penetration of Charged Particles through Matter (1912 - 1954)*, North-Holland Physics Publishing (1987).
- [27] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 2nd Edition, (1970).
- [28] A. F. R. de Toledo Piza, *Mecânica Quântica*, EdUSP, (2003).
- [29] L. Barbosa, *Técnicas de Detecção*, Notas de Aula, CBPF.
- [30] Patricia Rebello and Mahir S. Hussein, "Nuclear Fragmentation on Protontherapy", *Brazilian Journal of Physics* **34**, No. 3A, 942 (2004).
- [31] Mahir S. Hussein e Patricia Rebello, "Combate ao Câncer ganha novas técnicas: a Física Nuclear e o tratamento de tumores", *Revista USP*, No. 66, 80-95 (2005).
- [32] Patricia Rebello, "Estudo sobre tratamento de tumores com partículas carregadas", Monografia, Dezembro 2003.
- [33] III Curso de Radioterapia Avançada, Hospital Sírio e Libânes, 10-11 julho 2003.
- [34] XXVI Reunião de Trabalho sobre Física Nuclear no Brasil, Santos, São Paulo, 01-05 setembro 2003.
- [35] G. Kraft et al., "Physics and Radiobiology of Heavy Charged Particles in relation to the use of Ion Beams for Therapy", *Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH*, **GSI-93-50 PREPRINT** Juli 1993.
- [36] R. Orecchia et al., "Clinical and Research validity of Hadrontherapy with Ion Beams", *Critical Reviews in Oncology/Hematology* **51**, 81 (2004).
- [37] G.W. Bennett and J.O. Archambeau, "Experimental tests of Proton Beam Localization", *Medical Physics* **4** (2), 115 (1977).
- [38] M.S. Wagner, "Automated range compensation for Proton Therapy", *Medical Physics* **9** (5), 749 (1982).
- [39] M.S. Hussein, Y.T. Chen and F.I.A. Almeida, "The Validity of the Classical Description of Nuclear Scattering", *American Journal of Physics*, **52** (7), 650 (1984).

- [40] M. S. Hussein et al., "Polarization Potentials in Heavy-Ion Scattering", *Physics Reports* **113**, No. 3, 133 (1984).
- [41] M. S. Hussein et al., "Small Effects in Sub-barrier Heavy-Ion Elastic Scattering", *Physical Review* **30**, No. 1, 184 (1984).
- [42] M. S. Hussein, R. A. Rego and C. A. Bertulani, "Microscopic Theory of the Total Reaction Cross Section and Application to Stable and Exotic Nuclei", *Physics Reports* (Review Section of Physics Letters) **201**, 279 (1991).
- [43] B. V. Carlson, R. C. Mastroleo and M. S. Hussein, "Fragment Production in Heavy-Ion Reactions", *Phys. Rev. C* **46**, R30 (1992).
- [44] B. V. Carlson, "Microscopic abrasion-ablation approximation to projectile fragmentation", *Phys. Rev.* **51**, 252 (1995).
- [45] A. S. Goldhaber, "Statistical Model of Fragmentation Processes", *Physics Letters* **53B**, No 4, 306 (1974).
- [46] G. Kraft, "Tumor Therapy with Heavy Charged Particles", *Progress in Particle and Nuclear Physics* **45**, S473 (2000).
- [47] ICRU Report **46**, "Photon, Electron, Proton and Neutron Interaction Data for Body Tissues" (1992).
- [48] ICRU Report **49**, "Stopping Powers and Ranges for Protons and Alpha Particles" (1993).
- [49] ICRU Report **50**.
- [50] ICRU Report **63**, "Nuclear Data for Neutron and Proton Radiotherapy and for Radiation Protection" (2000)
- [51] M. Tosaki, D. Ohsawa and Y. Isozumi, "An experimental evaluation of spacial distribution for deeply penetrating protons in carbon material", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **230**, 59 (2005).
- [52] O. Jäkel, Particular Communication (2005).