



**Universidad de San Carlos de Guatemala**  
**Facultad de Ingeniería**  
**Escuela de Ciencias**

**SIMULACIÓN DE LA EFICIENCIA DE UN DETECTOR COAXIAL  
DE HpGe CON EL SISTEMA EGSnrc**

**Gomer Gadiel Castillo Morales**

**Asesorado por M.Sc. Ricardo Enrique Contreras Folgar**

**Y**

**Lic. Héctor Eduardo Pérez Figueroa**

**Guatemala, enero de 2006**

**UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA**



**FACULTAD DE INGENIERÍA**

**SIMULACIÓN DE LA EFICIENCIA DE UN DETECTOR COAXIAL  
DE  $\text{HpGe}$  CON EL SISTEMA EGSnrc**

**TRABAJO DE GRADUACIÓN**

PRESENTADO A JUNTA DIRECTIVA DE LA FACULTAD DE  
INGENIERÍA POR

**GOMER GADIEL CASTILLO MORALES**

ASESORADO POR

**M.Sc. RICARDO ENRIQUE CONTRERAS FOLGAR**

**Y**

**LIC. HÉCTOR EDUARDO PÉREZ FIGUEROA**

AL CONFERÍRSELE EL TÍTULO DE

**LICENCIADO EN FÍSICA APLICADA**

GUATEMALA, ENERO DE 2006

**UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA  
FACULTAD DE INGENIERÍA**



**NÓMINA DE JUNTA DIRECTIVA**

<b>DECANO</b>	<b>Ing. Murphy Olympo Paiz Recinos</b>
<b>VOCAL I</b>	
<b>VOCAL II</b>	<b>Lic. Amahán Sánchez Álvarez</b>
<b>VOCAL III</b>	<b>Ing. Julio David Galicia Celada</b>
<b>VOCAL IV</b>	<b>Br. Kenneth Issur Estrada Ruiz</b>
<b>VOCAL V</b>	<b>Br. Elisa Yasminda Vides Leiva</b>
<b>SECRETARIA</b>	<b>Inga. Marcia Ivonne Véliz Vargas</b>

**TRIBUNAL QUE PRACTICÓ EL EXAMEN  
GENERAL PRIVADO**

<b>DECANO</b>	<b>Ing. Sydney Alexander Samuels Milson</b>
<b>EXAMINADOR</b>	<b>Lic. Ricardo Enrique Contreras Folgar</b>
<b>EXAMINADOR</b>	<b>Lic. Erick Hernández García</b>
<b>EXAMINADOR</b>	<b>Lic. César Antonio Izquierdo Merlo</b>
<b>SECRETARIO</b>	<b>Ing. Carlos Humberto Pérez Rodríguez</b>

## **HONORABLE TRIBUNAL EXAMINADOR**

Cumpliendo con los preceptos que establece la ley de la Universidad de San Carlos de Guatemala, presento a su consideración mi trabajo de graduación titulado:

### **SIMULACIÓN DE LA EFICIENCIA DE UN DETECTOR COAXIAL DE HpGe CON EL SISTEMA EGSnc,**

tema que me fuera asignado por la Coordinación de la Carrera de Licenciatura en Física Aplicada y aprobado por Escuela de Ciencias de la Facultad de Ingeniería con fecha 11 de noviembre de 2005.

**Gomer Gadiel Castillo Morales**

## **AGRADECIMIENTOS**

Son muchas las personas que a lo largo de mi vida, han influido de una u otra forma, para que haya llegado hasta este punto del espacio-tiempo. Pecaría de injusto si no mencionase a alguna de ellas, por lo que, para ser justo y no omitir ningún nombre, no mencionare a ninguno, y simplemente debo decir...

**Gracias**

# ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES	v
LISTA DE SÍMBOLOS	vii
GLOSARIO	ix
RESUMEN	xi
OBJETIVOS	xiii
INTRODUCCIÓN	xv
<b>1. TRANSPORTE DE RADIACIÓN EN EL PROGRAMA EGSnrc</b>	<b>1</b>
1.1. Introducción . . . . .	1
1.2. Interacción de fotones . . . . .	3
1.2.1. Producción de pares y tripletes . . . . .	3
1.2.2. Dispersión incoherente -Compton- . . . . .	8
1.2.3. Absorción foto-eléctrica . . . . .	18
1.2.4. Dispersión coherente -Dispersión de <i>Rayleigh</i> - . . . . .	25
1.3. Relaciones Atómicas . . . . .	26
1.4. Simulación del transporte de electrones . . . . .	31
1.4.1. Discusión general . . . . .	31
1.4.2. Bremsstrahlung . . . . .	39
1.4.3. Colisiones inelásticas discretas . . . . .	47
1.4.4. Aniquilación fotón/positrón-electrón . . . . .	50
1.4.5. Poder de frenado de colisiones . . . . .	52
1.4.6. Secciones eficaces de dispersión elástica . . . . .	54
1.4.7. Dispersión elástica múltiple . . . . .	62
1.4.8. Algoritmo de paso de electrón . . . . .	69
1.4.9. Algoritmo de cruce de fronteras . . . . .	72
1.4.10. Otros aspectos de historia condensada . . . . .	74

<b>2.</b>	<b>EL SISTEMA EGSnrc</b>	<b>81</b>
2.1.	Descripción general de la implementación . . . . .	81
2.2.	Los bloques COMMON . . . . .	83
2.3.	La secuencia de operaciones . . . . .	91
2.3.1.	Sobreescritura por el usuario de macros y predeterminados del EGS (Paso 1) . . . . .	92
2.3.2.	Inicialización de la llamada a Pre-HATCH . . . . .	96
2.3.3.	LLamada a HATCH (Paso 3) . . . . .	102
2.3.4.	Inicialización de HOWFAR y HOWNEAR (Paso 4) . . . . .	103
2.3.5.	Inicialización de AUSGAB (Paso 5) . . . . .	103
2.3.6.	Inicialización para la reducción de varianza (Paso 5b) . . . . .	104
2.3.7.	Determinación de los parámetros de la partícula incidente (Pa- so 6) . . . . .	104
2.3.8.	Llamada a SHOWER (Paso 7) . . . . .	105
2.3.9.	La salida de resultados (Paso 8) . . . . .	105
2.4.	Especificaciones para HOWFAR . . . . .	106
2.4.1.	Un ejemplo de HOWFAR . . . . .	109
2.5.	Especificaciones para HOWNEAR . . . . .	109
2.6.	Especificaciones para AUSGAB . . . . .	110
2.6.1.	Comprobación del desborde del STACK . . . . .	112
2.6.2.	Estado del STACK en varias llamadas de AUSGAB . . . . .	112
2.7.	Finalización de las historias de las partículas . . . . .	116
2.8.	Generadores de números al azar . . . . .	117
2.9.	Opciones de reducción de varianza . . . . .	118
2.9.1.	Rango de rechazo . . . . .	119
2.9.2.	Partición bremsstrahlung . . . . .	120
2.9.3.	Ruleta Rusa . . . . .	121
<b>3.</b>	<b>EL PROBLEMA DE LA EFICIENCIA EN UN DETECTOR DE HpGe</b>	<b>123</b>
3.1.	Detección de la eficiencia . . . . .	123
3.2.	Simulación de la eficiencia en un detector de HpGe . . . . .	124
3.2.1.	PEGS4 . . . . .	124

3.2.2. DOSRZnrc . . . . .	126
3.2.3. Resultados y su discusión . . . . .	128
<b>CONCLUSIONES</b>	<b>135</b>
<b>RECOMENDACIONES</b>	<b>137</b>
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>139</b>



# ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

## FIGURAS

1.	Diagrama de Feynman para el proceso de producción de pares . . .	2
2.	Diagrama de Feynman para un proceso Compton . . . . .	8
3.	Probabilidades de interacción $v_j$ para diferentes capas . . . . .	23
4.	Distribución de las energías del fotón muestreadas por la rutina BREMS . . . . .	43
5.	Distribución angular para la emisión de fotones bremsstrahlung de 10 keV por electrones de 100 keV en aluminio. . . . .	45
6.	El factor de corrección de Mott $R_{mott}$ . . . . .	59
7.	El parámetro de pantalla $\eta$ . . . . .	61
8.	La distribución $q_{SR}^{(2+)}$ para tres longitudes de paso. . . . .	65
9.	La sección eficaz total para interacciones discretas en grafito. . .	78
10.	La sección eficaz total por unidad de pérdida de energía. . . . .	79
11.	Estructura del sistema del código EGSnrc cuando es usado por un código de usuario . . . . .	82
12.	Un ejemplo de una geometría de 3 regiones para HOWFAR. El eje Y ingresa a la página. . . . .	108
13.	Ejemplo de un archivo de ingreso para el código DOSRZnrc . . .	125
14.	Ejemplo de un archivo -extracto- de salida del sistema EGSnrc	127
15.	(cont.)Ejemplo de un archivo -extracto- de salida del sistema EGSnrc . . . . .	128
16.	Eficiencia del detector 2. Comparación entre la simulación y el experimento . . . . .	129
17.	Eficiencia del detector 2. Comparación entre la simulación y el experimento . . . . .	130
18.	Eficiencia del detector 1. Comparación entre la simulación y el experimento . . . . .	131

19.	Eficiencia relativa del detector 1, para distintas configuraciones de la fuente, distancia de la fuente al detector 20cm . . . . .	132
20.	Eficiencia absoluta del detector 1, para una fuente puntual, distancia de la fuente al detector 20cm . . . . .	133
21.	Actividad de la fuente de $^{60}\text{Co}$ . . . . .	134
22.	Actividad de la fuente de $^{137}\text{Cs}$ . . . . .	134

## TABLAS

I.	Transiciones de relajación manejadas por el sistema EGSnrc . . . . .	29
II.	Descripción de los bloques COMMON accesibles al usuario en el sistema EGSnrc. . . . .	84
III.	Descripción de los bloques COMMON accesibles al usuario en el sistema EGSnrc. . . . .	85
IV.	Descripción de los bloques COMMON accesibles al usuario en el sistema EGSnrc. . . . .	86
V.	Descripción de los bloques COMMON accesibles al usuario en el sistema EGSnrc. . . . .	87
VI.	Descripción de los bloques COMMON accesibles al usuario en el sistema EGSnrc. . . . .	88
VII.	Descripción de los bloques COMMON accesibles al usuario en el sistema EGSnrc. . . . .	89
VIII.	Descripción de los bloques COMMON accesibles opcionalmente al usuario en el sistema EGSnrc. . . . .	90
IX.	Valores por defecto de IARG y para los cuales se deposita la energía	111
X.	Valores de IARG que no están habilitados por defecto. . . . .	113
XI.	Descripción de los materiales usados en los cálculos Monte Carlos del sistema EGSnrc. . . . .	124

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\sigma$	Sección eficaz
$Z$	Número atómico
$k$	Energía de un fotón incidente.
$f_c(z)$	Corrección de Coulomb
$q$	Momento de transferencia
$J(p_z)$	Perfil de Compton
$\Omega$	Ángulo sólido
$p$	Momento, cuatro-momento
$E$	Energía
$\varepsilon$	Energía
$\varepsilon$	Eficiencia
$N$	Número de partículas, número de historias, constante de normalización

$\beta$	Velocidad de un electrón
$r$	Número al azar
$n$	Densidad atómica o molecular
$N_A$	Número de Avogadro
$M_A$	Masa molar
$\delta$	Función delta de Dirac
$L$	Poder de frenado
$T$	Energía
$\theta, \varphi, \chi$	Ángulo de dispersión
$a$	Radio de Thomas-Fermi
$\Gamma$	Función gamma
$\eta$	Parámetro de pantalla

# GLOSARIO

<b>AE</b>	Energía umbral o de corte para la creación de electrones o positrones secundarios.
<b>AP</b>	Energía umbral o de corte para la creación de fotones secundarios.
<b>DOSRZnrc</b>	Código de usuario diseñado para el cálculo de dosis absorbida en geometrías cilíndricas.
<b>EGSnrc</b>	Electron Gamma Shower. Código de propósito general que provee subrutinas usadas para cálculos en Monte Carlo para el transporte de fotones y electrones.
<b>Geometría</b>	Descripción del arreglo -coordenadas- usado en un cálculo Monte Carlo
<b>Historia</b>	En cálculos Monte Carlo, es el transporte completo de una partícula inicial y de las secundarias creadas a lo largo de su camino.
<b>PDF</b>	Probability Distribution Function. Función de distribución de probabilidad. Es una medida de la probabilidad de observar un evento.

**PEGS4**

Preprocessor for EGS4. Programa para la creación de datos de las secciones eficaces de los materiales especificados por el usuario.

**Sección eficaz**

Área, en la que si toda la energía que incide sobre la misma fuera arrojada en todas direcciones, entonces ésa es la cantidad de energía que sería dispersada; se usa constantemente, dondequiera que ocurra algún fenómeno proporcional a la intensidad de un haz.

# RESUMEN

El propósito del presente trabajo, es simular la eficiencia de un detector coaxial de HpGe y, con ello, dar validez y respaldo a lo obtenido en el experimento.

En la primera parte del trabajo, se desarrolla y explica, la física detrás de la simulación del transporte de partículas, utilizada en el sistema EGSnrc, asimismo se detallan los algoritmos de simulación.

En la segunda parte, se da a conocer la estructura del sistema EGSnrc y su funcionamiento.

En la parte final, se hacen varias simulaciones, para dos detectores distintos, y para distintas configuraciones geométricas de la fuente y del detector, los resultados obtenidos en la simulación, están dentro del rango de incerteza del experimento.

Los procesos de simulación de transporte de partículas con el sistema EGSnrc, son un medio eficaz y eficiente, de dar respaldo a experimentos que involucren transporte de radiación.



# OBJETIVOS

## General

Simular la curva de eficiencia de un detector HpGe para varias configuraciones geométricas de la fuente de radiación y su comparación con la curva de eficiencia obtenida, experimentalmente.

## Específicos

1. Establecer al sistema EGSnrc, dentro de la carrera de Licenciatura en Física Aplicada, como un software para validación de experimentos con radiaciones.
2. Validar la curva de eficiencia experimental de un detector de HpGe.



# INTRODUCCIÓN

El conocimiento de la eficiencia de un detector de HpGe, es útil para poder conocer la actividad del elemento radiactivo que se está midiendo o detectando. Debido a la poca estandarización en los tamaños de los detectores de HpGe, y a la variedad de sus geometrías -planares, coaxiales, etc.-, es poco probable encontrar en la literatura una comparación adecuada al detector del que se quiere conocer su eficiencia y a la geometría de la fuente en consideración, la mayoría de veces es necesario hacer interpolaciones entre valores de la literatura conocida para contrastar la calibración de eficiencia del detector en cuestión [3].

Una aproximación adecuada es derivar los datos de la eficiencia a partir de cálculos basados en el conocimiento de la probabilidad de cada una de las interacciones de rayos gamma primarios dentro del detector. Los códigos Monte Carlo, en este caso, proveen de métodos precisos de cálculo para la medición de la eficiencia, [47].

El sistema EGSnrc, es un código Monte Carlo que simula el transporte de fotones y partículas cargadas en una geometría arbitraria, para partículas con energías desde unos keV hasta varios cientos de GeV.

El método Monte Carlo toma su nombre a través del uso de las distribuciones de probabilidad y números al azar, lo que lleva a pensar en el famoso casino de Monaco. En este trabajo se dará una visión de como el sistema Monte Carlo EGSnrc, es usado para describir el transporte de radiación y el enfoque en algunos de los parámetros que son esenciales para los cálculos.

La esencia de los cálculos Monte Carlo es descrita por D.W.O Rogers y A.F. Bielajew:

En el contexto de transporte de radiación, las técnicas Monte Carlo son aquellas que simulan las trayectorias al azar de partículas individuales al usar números aleatorios generados, para muestrear las distribuciones de probabilidad que gobiernan los procesos físicos involucrados. Al ser simulados un número grande de historias, pueden obtenerse valores promedios de cantidades macroscópicas, tales como: la deposición de energía.

La técnica de Monte Carlo se aplica, generalmente, cuando no existe una solución analítica exacta o si esta lleva demasiado tiempo para solucionarla. Resolver, analíticamente, las ecuaciones de transporte de fotones y electrones puede ser muy complejo si no imposible, especialmente para medios no homogéneos.

En el presente trabajo, se hace uso del sistema EGSnrc, para simular la eficiencia de un detector coaxial de HpGe, para distintas configuraciones geométricas de la fuente y el detector.

# 1. TRANSPORTE DE RADIACIÓN EN EL PROGRAMA EGSnrc

## 1.1. Introducción

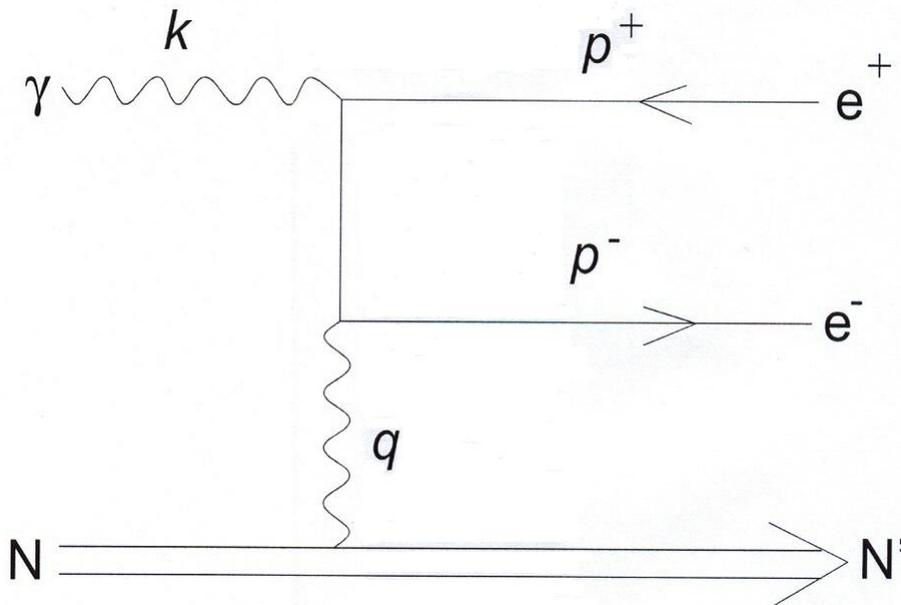
Los fotones interactúan con la materia circundante a través de cuatro procesos básicos: formación de pares electrón/positrón en el campo electromagnético del núcleo y los electrones atómicos circundantes, dispersión incoherente (dispersión Compton) con los electrones atómicos, absorción foto-eléctrica y dispersión coherente (dispersión Rayleigh) con las moléculas (o átomos) del medio. En los primeros tres tipos de colisiones se transfiere energía desde el campo de radiación del fotón a los electrones, uno de ellos dominará dependiendo de la energía y el medio en el cual el transporte toma lugar. El proceso de producción de pares domina a altas energías. A energías intermedias la dispersión incoherente es el proceso más importante, a bajas energías son los procesos foto-eléctricos.

Las interacciones de los fotones con los electrones atómicos producen excitaciones e ionizaciones de los átomos a lo largo de las trayectorias de las partículas. Los átomos altamente excitados, con vacíos en sus capas internas, se relajan emitiendo fotones y electrones con energías características.

Las ecuaciones integro-diferenciales acopladas que describen el desarrollo de la cascada electromagnética son prohibitivamente complicadas para permitir un tratamiento analítico excepto bajo aproximaciones severas. La técnica Monte Carlo (MC) es el único método de solución conocido que puede ser aplicado a cualquier rango de energía de interés.

Las simulaciones con el método Monte Carlo de los procesos de transporte de partículas, son una fiel simulación de la realidad física: las partículas “nacen” de acuerdo a distribuciones que describen la fuente, estas viajan ciertas distancias, determinadas por una distribución de probabilidad que depende de la interacción total en la sección eficaz, al lugar de una colisión y dispersión en otra energía y/o dirección de acuerdo al correspondiente diferencial de sección eficaz; posiblemente produciendo nuevas partículas que también deben ser transportadas. Este procedimiento se continúa hasta que todas las partículas son absorbidas o abandonan la geometría en consideración. Las cantidades de interés pueden ser calculadas al promediar sobre un conjunto dado de historias de partículas MC (también conocidos como cascada o caso). Desde un punto de vista matemático cada historia de una partícula es un punto en un espacio  $d$ -dimensional (la dimensionalidad depende del número de interacciones) y el procedimiento de promediado corresponde a una integración Monte Carlo  $d$ -dimensional. Como tal, el estimado Monte Carlo de las cantidades de interés está sujeto a una incerteza estadística la cual depende de  $N$ , el número de historias de partículas simuladas, y usualmente decrece a razón de  $N^{-1/2}$ .

Figura 1: Diagrama de Feynman para el proceso de producción de pares



## 1.2. Interacción de fotones

### 1.2.1. Producción de pares y tripletes

#### 1.2.1.1. Sección eficaz

El diagrama de Feynman para la producción de pares electrón-positrón en el campo nuclear se muestra en la figura 1. El proceso de la producción de tripletes es similar pero la interacción toma lugar con uno de los electrones atómicos el cual recibe suficiente energía para liberarse. En el programa EGSnrc el proceso de producción de tripletes no es simulado explícitamente pero se toma en cuenta en una forma aproximada usando el total de la sección eficaz par+triplete para muestrear las distancias a las subsecuentes colisiones de producción de pares. El programa EGSnrc adopta la sección eficaz extrema relativista en la primera aproximación de Born, los diferenciales de sección eficaz como se formulan en el artículo por Motz, Olsen y Koch [12]. Para un fotón incidente de energía  $k$  en un núcleo con número atómico  $Z$ , el diferencial de sección eficaz para la producción de pares es:

$$\frac{d\sigma_{pares}(Z,k,E_+)}{dE_+} = \frac{A'_p(Z,k)r_0^2\alpha Z(Z+\xi(Z))}{k} \left\{ (E_+^2 + E_-^2)[\phi_1(\delta) - \frac{4}{3}\ln Z - 4\tilde{f}_c(k, Z)] + \frac{2}{3}E_+E_-[\phi_2(\delta) - \frac{4}{3}\ln Z - 4\tilde{f}_c(k, Z)] \right\} \quad (1.1)$$

$$\delta = 136Z^{-1/3}2\Delta, \quad \Delta = \frac{km}{2E_+E_-} \quad (1.2)$$

$$\tilde{f}_c(Z) = \begin{cases} f_c(Z), & k \geq 50\text{MeV} \\ 0, & \text{lo demás} \end{cases} \quad (1.3)$$

$$f_c(Z) = a^2 \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{1}{\nu(\nu^2 + a^2)}, \quad a = \alpha Z \quad (1.4)$$

donde  $E_+$  y  $E_-$  son la energía total del electrón y el positrón respectivamente,  $\tilde{f}_c(Z)$  es la corrección de Coulomb, y  $f_c(Z)$  fue derivado por Davies, Bethe y Maximon [13].

El factor de corrección empírico  $A'_p(k, Z)$  se introduce para mejorar la sección eficaz total para la producción de pares y se define como: el mejor estimado de la sección eficaz total disponible dividida por la sección eficaz total resultante de la integración de la ecuación 1.1 con  $A'_p(k, Z) = 1$ . Para energías por encima de 50 MeV  $A'_p$  se toma como la unidad, para energías debajo de los 50 MeV se usan las secciones eficaces totales par+tripleto calculadas por Storm e Israel [14]. La sustitución  $Z^2 \rightarrow Z(Z + \xi(Z))$  toma en cuenta el proceso de producción de tripletes, donde  $\xi(Z)$ , evaluado por la función XSIF en PEGS4, está dado por:

$$\xi(Z) = \frac{L'_{\text{rad}}(Z)}{L_{\text{rad}}(Z) - f_c(Z)} \quad (1.5)$$

$$L'_{\text{rad}}(Z) = \begin{cases} Z^{-2/3} \ln 1194 & , \text{ si } Z > 4 \\ 6,144 & , \text{ si } Z = 1 \\ 5,621 & , \text{ si } Z = 2 \\ 5,805 & , \text{ si } Z = 3 \\ 5,924 & , \text{ si } Z = 4 \end{cases} \quad (1.6)$$

$$L_{\text{rad}}(Z) = \begin{cases} Z^{-1/3} \ln 184,15 & , \text{ si } Z > 4 \\ 5,310 & , \text{ si } Z = 1 \\ 4,790 & , \text{ si } Z = 2 \\ 4,740 & , \text{ si } Z = 3 \\ 4,710 & , \text{ si } Z = 4 \end{cases}$$

donde  $f_c(Z)$  está definida por la ecuación 1.4 y  $L, L'$  son los logaritmos de radiación de Tsai [15].

Las funciones  $\phi_1(\delta)$  y  $\phi_2(\delta)$ , que toman en cuenta los efectos de pantalla, están dadas por:

$$\begin{aligned} \phi_1(\delta) &= 4 \int_{\Delta}^1 \frac{dq}{q^3} (q - \Delta)^2 [1 - F(q, Z)]^2 + 4 + \frac{4}{3} \ln Z, \\ \phi_2(\delta) &= 4 \int_{\Delta}^1 \frac{dq}{q^4} [q^3 - 6\Delta^2 q \ln(\frac{q}{\Delta}) + 3\Delta^2 q - 4\Delta^3] [1 - F(q, Z)]^2 + \frac{10}{3} + \frac{4}{3} \ln Z \end{aligned} \quad (1.7)$$

donde  $q$  es el momentum de transferencia y  $F(q, Z)$  el correspondiente factor atómico de forma para un átomo con número atómico  $Z$ .

Para un potencial Thomas-Fermi  $\phi_1(\delta)$  y  $\phi_2(\delta)$  son independientes de  $Z$ , Butcher y Messel los han aproximado como [16]:

$$\phi_1(\delta) = \begin{cases} 20,867 - 3,242\delta + 0,625\delta^2 & , \delta \leq 1 \\ 21,12 - 4184 \ln(\delta + 0,952) & , \delta > 1 \end{cases} \quad (1.8)$$

$$\phi_2(\delta) = \begin{cases} 20,029 - 1,93\delta - 0,086\delta^2 & , \delta \leq 1 \\ \phi_1(\delta) & , \delta > 1 \end{cases} \quad (1.9)$$

La sección eficaz de producción de pares para compuestos y mezclas es derivada de la aproximación de átomo independiente y puede ser escrita aproximadamente en la misma forma que la ecuación 1.1 realizando las siguientes sustituciones:

$$\begin{aligned} Z(Z + \xi(Z)) & \quad \text{con} \quad Z_{eff}^2 \equiv \sum p_i Z_i (Z_i + \xi(Z_i)) \\ \frac{1}{3} \ln Z + \tilde{f}_c(k, Z) & \quad \text{con} \quad Z_V \equiv \sum p_i Z_i (Z_i + \xi(Z_i)) [\frac{1}{3} \ln Z_i + \tilde{f}_c(k, Z_i)] \\ \delta & \quad \text{con} \quad \delta_C 2\Delta, \quad \delta_C \equiv \frac{136}{Z_{eff}^2} \sum p_i Z_i (Z_i + \xi(Z_i)) Z_i^{-1/3} \end{aligned} \quad (1.10)$$

donde  $p_i$  es la fracción normalizada de átomos de tipo  $i$  en la molécula.

### 1.2.1.2. Simulación de producción de pares, energía de las partículas

El algoritmo de muestreo implementado en EGS4 se vuelve extremadamente ineficiente conforme la energía del fotón incidente se aproxima a la energía umbral. Esto es debido a los dos siguientes hechos: (i) Las energías del electrón y del positrón,  $E_-$  y  $E_+$ , son muestreadas en el rango de 0 a  $k/2$ , el rango permitido se vuelve una pequeña fracción del intervalo anterior para  $k \rightarrow 2m$ . (ii) Las funciones de rechazo usadas son normalizadas a su máximo en  $\delta = 0$ . Para fotones con energías que no son mucho más grandes que  $2m$  el máximo valor real es mucho más pequeño.

Se ha de modificar el algoritmo de muestro de producción de pares en el EGS4 para mejorar su eficiencia. Para esto, se definen las siguientes funciones, que servirán como funciones de rechazo:

$$\begin{aligned} B(\delta) &= 3[\phi_1(\delta) - 4Z_V] - [\phi_2(\delta) - 4Z_V] \\ B(\delta) &= 3[\phi_1(\delta) - 4Z_V] + [\phi_2(\delta) - 4Z_V] \end{aligned} \quad (1.11)$$

Si se hace el cambio de variables,

$$\varepsilon = \frac{E_+ - m}{k - 2m} \quad (1.12)$$

el diferencial de la sección eficaz de producción de pares  $\frac{d\sigma_{pares}}{d\varepsilon}$  se puede escribir como:

$$\frac{d\sigma_{pares}}{d\varepsilon} = N \left\{ \frac{B(\delta)}{B_{m\acute{a}x}} + \left(1 - \frac{2m}{k}\right)^2 \frac{A_{m\acute{a}x}}{3B_{m\acute{a}x}} A(\delta) \left[12 \left(\varepsilon - \frac{1}{2}\right)^2\right] \right\} \quad (1.13)$$

$$A_{m\acute{a}x} = A\left(\frac{4\delta_C m}{k}\right), \quad B_{m\acute{a}x} = B\left(\frac{4\delta_C m}{k}\right) \quad (1.14)$$

donde  $N$  combina todos los factores constantes que son irrelevantes en el algoritmo de muestreo y  $A_{m\acute{a}x}$  y  $B_{m\acute{a}x}$  son los maximos de las funciones de rechazo  $A(\delta)$  y  $B(\delta)$ ,

El algoritmo de muestreo, el cual determina la energıa del electron de mas baja energıa, se describe a continuacion:

1. Se calcula  $A_{m\acute{a}x}$ ,  $B_{m\acute{a}x}$  y  $\alpha$ ,

$$\alpha = \frac{1}{1 + (1 - 2m/k)^2 A_{m\acute{a}x}/3/B_{m\acute{a}x}} \quad (1.15)$$

para ganar tiempo, a altas energıas, se utiliza  $A_{m\acute{a}x} = A(0)$  y  $B_{m\acute{a}x} = B(0)$  para  $k \geq 50\text{MeV}$

2. Se elige un numero al azar  $r_1$
3. Si  $r_1 > \alpha$ , se muestrea  $\varepsilon$  de  $12(\varepsilon - 1/2)^2$ , *i.e.*,

$$\varepsilon = \frac{1}{2} (1 - \text{max}\{r_2, r_3, r_4\}) \quad (1.16)$$

y se utiliza  $A(\delta)/A_{m\acute{a}x}$  como una funcion de rechazo en el paso 5.

4. De otra manera, se muestrea  $\varepsilon$  uniformemente, *i.e.*,

$$\varepsilon = \frac{1}{2} r_2 \quad (1.17)$$

y se utiliza  $B(\delta)/B_{m\acute{a}x}$  como una funcion de rechazo en el paso 5.

5. Se calcula  $\delta$  y la funcion de rechazo  $R = A(\delta)/A_{m\acute{a}x}$  o  $B(\delta)/B_{m\acute{a}x}$ .
6. Si  $r_5 < R$ , el valor de  $\varepsilon$  es el deseado, de no ser ası se regresa al paso 2.

### 1.2.1.3. Simulación de producción de pares, ángulos de las partículas

En la versión original EGS4 los electrones y positrones eran producidos a un ángulo polar fijo  $\theta_{\pm}$  con respecto a la dirección del fotón incidente dada por  $\theta_{\pm} = m/k$ . Esta aproximación es mejorada en el sistema EGSnrc con la introducción del macro SET-PAIR-ANGLE. El procedimiento para la selección del ángulo es controlado por la variable IPRDST la cual puede asumir los siguientes valores:

- IPRDST=0: Se usa la aproximación original en EGS4, *i.e.*,  $\theta_{\pm} = m/k$
- IPRDST=1: Son empleados los términos de orden primario de la distribución angular, *i.e.*,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\pm}} = N \frac{1}{(1 - \beta_{\pm} \cos \theta_{\pm})^2} \quad (1.18)$$

donde  $N$  es de nuevo la constante de normalización y  $\beta_{\pm}$  denota la velocidad del positrón o del electrón en unidades de la velocidad de la luz.

- IPRDST=2: Se usa la formula 3D-2003 del artículo por Motz *et al.* [12], que es el diferencial sección eficaz, respecto a la energía y el ángulo del electrón/positrón:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dE_{\pm} d\Omega_{\pm}} &= \frac{N}{(u^2+1)^2} \times \\ &\left\{ - (E_+ - E_-)^2 - \frac{16u^2 E_+ E_-}{(u^2+1)^2} + \left[ E_+^2 + E_-^2 + \frac{4u^2 E_+ E_-}{(u^2+1)^2} \right] \ln M(k, E_{\pm}, u) \right\} \quad (1.19) \\ u = E_{\pm} \theta_{\pm}, \quad \frac{1}{M(k, E_{\pm}, u)} &= \left( \frac{k}{2E_+ E_-} \right)^2 + \left( \frac{Z_{eff}^{1/3}}{111(u^2+1)^2} \right)^2 \end{aligned}$$

donde todas las energías son medidas en unidades de  $m$ . Notese que la ecuación 1.19 está basada en la aproximación extrema relativista para pequeños ángulos donde

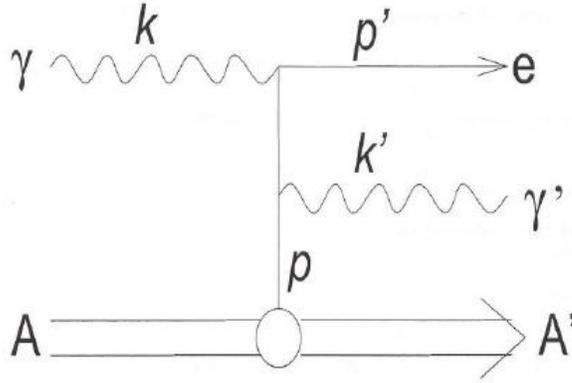
$$\begin{aligned} (1 - \beta_{\pm} \cos \theta_{\pm})^2 &\approx \left[ 1 - \beta_{\pm} \left( 1 - \frac{\theta_{\pm}^2}{2} \right) \right]^2 = (1 - \beta_{\pm})^2 \left[ 1 - \frac{\beta_{\pm} \theta_{\pm}}{1 - \beta_{\pm}} \frac{\theta_{\pm}}{2} \right]^2 \\ &\approx (1 - \beta_{\pm})^2 (1 + u^2)^2 \end{aligned} \quad (1.20)$$

## 1.2.2. Dispersión incoherente -Compton-

### 1.2.2.1. Sección eficaz

El diagrama de Feynman para los procesos de dispersión Compton se muestra en la figura 2. El círculo en la línea del átomo incidente A indica que el electrón inicialmente está ligado al átomo y representa la probabilidad de que un electrón atómico con un cuatro-momento  $p = (E, \vec{p})$  interactúa con un fotón incidente con un cuatro-momento  $k = (k, \vec{k})$  en un estado final  $e^- \gamma'$  dado por  $k' = (k', \vec{k}')$  y  $p' = (E', \vec{p}')$ . Para simplificar la notación, en las siguientes ecuaciones de esta sección, todas las energías son medidas en unidades de la energía del electrón en reposo  $m$  y todos los momentos en unidades de  $m/c$ .

Figura 2: Diagrama de Feynman para un proceso Compton



Si la ligadura al átomo es despreciada y se considera al electrón inicialmente en reposo (*i.e.*  $p = (1, 0, 0, 0)$ ), la sección eficaz para este proceso está dada por la fórmula de Klein-Nishina [18],

$$\frac{d\sigma_{KN}}{d\cos\theta} = \pi r_0^2 Z X_{KN}, \quad X_{KN} = \left(\frac{k_c}{k}\right)^2 \left[ \frac{k_c}{k} + \frac{k}{k_c} - \sin^2\theta \right] \quad (1.21)$$

$$k_c = \frac{k}{1 + k(1 - \cos\theta)} \quad (1.22)$$

donde  $\theta$  es el ángulo polar del fotón dispersado con respecto a la dirección inicial y  $k_c$  es la energía de un fotón dispersado a un ángulo  $\theta$  por electrones libres en reposo.

En el programa EGSnrc se incluyen los efectos de ligadura y ensanchamiento Doppler de acuerdo a la aproximación de impulso (IA). La IA asume que el potencial en el cual se mueven los electrones blanco es constante por lo que sus estados pueden ser representados por ondas planas. La doble diferencial de sección eficaz para dispersión de fotones en un estado final  $k' = (k', k' \sin \theta \cos \phi, k' \sin \theta \sin \phi, k' \cos \theta)$  está dada por la ecuación (15) de la referencia [19]

$$\frac{d^2 \sigma_{comp}}{dk' d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} \frac{k'}{kq} [1 + p_z^2]^{-1/2} XJ(p_z) \quad (1.23)$$

donde  $\Omega$  es el ángulo sólido  $(\theta, \phi)$  y donde

- $q$  es el modulo del vector del momento de transferencia  $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ ,

$$q = \sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta} \quad (1.24)$$

- $p_z$  es la proyección del momento inicial del electrón en la dirección de  $\vec{q}$ ,

$$p_z = \frac{\vec{p} \cdot \vec{q}}{q} = \frac{kk'(1 - \cos \theta) - k + k'}{q} \quad (1.25)$$

Nótese que la ecuación anterior está derivada de una aproximación no relativista y requiere que  $|p_z| \leq 1$ .

- $X$  está definida como

$$\begin{aligned} X &= \frac{R}{R'} + \frac{R'}{R} + 2 \left( \frac{1}{R} - \frac{1}{R'} \right) + \left( \frac{1}{R} - \frac{1}{R'} \right)^2 \\ R &= k \left[ \sqrt{1 + p_z^2} + \frac{k - k' \cos \theta}{q} p_z \right] \\ R' &= R - kk'(1 - \cos \theta) \end{aligned} \quad (1.26)$$

Nótese que  $R$  y  $R'$  se simplifican en las siguientes expresiones

$$R \approx k(1 + (p_z)), \quad R' \approx k[1 - k_c(1 - \cos \theta)](1 + O(p_z)) \quad (1.27)$$

para  $p_z \ll 1$ . En este límite

$$X = X_{KN}(1 + O(p_z)) \quad (1.28)$$

- La función  $J(p_z)$  es el perfil de Compton,

$$J(p_z) = \int dp_x dp_y |\psi(\vec{p})|^2, \quad (1.29)$$

donde  $\psi(\vec{p})$  es la función de onda de los electrones ligados. Las contribuciones de las diferentes capas electrónicas son consideradas separadamente, por lo que el perfil Compton atómico o molecular es la sumatoria de los perfiles Compton de las capas de un-electrón  $J_i(p_z)$ , y los efectos de ligadura son tomados en cuenta por interacciones de rechazo que transfieren menos energía al electrón que la energía de ligadura  $U_i$  [21] *i.e.*

$$J(p_z) = \sum Z_i J_i(p_z) \Theta(k - k' - U_i) \quad (1.30)$$

Aquí,  $Z_i$  es el número de ocupación de la capa  $i$  y  $J_i$  está normalizada:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp_z J_i(p_z) = 1 \quad (1.31)$$

Con todo esto, y después de cambiar en la ecuación 1.23, la sección eficaz el diferencial en  $k'$  por el diferencial en  $p_z$ , esta puede ser escrita como:

$$\frac{d^2 \sigma_{comp}}{dp_z d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} X_{KN} \left( \sum Z_i J_i(p_z) \Theta(k - k' - U_i) \right) F(k, \cos \theta, p_z) \quad (1.32)$$

donde la función  $F(k, \cos \theta, p_z)$  combina todos los factores restantes multiplicado por  $dk'/dp_z$ ,

$$F(k, \cos \theta, p_z) = \frac{k'}{k_c} [1 + p_z^2]^{-1/2} \frac{X}{X_{KN}} \left( 1 + \frac{k_c}{k} \frac{k \cos \theta - k'}{q} p_z \right)^{-1} \quad (1.33)$$

Aquí,  $k'$  es una función de  $k$ ,  $\cos \theta$  y  $p_z$  que viene de resolver la ecuación 1.25 con respecto a  $k'$ , *i.e.*

$$k' = \frac{k_c}{1 - p_z^2 \varepsilon^2} \left[ 1 - p_z^2 \varepsilon \cos \theta + p_z \sqrt{1 - 2\varepsilon \cos \theta + \varepsilon^2 (1 - p_z^2 \sin^2 \theta)} \right], \quad (1.34)$$

$$\varepsilon = \frac{k_c}{k}$$

El diferencial de la sección eficaz para dispersión incoherente, con respecto al ángulo de dispersión del fotón es:

$$\frac{d\sigma_{comp}}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} \left(\frac{k_c}{k}\right)^2 X_{KN} S(k, \cos \theta) \quad (1.35)$$

donde

$$S(k, \cos \theta) = \sum Z_i \Theta(k - U_i) S_i, \quad S_i = \int_{-\infty}^{p_i} dp_z J_i(p_z) F(k, \cos \theta, p_z) \quad (1.36)$$

que puede ser identificado con la función de dispersión incoherente. El límite superior de la integración sobre  $p_z$  para la capa  $i$ -ésima,  $p_i$  es:

$$p_i = \frac{k(k - U_i)(1 - \cos \theta) - U_i}{\sqrt{2k(k - U_i)(1 - \cos \theta) + U_i^2}} \quad (1.37)$$

que viene de la ecuación 1.25 con  $k' = k - U_i$  y asegura que sea transferida suficiente energía para hacer al electrón libre.

Como los perfiles Compton son muy agudos alrededor de  $p_z = 0$ , las principales contribuciones a la integral son de pequeños valores de  $p_z$  donde la función  $F(k, \cos \theta, p_z)$  es muy cercana a la unidad, Brusa *et al* [21] aproxima  $S(k, \cos \theta)$  con

$$S(k, \cos \theta) \approx S_A(k, \cos \theta) \equiv \sum Z_i \int_{-\infty}^{p_i} dp_z J_i(p_z) \Theta(k - U_i) \quad (1.38)$$

Esta aproximación introduce un pequeño error a bajas energías para materiales con  $Z$  grande.

Para minimizar la cantidad de datos necesarios para la simulación del proceso Compton, y hacer posible el cálculo de la función de dispersión incoherente al vuelo, se usan las aproximaciones analíticas para los perfiles Compton  $J_i(p_z)$  propuestas por Brusa *et al* [21]:

$$J_i(p_z) = J_{i,0} (1 + 2J_{i,0} |p_z|) \exp \left[ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} (1 + 2J_{i,0} |p_z|)^2 \right] \quad (1.39)$$

donde  $J_{i,0} \equiv J_i(0)$  es el valor del perfil en  $p_z = 0$  obtenido del orbital Hartree-Fock [20].

Adicionalmente, se aproxima  $J_{i,0} \equiv J_i(0)$  con:

$$F(k, \cos \theta, p_z) = \begin{cases} 1 - \alpha p & , \quad p_z \leq -p \\ 1 - \alpha p_z & , \quad |p_z| < p \\ 1 + \alpha p & , \quad p_z \geq p \end{cases} \quad (1.40)$$

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{q_c}{k} \left( 1 + \frac{k_c(k_c - k \cos \theta)}{q_c^2} \right) \\ q_c &= \sqrt{k^2 + k_c^2 - 2kk_c \cos \theta} \end{aligned} \quad (1.41)$$

La ecuación 1.40 es el resultado de una expansión en series de Taylor de  $F(k, \cos \theta, p_z)$  sobre  $O(p_z)$ . Como esta aproximación es imprecisa para valores grandes de  $p_z$  se aplica solamente para  $|p_z| < p$ , de otro modo son usados los valores de la función en  $\pm p$ .

Combinando las ecuaciones 1.36, 1.39 y 1.40, se obtiene para  $S_i$ ,

$$\begin{aligned} S_i(k, \cos \theta) &= (1 - \alpha p) \frac{e^{-b}}{2} & , \quad \text{si } p_i \leq -p \\ &= (1 + \alpha p_i) \frac{e^{-b}}{2} \\ &\quad - \frac{\alpha}{4J_{i,0}} \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{1/2} \left[ \mathbf{erf} \left( \frac{1+2J_{i,0}p}{\sqrt{2}} \right) - \mathbf{erf} \left( \frac{1+2J_{i,0}|p_i|}{\sqrt{2}} \right) \right] & , \quad \text{si } p_i \leq 0 \\ &= 1 - (1 + \alpha p_i) \frac{e^{-b}}{2} \\ &\quad - \frac{\alpha}{4J_{i,0}} \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{1/2} \left[ \mathbf{erf} \left( \frac{1+2J_{i,0}p}{\sqrt{2}} \right) - \mathbf{erf} \left( \frac{1+2J_{i,0}|p_i|}{\sqrt{2}} \right) \right] & , \quad \text{si } p_i < p \\ &= 1 - (1 - \alpha p) \frac{e^{-b}}{2} & , \quad p_i > p \end{aligned} \quad (1.42)$$

donde

$$b = \frac{1}{2} (1 + 2J_{i,0} |p_i|)^2 - \frac{1}{2} \quad (1.43)$$

y  $\mathbf{erf}$  es la función de error. Vale la pena notar que  $S_i$  es siempre menor o igual que la unidad. Este hecho permite usar a  $S_i$  como función de rechazo en el algoritmo de muestreo que será discutido en la próxima sección.

La sección eficaz total de dispersión incoherente  $\sigma_{comp}^{(tot)}$  se puede obtener al hacer una integración numérica sobre todos los ángulos de dispersión en las ecuaciones 1.35, 1.36 y 1.42. Para evitar cambios considerables en la preparación de datos del programa PEGS4, se usa en cambio la sección eficaz total de Klein-Nishina,  $\sigma_{KN}^{(tot)}$ , mientras que el seguimiento de los fotones a través de la geometría, las interacciones Compton de rechazo se hacen con la probabilidad  $1 - \sigma_{comp}^{(tot)}/\sigma_{KN}^{(tot)}$  una vez en el sitio de interacción (método ficticio de sección eficaz). Esta probabilidad de rechazo es un resultado automático (sin calcular  $\sigma_{comp}^{(tot)}$ ) del algoritmo de muestreo que se discutirá en la próxima sección.

Otra ventaja de esta aproximación es que el usuario puede encender o apagar los efectos de ligadura y ensanchamiento Doppler usando el interruptor IBCMP, sin la preparación de dos archivos de datos de materiales. Los únicos datos adicionales necesarios para simular la dispersión incoherente en la aproximación de impulso son los parámetros de perfiles Compton  $J_{i,0}$ , tomados de las tablas de Biggs *et al* [20], y los números de ocupación  $Z_i$  y las energías de ligadura  $U_i$  para todos los elementos, tomadas de Lederer y Shirley [22]. Estos datos son leídos en la subrutina `init_compton` la cual es llamada desde HATCH.

### 1.2.2.2. Simulación de eventos de dispersión incoherente

El diferencial de sección eficaz para dispersión incoherente, respecto al ángulo de dispersión del fotón  $\Omega = (\theta, \phi)$  y el parámetro de ensanchamiento Doppler  $p_z$  por sitio de interacción de la sección eficaz Klein-Nishina es

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \sigma_{compton}^{(tot)}}{\sigma_{KN}^{(tot)}} &= \sum \frac{Z_i}{Z} \Theta(k - U_i) \sigma_i d\Omega dp_z \\ \sigma_i d\Omega dp_z &= S_i \frac{d\phi}{2\pi} \frac{X_{KN}(\cos \theta) d \cos \theta}{\int_{-1}^1 X_{KN}(\cos \theta) d \cos \theta} \frac{J_i(p_z) F(k, \cos \theta, p_z) \Theta(p_i - p_z) dp_z}{p_i \int_{-\infty}^{\infty} dp_z J_i(p_z) F(k, \cos \theta, p_z)} \end{aligned} \quad (1.44)$$

Esta claro entonces que en el siguiente algoritmo se produce el número de rechazos requerido, y se muestrea correctamente, si la interacción es aceptada, el diferencial de sección eficaz :

1. Se muestrea el número de capa  $i$  usando las probabilidades  $Z_i/Z$ .
2. Si la energía  $k$  del fotón incidente es más pequeña que la energía de ligadura  $U_i$ , se rechaza la interacción, de otro modo, se muestrea  $\cos \theta$ ,  $\phi$  y  $p_z$  usando el diferencial de sección  $\sigma_i$  de la capa seleccionada como sigue:
3. Se muestrea  $\theta$  el ángulo de dispersión polar del fotón usando:

$$P_1(\cos \theta) = \frac{X_{KN}(\cos \theta) d \cos \theta}{\int_{-1}^1 X_{KN}(\cos \theta) d \cos \theta}$$

que es función normalizada de distribución de probabilidad (PDF). El método para muestrear  $\cos \theta$  se explicará en breve.

4. Se calcula el valor máximo posible de  $p_z$ ,  $p_i$  de la ecuación 1.37, y  $S_i$  de la ecuación 1.42.
5. Si un número al azar uniformemente distribuido es más grande que  $S_i$ , se rechaza la interacción.
6. Se muestrea  $p_z$  de

$$\frac{J_i(p_z) F(k, \cos \theta, p_z) \Theta(p_i - p_z) dp_z}{\int_{-\infty}^{p_i} dp_z J_i(p_z) F(k, \cos \theta, p_z)}$$

que es la PDF normalizada para  $p_z$ . La técnica de muestreo empleada para esta distribución será explicada después.

7. Se muestrea el ángulo de dispersión azimutal de  $d\phi/2\pi$ .
8. Se calcula  $k'$  la energía del fotón dispersado de la ecuación 1.34.
9. Poner entonces un electrón en movimiento requiera una energía cinética de  $k - k' - U_i$ , un ángulo de dispersión polar dado por

$$\cos \theta_e = \frac{k - k' \cos \theta}{\sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta}} \quad (1.45)$$

y un azimut opuesto al azimut del fotón.

Si el usuario no quiere tomar en cuenta los efectos de ligadura y ensanchamiento Doppler (el interruptor `IBCMP` debe ser puesto en cero), el algoritmo de muestreo consistirá de los pasos 3, 7 y 9 con  $k' = k_c$  y  $U_i = 0$ .

Como la capa en la cuál sucede la interacción está explícitamente determinada en el paso 1, se conoce la vacante creada por el proceso Compton al final del algoritmo de muestreo. La relajación de las capas vacantes con energías de ligadura arriba de la energía umbral de transporte especificada se lleva a cabo en la subrutina `relax` y puede llevar a la creación de fotones fluorescentes adicionales y de electrones Auger y Coster-Kroning en la pila. Muchos de los códigos de usuario basados en el programa EGS4 asumen que la salida de un proceso de dispersión incoherente es un fotón dispersado y un electrón Compton. Está suposición no es satisfecha en el programa EGSnrc, y la salida de un evento incoherente puede ser cualquiera de los siguientes:

1. El fotón original, si la interacción fue rechazada debida a uno de los criterios de rechazo.
2. Un fotón dispersado y un electrón Compton, si todas las particulas de relajación tienen energías por debajo de la energía umbral de transporte especificado (`ECUT`, y `PCUT`).
3. De otro modo, un fotón dispersado, o un electrón Compton más  $n$  partículas de relajación.

Finalmente, la porción de energía de ligadura que resulta de la creación de partículas de relajación, se da a conocer al usuario por medio de una llamada a la rutina de resultados `AUSGAB` con el argumento `IARG=4`.

Se concluye esta sección con algunos detalles acerca de los pasos 3, 4 y 6 del algoritmo de muestreo.

Paso 3, muestreo de  $\cos \theta$ : Siguiendo el manual del EGS4 [9] se reescribe la PDF  $P_1$  en términos de  $\varepsilon = k_c/k$ :

$$P_1(\varepsilon) = P_1(\cos \theta) \frac{d\varepsilon}{d \cos \theta} = N \left( \frac{1}{\varepsilon} + \varepsilon - \sin^2 \theta \right) \quad (1.46)$$

donde  $N$  es una constante de normalización que es irrelevante para el algoritmo de muestreo. Los valores máximo y mínimo posibles para  $\varepsilon$ ,  $\varepsilon_{\text{máx}}$ ,  $\varepsilon_{\text{mín}}$ , vienen de  $\cos \theta = 1$  y  $\cos \theta = -1$ , respectivamente, y están dados por:

$$\varepsilon_{\text{mín}} = \frac{1}{1 + 2k}, \quad \varepsilon_{\text{máx}} = 1 \quad (1.47)$$

La ecuación 1.46, puede ser reescrita como:

$$P_1(\varepsilon) = N(\alpha_1 + \alpha_2) \left\{ \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \left( \frac{1}{\varepsilon \alpha_1} \right) + \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \left( \frac{\varepsilon}{\alpha_2} \right) \right\} \left[ 1 - \frac{\varepsilon \sin^2 \theta}{1 + \varepsilon^2} \right] \quad (1.48)$$

$$\text{con:} \quad \alpha_1 = \ln(1 + 2k), \quad \alpha_2 = \frac{1 - \varepsilon_{\text{mín}}^2}{2} \quad (1.49)$$

$1/\varepsilon/\alpha_1$  y  $\varepsilon/\alpha_2$  son las PDF normalizadas, estas pueden ser usadas para muestrear  $\varepsilon$  con probabilidad  $\alpha_1/(\alpha_1 + \alpha_2)$  y  $\alpha_2/(\alpha_1 + \alpha_2)$ , respectivamente. La expresión en corchetes tiene un máximo de uno para  $\varepsilon = 1$  ( $\sin \theta = 0$ ) y es una función de rechazo válida ( $g$ ). El algoritmo de muestreo queda entonces como sigue:

3.1 Se calcula  $\varepsilon_{\text{mín}}$ ,  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  y  $w = \alpha_1/(\alpha_1 + \alpha_2)$ .

3.2 Se eligen tres números al azar  $r_1$ ,  $r_2$  y  $r_3$ .

3.3 Si  $r_1 \leq w$ ,

$$\varepsilon = \varepsilon_{\text{mín}} \exp(r_2 \alpha_1), \quad (1.50)$$

de otro modo,

$$\varepsilon = \sqrt{\varepsilon_{\text{mín}}^2 + 2r_2 \alpha_2} \quad (1.51)$$

3.4 Se calcula la función de rechazo ( $g$ ), si  $r_3 > g$  ir al paso 3.2.

3.5 Se da  $\varepsilon$  (y  $\cos \theta$ ).

La eficiencia de este algoritmo tiende a la unidad para  $k \rightarrow \infty$  y por consiguiente es el algoritmo más eficiente para fotones incidentes de alta energía. Para  $k \rightarrow 0$ , la eficiencia se aproxima a  $2/3$ . Además, la necesidad de calcular una función logarítmica y una exponencial, dos calculos intensos para una computadora, hacen de este algoritmo más lento que una simple técnica de rechazo con un muestreo uniforme de  $\varepsilon$ . En este caso la función de rechazo está dada por

$$g = \frac{1}{g_{\text{máx}}} \left( \frac{1}{\varepsilon} + \varepsilon - \sin^2 \theta \right), \quad g_{\text{máx}} = \frac{1}{\varepsilon_{\text{mín}}} + \varepsilon_{\text{mín}} \quad (1.52)$$

y el algoritmo queda como sigue:

3.1 Se calcula  $\varepsilon_{\text{mín}}$  y  $g_{\text{máx}}$ .

3.2 Se eligen dos números  $r_1$  y  $r_2$  al azar.

3.3 Se hace

$$\varepsilon = r_1 + (1 - r_1)\varepsilon_{\text{mín}} \quad (1.53)$$

y se calcula  $g$ .

3.4 Si  $r_2 > g$ , retornar al paso 3.2.

3.5 Se da  $\varepsilon$  (y  $\cos \theta$ ).

La eficiencia de este algoritmo a bajas energías es  $2/3$  y decrece con el incremento de  $k$ . Puesto que no hay envueltos calculos intensos para la computadora, este algoritmo es mucho más rápido hasta  $k \sim 2$  y es usado por el programa EGSnrc en este rango de energía.

Paso 4, calculo de  $S_i$ : El calculo de  $S_i$  requiere de dos operaciones numéricas intensas, el cálculo de  $\exp(-b)$  y el calculo de la función de error que depende de  $p_i$ . El primero es necesario para el muestreo de  $p_z$  en el paso 6, el último puede ser evitado al usar una fórmula aproximada para **erf** (ecuación 7.1.25 de Abramowitz y Stegun [23]):

$$e^{1/2} \mathbf{erf} \left( \frac{1+2J_{i,0}|p_i|}{\sqrt{2}} \right) = e^{1/2} - e^{-bt} (a_1 + a_2t + a_3t^2) \quad (1.54)$$

$$t = \frac{1}{1+0,332673(1+2J_{i,0}|p_i|)}, \quad a_1 = 0,34802, \quad a_2 = -0,0958798, \quad a_3 = 0,7478556$$

la cual es suficientemente precisa para estos propósitos.

Paso 6, el muestreo de  $p_z$ :  $p_z$  puede ser muestreado usando a  $J_i(p_z)$  como PDF y a  $F$  como función de rechazo. Para determinar el máximo de  $F$  nótese que  $\alpha$  (dado por la ecuación 1.41) es siempre positiva excepto para un pequeño rango de  $\cos\theta$  para  $k > 3$ . Para estas altas energías de fotones incidentes la influencia de  $F$  es insignificante y se le puede ignorar si  $\alpha < 0$  (*i.e.*, se hace  $\alpha = 0$ ). Entonces, el máximo de la función de rechazo  $F_{\text{máx}}$  es:

$$F_{\text{máx}} = \begin{cases} 1 - \alpha p & , \quad p_z \leq -p \\ 1 + \alpha p_i & , \quad |p_i| < p \\ 1 + \alpha p & , \quad p_i \geq p \end{cases} \quad (1.55)$$

y el algoritmo de muestreo para  $p_z$  queda como sigue:

6.1 Se calcula  $F_{\text{máx}}$  de la ecuación 1.55.

6.2 Se eligen dos números al azar,  $r_1$  y  $r_2$ , se calcula  $r' = r_1 e^{-b}$  ( $e^{-b}$  se conoce del paso 4 del algoritmo principal).

6.3 Se hacen:

$$p_z = \begin{cases} \frac{1 - \sqrt{1 - 2 \ln[2r']}}{2J_{i,0}} & , \quad r' < 1/2 \\ \frac{\sqrt{1 - 2 \ln[2(1-r')] - 1}}{2J_{i,0}} & , \quad r' \geq 1/2 \end{cases} \quad (1.56)$$

6.4 Se calcula  $F(p_z)$ , si  $r_2 > F(p_z)/F_{\text{máx}}$ , se retorna al paso 6.2.

6.5 Se da  $p_z$ .

### 1.2.3. Absorción foto-eléctrica

En el proceso de absorción foto-eléctrica un átomo absorbe un fotón y emite un electrón con una energía igual a la del fotón incidente menos su energía de ligadura. El átomo, que queda en un estado excitado con una vacante en la capa ionizada, se relaja por medio de la emisión de fotones fluorescentes y electrones Auger y Coster-Kroning.

En la implementación original por defecto del EGS4 fue ignorada la emisión de partículas de relajación seguida de eventos de absorción foto-eléctrica. Esta propuesta fue modificada después para incluir la producción de radiación fluorescente  $K_\alpha$  y  $K_\beta$ . Sin embargo, para fotones incidentes con energías por debajo de la energía de ligadura de la capa K, toda la energía del fotón es depositada localmente. Otro defecto de la propuesta del EGS4 es que la energía de ligadura de la capa  $K$  siempre es restada de la energía del electrón en movimiento, incluso aunque hay cierta probabilidad que el proceso de foto-absorción tome lugar en una capa distinta a la capa  $K$  (para materiales con un número grande de  $Z$  esta probabilidad es del orden del 20 %). Finalmente, el uso de la opción fluorescente en el EGS4 requiere que el usuario seleccione un número atómico efectivo para cada material. Entonces la foto-absorción siempre toma lugar para este número atómico. La selección trascendente de un  $Z$  efectivo prueba ser una tarea dificultosa en mezclas, especialmente cuando solo está presente una pequeña fracción del elemento con alto  $Z$ .

Si bien el EGSnrc usa las secciones eficaces totales de foto-absorción del PEGS (las cuales son tomadas de la compilación de Storm e Israel [14]) la simulación del proceso de foto-absorción está completamente cambiada y es controlada por la bandera IEDGFL. Si el IEDGFL de la región es distinta de cero, entonces se realiza una simulación detallada, de otro modo se emprende un tratamiento simplificado del proceso de foto-absorción. La selección por defecto de IEDGFL es uno.

### 1.2.3.1. Simulación detallada de la absorción foto-eléctrica

1. Para compuestos y mezclas, el primer paso es muestrear el número atómico del elemento con que el fotón interactúa. Si  $Z_i$  denota el número atómico del  $i$ -ésimo elemento en la molécula,  $p_i$  su índice estequiométrico, y  $\sigma_{ph}(k, Z)$  la sección eficaz de absorción foto-eléctrica para un fotón con energía  $k$  para un elemento con número atómico  $Z$ , entonces la probabilidad  $w_i(k)$  de que el fotón sea absorbido por el elemento  $Z_i$  es:

$$w_i = \frac{p_i \sigma_{ph}(k, Z_i)}{\sum p_i \sigma_{ph}(k, Z_i)} \quad (1.57)$$

Por lo tanto, el muestreo del elemento requiere el conocimiento de la sección eficaz de foto-absorción de todos los elementos en ejecución, y no solamente la sección eficaz total que viene del conjunto de datos PEGS. Para minimizar la cantidad requerida de datos adicionales, se usan fórmulas de ajuste para  $\sigma_{ph}(k, Z_i)$  las cuales son precisas dentro del 1-2% y tienen la forma:

$$\begin{aligned}\sigma_{ph}(k, Z) &= \frac{A_K(Z)}{k} + \frac{B_K(Z)}{k^2} + \frac{C_K(Z)}{k^{7/2}} + \frac{D_K(Z)}{k}, \quad \text{si } k \geq U_K(Z) \\ &= \exp [A_j(Z) + B_j(Z)t \\ &\quad + C_j(Z)t^2 + D_j(Z)t^3], \quad \text{si } k \geq U_j(Z)\end{aligned}\tag{1.58}$$

donde  $t = \ln k$  y  $U_K(Z)$  es la energía de ligadura de la capa  $K$  y  $U_j(Z)$  las energías de ligaduras para las otras capas después de la capa  $K$ . Los coeficientes  $A_K, B_K, C_K, D_K$  y  $A_j, B_j, C_j, D_j$  se obtienen al ajustar las secciones eficaces de foto-abasorción desde el programa XCOM [24] y que se encuentran en el archivo `photo_cs.data` (solamente las capas con energía de ligadura arriba de 1 keV están incluidas). Entonces, el algoritmo para seleccionar el elemento que absorbe el fotón incidente es:

- 1.1 Se calculan todas las  $\sigma_{ph}(k, Z_i)$  y su suma.
- 1.2 Se elige un número al azar  $r_1$ .
- 1.3 En un bucle sobre el número de elementos, se calcula  $r_1 = r_1 - w_i$ , si  $r_1 \leq 0$  se sale del bucle y se toma a  $Z_i$  como el elemento que interactúa con el fotón. Notar que, al menos en principio,

$$\sum p_i \sigma_{ph}(k, Z_i) = \sigma_{ph}(k)$$

donde  $\sigma_{ph}(k)$  es la sección eficaz de foto-absorción para el material en consideración. Esta sección eficaz es interpolada usando los datos suministrados por PEGS en la rutina de transporte de fotones para determinar el tipo de interacción.

Se puede hacer que el algoritmo de selección de elementos sea más eficiente si se emplea el siguiente:

1.1'. Se elige un número al azar  $r_1$ .

1.2'. Se hace  $i = 1$ .

1.3'. Se calcula  $\sigma_{ph}(k, Z_i)$  y  $r_1 = r_1 - p_i \sigma_{ph}(k, Z_i) / \sigma_{ph}(k)$ .

1.4'. Si  $r_1 > 0$  e  $i$  es menor que el número de elementos, entonces  $i = i + 1$ , retornar al paso 1.3'.

1.5'. Se da  $i$ .

este algoritmo ahorra la evaluación de uno o más  $\sigma_{ph}(k, Z_i)$ .

2. Una vez se ha determinado el elemento absorbente, la capa en la cual la interacción toma lugar será muestreada. La probabilidad  $\nu_j$  de que el fotón sea absorbido por la  $j$ -ésima capa es cercano a la energía independiente de la capa  $K$ , pero, depende de la energía del fotón incidente para las otras capas. Esto significa que la elección de la capa en la sección eficaz de foto-absorción sería necesaria para estar disponible en el tiempo de ejecución para muestrear la capa si se quiere realizar una modelación completa del proceso de foto-absorción. En vez de esto en el sistema EGSnrc se usa la probabilidad de interacción de energía independiente  $\nu_j$  la cual se determina como sigue. Si  $\phi(k)$  es el flujo de radiación de campo, el número de eventos de foto-absorción por elemento  $Z$  y por unidad de volumen,  $N$ , está dado por:

$$N = n(Z) \int dk \phi(k) \sigma_{ph}(k, Z) \quad (1.59)$$

donde  $n$  es la densidad de los centros de dispersión. El número de foto-absorciones en la capa  $j$  de este elemento por unidad de volumen es:

$$N_j = n(Z) \int dk \phi(k) \sigma_{ph,j}(k, Z) \quad (1.60)$$

donde  $\sigma_{ph,j}(k, Z_i)$  es la sección eficaz de foto-absorción de la  $j$ -ésima capa. La proporción  $\nu'_j$ , de  $N_j$  con  $N$ , es el promedio de la probabilidad de interacción de la  $j$ -ésima capa, para el campo de radiación descrito por  $\phi(k)$ ,

$$\nu'_j = \frac{N_j}{N} = \frac{\int dk \phi(k) \sigma_{ph,j}(k, Z)}{\int dk \phi(k) \sigma_{ph}(k, Z)} \quad (1.61)$$

La cantidad real usada en la simulación de la absorción foto-eléctrica es la probabilidad  $\nu_j$  que el fotón sea absorbido por la capa  $j$  si esté no fuera absorbido por una de las capas  $1 \dots j - 1$ , la cual está dada por:

$$\nu_j = \frac{\int dk \phi(k) \sigma_{ph,j}(k, Z)}{\sum_{i=j}^{N_{sh}} \int dk \phi(k) \sigma_{ph,i}(k, Z)} \quad (1.62)$$

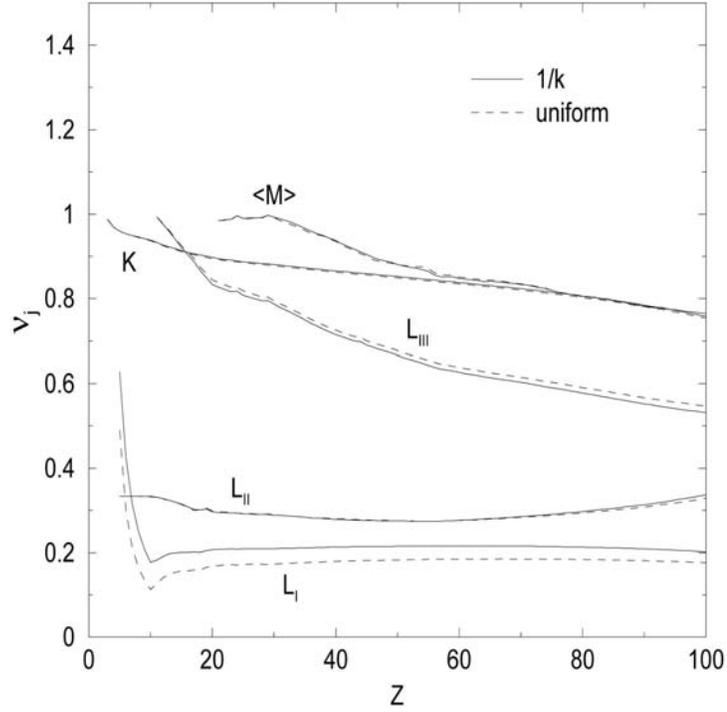
donde  $N_{sh}$  es el número de capas. Para calcular  $\nu_j$  se necesita  $\phi(k)$ , una cantidad que no es conocida (con la intención de que sea calculada por una simulación Monte Carlo). Sin embargo, se puede calcular  $\nu_j$  haciendo una conjetura sobre el flujo de fotones, esta aproximación es la base para la generación de coeficientes de interacción de grupo para métodos discretos ordenados (véase *e.g.* el libro de Lewis y Miller [25]). La figura 3 muestra las probabilidades de interacción  $\nu_j$  para las capas  $K$ ;  $L_I$ ;  $L_{II}$  y  $L_{III}$  y un “promedio” de la capa  $M$  (vea el siguiente parrafo) como una función del número atómico  $Z$  para  $\phi(k) = \text{const}$  (línea punteada) y  $\phi(k) = \text{const}/k$  (línea sólida). La dependencia de las  $\nu_j$  de la función de pesado  $\phi(k)$  es despreciable excepto para la capa  $L_I$  donde la diferencia es del orden del 10%. Este hecho es la motivación para usar las probabilidades de interacción de energía independiente  $\nu_j$ .

El uso de una interacción de probabilidad para un “promedio” de la capa  $M$  esta motivado por hecho de que las transiciones de relajación desde y hacia una capa  $M$  son tratadas de una forma promedio. Dada la definición de  $\nu_j$ ,  $\nu_{\langle M \rangle}$  es

$$\nu_{\langle M \rangle} = 1 - \prod (1 - \nu_{M_i}) \quad (1.63)$$

donde el producto se hace sobre el número de sub-capas  $M$  disponibles para el elemento  $Z$  (hasta 5). Las probabilidades de interacción  $\nu_K, \nu_{L_I}, \nu_{L_{II}}, \nu_{L_{III}}$  y  $\nu_{\langle M \rangle}$ , calculadas con la función de pesado  $1/k$ , son guardadas en el archivo `photo_relax.data` y leídos por la sub-rutina `edgset` que es llamada desde `HATCH`.

Figura 3: Probabilidades de interacción  $\nu_j$  para diferentes capas calculadas de la ecuación 1.62 usando  $\phi(k) = 1/k$  (líneas solidas) o  $\phi(k) = \text{const}$  (líneas punteadas).



Con todo esto, el algoritmo para seleccionar la capa que absorbe el fotón incidente, queda como sigue:

- 2.1 Se determina la capa  $j$  más interna que tiene una energía de ligadura más baja que la energía del fotón incidente y se elige un número al azar  $r_2$ .
  - 2.2 Si  $r_2 < \nu_j$  o  $j > \langle M \rangle^4$ , entonces se da  $j$ .
  - 2.3 Se hace  $r_2 = (1 - r_2)/(1 - \nu_j)$ ,  $j = j + 1$ , se retorna al paso 2.2.
3. Una vez ha sido determinado el elemento y la capa absorbente del fotón, se relaciona un foto-electrón con energía cinética  $k - U_j(Z)$ , donde  $U_j(Z)$  es la energía de ligadura de la capa seleccionada. La vacante que se crea se trata en la rutina `relax`. El muestreo de la dirección del foto-electrón se discute en la sección 1.2.3.3.

### 1.2.3.2. Simulación simplificada de la absorción foto-eléctrica

Si la bandera IEDGFL para la región actual se pone en cero, se lleva a cabo una simulación simplificada del proceso de foto-absorción. Este proceso simplificado consiste de un solo paso:

1. Estructurar un foto-electrón con energía  $k$

### 1.2.3.3. Dirección del foto-electrón

El muestreo de la dirección del foto-electrón, cuyo comportamiento es controlado por el interruptor IPHTER, el cual se desarrolla en base a región por región. Si se hace cero, el foto-electrón hereda la dirección del fotón incidente. Si se hace distinta de cero (la selección por defecto), la dirección es muestreada por la distribución de Sauter [26]. Esta implementación que es la que se adopta se discute en detalle en la referencia [27]. Se hace aquí un breve resumen.

La distribución de Sauter para el ángulo polar  $\mu = \cos \theta$  con respecto al fotón incidente puede ser proyectada en la forma [27]

$$f(\mu) d\mu = \frac{1 - \mu^2}{(1 - \beta\mu)^4} [1 + \kappa(1 - \beta\mu)] d\mu \quad (1.64)$$

donde  $\beta$  es la velocidad del electrón en unidades de velocidad de la luz y

$$\kappa = \frac{\gamma}{2} (\gamma - 1) (\gamma - 2), \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (1.65)$$

Esta ecuación puede ser muestreada al generar valores candidatos  $\mu$  de:

$$g(\mu) = \frac{1}{2\gamma^2 (\kappa + \gamma)^2} \frac{1 + \kappa(1 - \beta\mu)}{(1 - \beta\mu)^2} \quad (1.66)$$

que es una PDF normalizada para  $\mu$ , y usando:

$$h(\mu) = \frac{\gamma + 1}{2\gamma} \frac{1 - \mu^2}{1 - \beta\mu} \quad (1.67)$$

como función de rechazo, ya que siempre es positiva y tiene un máximo de uno.

Para generar valores de  $\mu$  de  $g(\mu)$ , se usa:

$$\mu = \frac{1}{\beta} \left[ 1 - \left( \sqrt{\left( \kappa + \frac{1}{1+\beta} \right)^2 + 4\beta\gamma^2 (\kappa + \gamma^2) r_1 - \kappa} \right)^{-1} \right] \quad (1.68)$$

donde  $r_1$  es un número al azar distribuido uniformemente.

Vale la pena notar que, la distribución de Sauter es valida solamente para la capa  $K$ , además de que se deriva de una aproximación extrema relativista. Por tanto, el tratamiento de la distribución angular del foto-electrón se deja como el macro `$SELECT-PHOTOELECTRON-DIRECTION;`, el cual puede ser reemplazado, si el usuario tiene una mejor aproximación.

#### 1.2.4. Dispersión coherente -Dispersión de *Rayleigh*-

El programa EGSnrc ha heredado el tratamiento del proceso de dispersión coherente del programa EGS4 [9]. Esto significa que se usan las secciones eficaces totales para dispersión coherente del trabajo de Storm e Israel [14] y los factores atómicos de forma  $F_T(q, Z)$  del trabajo de Hubbel y Øverbø [28]. Los factores de forma para moléculas son calculados de la aproximación de átomo independiente, *i.e.*:

$$[F_T(q)]^2 = \sum p_i [F_T(q, Z_i)]^2 \quad (1.69)$$

donde  $p_i$  es el índice estequiométrico del  $i$ -ésimo elemento,  $Z_i$  es el número atómico y  $q$  el momento transferido cuando un fotón con energía  $k$  es dispersado un ángulo  $\theta$ :

$$q = k \sqrt{\frac{1 - \cos \theta}{2}} \quad (1.70)$$

El diferencial de sección eficaz de dispersión coherente, respecto al ángulo del fotón  $\Omega = (\theta, \phi)$  es:

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} (1 + \cos^2 \theta) [F_T(q)]^2 \quad (1.71)$$

La ecuación anterior puede ser muestreada al re-escribirla en términos de  $q^2$ :

$$\frac{d\sigma_R}{dq^2} = \frac{4\pi r_0^2}{k^2} A(q_{\text{máx}}^2) \frac{1 + \cos^2 \theta [F_T(q)]^2}{2 A(q_{\text{máx}}^2)} \quad (1.72)$$

donde:

$$A(q^2) = \int_0^{q^2} dq'^2 [F_T(q')]^2 \quad (1.73)$$

y  $q_{\text{máx}} = k$  es el máximo momento posible transferido. Se utiliza a  $[F_T(q)]^2 / A(q_{\text{máx}}^2)$  como PDF para  $q^2$  y a  $(1 + \cos^2 \theta) / 2$  como función de rechazo.

El muestreo real, que se hace en el macro `$RAYLEIGH-SCATERING;`, es llevado a cabo solamente si el interruptor `IRAYLR` se hace distinto de cero en la región de interés. Por defecto, `IRAYLR` está en cero en el sub-programa `block data`. La motivación para esta elección es que el macro `$RAYLEIGH-SCATERING;` requiere que la función  $A(q^2)$  esté incluida en `PEGS`. Estos datos adicionales son incluidos solamente si el usuario lo requiere específicamente de `PEGS`. Se recomienda que la opción de dispersión Rayleigh sea utilizada para cálculos a baja energía (por ejemplo. debajo de 1 MeV). Vale la pena notar que la inclusión de la dispersión coherente sin la opción de dispersión incoherente (véase la sección 1.2.2) da como resultado demasiada dispersión de fotones, por lo que deben usarse los efectos de ligadura para dispersión incoherente si la opción de Rayleigh es utilizada.

### 1.3. Relajaciones Atómicas

Cuando los fotones y partículas cargadas viajan a través de la materia interactúan con ella, produciendo iones excitados, estos se relajan a su estado de más baja energía por la migración de la vacante inicial a las capas externas, vía la emisión de rayos X característicos y electrones Auger o Coster-Kroning.

En el sistema `EGS4`, solamente son tratadas las relajaciones de la capa  $K$  seguidas de absorción foto-eléctrica vía la emisión de fluorescencia  $K_\alpha$  y  $K_\beta$  y están intrínsecamente asociadas con la rutina `PHOTO`.

A diferencia del EGS4 en el sistema EGSnrc se ha extendido el tratamiento de las relajaciones atómicas al incluir capas altas además de la producción de electrones Auger y Coster-Kroning. Además, la cascada de relajación es un proceso separado, que puede ser iniciado después de que una interacción con un fotón o con un electrón haya producido una vacante en una capa interna. Las relajaciones son tratadas en la rutina `relax`, la cual es llamada cada vez que se crea una vacante en una capa interna; dichas vacantes, pueden ser creadas en eventos de foto-absorción y en eventos de dispersión *Compton*.

La cascada de desexcitación es un proceso complejo, con cientos de transiciones posibles para elementos con  $Z$  grande. Se considera 1 keV el límite más bajo de energía aplicable al sistema, por consiguiente, en los procesos de relajación, solamente son tratadas las vacantes en capas con energía de ligadura arriba de 1 keV. Si se toma en cuenta que solamente los elementos con  $Z \geq 52$  tienen capas  $M$  con energía de ligadura mayores que 1 keV y que las capas  $M$  tiene energías de ligadura menores que 10 keV para todos los elementos, es razonable aproximar al modelo de transición desde y hacia una capa  $M$  en una forma promedio. Asumiendo que para la mayoría de aplicaciones las transiciones de  $K$  a  $M$  son más importantes que las de  $L$  a  $M$  o de  $M$  a una capa más baja, se define a  $U_{\langle M \rangle}(Z)$ , como el promedio ponderado de las energías de ligadura  $U_{M_j}(Z)$  del elemento  $Z$  con las ponderaciones dadas por las probabilidades de transición,  $\nu_{KM_j}$ , de  $K$  a  $M_j$ :

$$U_{\langle M \rangle}(Z) \equiv \frac{\sum \nu_{KM_j} U_{M_j}(Z)}{\sum \nu_{KM_j}} \quad (1.74)$$

En una implementación consistente con la lógica general del sistema EGS, el algoritmo de relajación debería poner todas las partículas producidas en el curso de la cascada de desexcitación en la pila de partículas, para luego ser descartadas en las rutinas `PHOTON` O `ELECTR` si sus energías son menores que las energías umbrales de transporte especificadas. Tal aproximación es extremadamente derrochadora si la energía umbral de transporte es grande comparada con el límite inferior de 1 keV para la cascada de desexcitación. Por consiguiente, el proceso de relajación se detiene para vacantes con energías de ligadura menores que  $E_{\text{mín}}$ , que se define como:

$$E_{\text{mín}} = \text{máx} \{1\text{keV}, \text{mín} \{\text{PCUT}, \text{ECUT} - m\}\} \quad (1.75)$$

y su energía se registra localmente. Además, también son depositadas localmente las energías de los fotones o electrones que son menores que la energía umbral., aún si estos fueron producidos en transiciones desde vacantes con energías de ligadura mayores que  $E_{\text{mín}}$ . La energía sub-umbral total es colectada en la variable EDEP, la cual está en COMMON/EPCONT/, y puede ser conocida por el usuario con una llamada a IARG=4 en la rutina de registro.

Para facilitar el manejo de la cascada de relajación, se define un número de capa  $n$ , para cada capa tratada. Para la capas  $K$ ,  $n = 1$ ; para las capas de  $L_I$  a  $L_{III}$ ,  $n$  va de 2 a 4 respectivamente; a  $\langle M \rangle$  le corresponde  $n = 5$ ; para  $\langle N \rangle$ ,  $n = 6$ ; a todas las otras capas le corresponde  $n = 7$ . Un listado de posibles transiciones,  $L_n$ , se asocia con cada capa, esto es:

$$L_n = \{(\nu_1, s_1), (\nu_2, s_2), \dots, (\nu_{k_n}, s_{k_n})\} \quad (1.76)$$

donde  $k_n$  es el número de transiciones posibles para la capa de tipo  $n$  y  $\nu_i$  las probabilidades de transición para una transición en el estado final  $s_i$ . Los estados finales  $s_i$ , se definen de la siguiente manera:

$$s_i = \begin{cases} n_i & , \text{ para transiciones fluorescentes} \\ 10 + n_i & , \text{ para transiciones Coster-Kroning} \\ 100n_{i,1} + n_{i,2} & , \text{ para transiciones Auger} \end{cases} \quad (1.77)$$

donde  $n_i$  o  $n_{i,1}$  y  $n_{i,2}$  son los números de capa de las vacantes nuevas creadas en las transiciones fluorescente, Coster-Kroning y Auger, respectivamente. La tabla I resume todas las transiciones manejadas en la rutina de relajación.

Además, se define una pila de vacantes que mantiene todas las vacantes en un estado dado de la cascada de relajación.

Tabla I: Transiciones de relajación manejadas por el sistema EGSnrc

vacante inicial	código de capa	transición	código de estado final
K	1	Fluorescente $K \rightarrow L_{II}$	3
		$K \rightarrow L_{III}$	4
		$K \rightarrow \langle M \rangle$	5
		$K \rightarrow \langle N \rangle$	6
		Auger $K \rightarrow L_I L_I$	202
		$K \rightarrow L_{II} L_I$	302
		$K \rightarrow L_{II} L_{II}$	303
		$K \rightarrow L_{III} L_I$	402
		$K \rightarrow L_{III} L_{II}$	403
		$K \rightarrow L_{III} L_{III}$	404
		$K \rightarrow \langle M \rangle L_I$	502
		$K \rightarrow \langle M \rangle L_{II}$	503
		$K \rightarrow \langle M \rangle L_{III}$	504
		$K \rightarrow \langle M \rangle \langle M \rangle$	505
		$K \rightarrow \langle N \rangle L_I$	602
		$K \rightarrow \langle N \rangle L_{II}$	603
		$K \rightarrow \langle N \rangle L_{III}$	604
		$K \rightarrow \langle N \rangle \langle M \rangle$	605
$K \rightarrow \langle N \rangle \langle N \rangle$	606		
$L_I$	2	Fluorescente $L_I \rightarrow \langle M \rangle$	5
		$L_I \rightarrow \langle N \rangle$	5
		Coster-Kroning $L_I \rightarrow L_{II}$	13
		$L_I \rightarrow L_{III}$	14
		Auger $L_I \rightarrow \langle M \rangle \langle M \rangle$	505
		$L_I \rightarrow \langle N \rangle \langle M \rangle$	605
$L_I \rightarrow \langle N \rangle \langle N \rangle$	606		
$L_{II}$	3	Fluorescente $L_{II} \rightarrow \langle M \rangle$	5
		$L_{II} \rightarrow \langle N \rangle$	6
		Coster-Kroning $L_{II} \rightarrow L_{III}$	14
		Auger $L_{II} \rightarrow \langle M \rangle \langle M \rangle$	505
		$L_{II} \rightarrow \langle N \rangle \langle M \rangle$	605
$L_{II} \rightarrow \langle N \rangle \langle N \rangle$	606		
$L_{III}$	4	Fluorescente $L_{III} \rightarrow \langle M \rangle$	5
		$L_{III} \rightarrow \langle N \rangle$	6
		Auger $L_{III} \rightarrow \langle M \rangle \langle M \rangle$	505
		$L_{III} \rightarrow \langle N \rangle \langle M \rangle$	605
$L_{III} \rightarrow \langle N \rangle \langle N \rangle$	606		
$\langle M \rangle$	5	Fluorescente $\langle M \rangle \rightarrow \langle N \rangle$	6
		$\langle M \rangle \rightarrow \langle N \rangle \langle N \rangle$	606

Con las definiciones anteriores, la simulación de la cascada de relajaciones será bastante fácil:

1. Se pone la vacante inicial en la pila de vacantes, se pone el contador de la pila de vacantes,  $m = 1$ .
2. Si  $m = 0$ , se regresa el control a la rutina de llamado.
3. Se toma la vacante superior, denotada por  $n_i$ , desde la pila de vacantes se reduce a  $m$  en 1
4. Si  $U_{n_i} < E_{\text{mín}}$ , se hace  $\text{EDEP}=\text{EDEP}+U_{n_i}$ , de otro modo regresar al paso 2.
5. Se elige un número al azar  $r$ , se hace  $j = 1$ .
6. Si  $r \leq \nu_j$ , ir al paso 8.
7.  $r = (1 - r)/(1 - \nu_j)$ ,  $j = j + 1$ , ir al paso 6.
8.  $j$  es el número de la transición seleccionada.
  - 8.1 Si  $s_j < 10$ , entonces la nueva vacante está en la capa  $n_j = s_j$ , se incrementa a  $m$  en 1, se produce un foton fluorescente con energía  $E = U_{n_i} - U_{n_j}$ . Si  $E < \text{PCUT}$ , entonces  $\text{EDEP}=\text{EDEP}+E$ , de otro modo, se elige la dirección del fotón uniformemente y se pone en la pila de partículas del EGSnrc.
  - 8.2 De otra manera si  $s_j < 100$ , entonces la nueva vacante está en la capa  $n_j = s_j - 10$ , se pone en la pila de vacantes, se incrementa a  $m$  en 1, se produce un electron Coster-Kroning con energía cinética  $E = U_{n_i} - U_{n_j}$ . Si  $E < \text{ECUT}-m$ , entonces  $\text{EDEP}=\text{EDEP}+E$ , de otro modo, se selecciona la dirección del electrón uniformemente y se pone en la pila de partículas del EGSnrc.
  - 8.3 De otra forma, las dos nuevas vacantes son  $n_{j,1} = (S_j \bmod 100)$  y  $n_{j,2} = s_j - 100n_{j,1}$ , se ponen en la pila de vacantes, se incrementa a  $m$  en 2, se produce un electron Auger con energía cinética  $E = U_{n_i} - U_{n_{j,1}} - U_{n_{j,2}}$ . Si  $E < \text{ECUT}-m$ , entonces  $\text{EDEP}=\text{EDEP}+E$ , de otro modo, se selecciona la dirección del electrón uniformemente y se pone en la pila de partículas del EGSnrc.

9. Retornar al paso 2.

Finalmente, se define para cada uno de los pasos del 8.1 al 8.3 nuevas llamadas para la rutina AUSGAB con los argumentos IARG=25 al 27.

## 1.4. Simulación del transporte de electrones

### 1.4.1. Discusión general

La técnica de historia condensada (CH) fue introducida por M. Berger al principio de la década de 1960 [10]. En esta técnica, se agrupa en un solo paso, muchos segmentos de camino del camino al azar de electrones reales. El efecto acumulado de las colisiones elásticas e inelásticas durante este paso son tomados en cuenta al muestrear los cambios de energía y dirección en una distribución de dispersión múltiple apropiada al final del paso. Esta aproximación se justifica por la observación de que los cambios en el estado del electrón en una colisión simple son normalmente muy pequeños y falla cuando esta condición no se satisface (a muy bajas energías). Berger hizo también dos implementaciones distintas de la técnica Ch, que son conocidas como esquema de Clase I y esquema de Clase II.

El sistema EGSnrc usa el esquema de Clase II para la simulación de transporte de electrones. Es decir, los procesos bremsstrahlung que resultan en la creación de fotones por encima de una energía umbral  $k : c$ , y las colisiones inelásticas que ponen en movimiento los electrones atómicos con energías arriba de  $T_c$ , ambos son simulados y los secundarios son transportados. A dichas interacciones se les conoce también como colisiones catastróficas. Las colisiones inelásticas sub-umbral, los eventos radiativos y las colisiones inelásticas son sujetos de agrupación.

Cada esquema CH debe proveer las reglas para la selección de la longitud de camino  $\Delta s_n$ , la pérdida de energía  $\Delta E_n$ , el cambio de la dirección de  $\Omega_n$  a  $\Omega_{n+1}$  y un desplazamiento espacial  $\Delta \vec{x}_n$  para cada paso de un camino al azar CH. Se requiere, además, un algoritmo de cruce de frontera para el transporte en medios heterogéneos.

A continuación se da un breve tratamiento teórico del transporte del esquema de Clase II de la técnica CH, que ayudará a establecer la motivación y la definición de varias cantidades usadas en la implementación CH.

La ecuación de transporte para un flujo de electrones  $\Phi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t)$  en un medio con densidad de centros de dispersión (átomos o moléculas)  $n(\vec{x})$  está dado por:

$$\frac{d\Phi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t)}{dt} = S(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) + vI[\Phi] \quad (1.78)$$

donde:

- $S(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t)$  es el número de electrones con energía  $E$  y velocidad  $\vec{v} = (v, \vec{\Omega})$  en una posición  $\vec{x}$  por unidad de volumen, energía e intervalo de ángulo sólido, impartido por unidad de tiempo por una fuente externa o por fotones interactuando con el medio en un tiempo  $t$ . Está última parte del termino de la fuente es la causa del acoplamiento del flujo de electrones y fotones.
- $d\Phi/dt$  es la derivada total respecto al tiempo, en la ausencia de campos externos y está dada por:

$$\frac{d\Phi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t)}{dt} = \frac{\partial\Phi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) \quad (1.79)$$

- El término de colisión  $I[\Phi]$  representa los cambios en el flujo de la partícula debido a las colisiones con los átomos o moléculas del medio circundante:

$$I[\Phi] = -n(\vec{x}) \Phi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) \int_0^E dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sigma(E, E', \Omega', \vec{x}) \\ + n(\vec{x}) \int_E^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Phi(\vec{x}, \vec{\Omega}', E', t) \sigma(E, E' - E, \vec{\Omega}' \cdot \Omega', \vec{x}) \quad (1.80)$$

donde  $\sigma(E, E', \Omega', \vec{x})$  es la sección eficaz microscópica en una posición  $\vec{x}$  para todas las posibles interacciones en las cuales un electrón con energía  $E$  pierde una energía  $E'$  y cambia su dirección por  $\vec{\Omega}'$ .

La integral de colisión  $I[\Phi]$  representa el balance entre las perdidas y ganancias de la partícula debidas a las interacciones descritas por la sección eficaz  $\sigma(E, E', \Omega', \vec{x})$ .

En una simulación Monte Carlo la solución de la ecuación 1.78 se obtiene normalmente por medio de :

$$\Phi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) = \int_0^t dt_0 \int_E^\infty dE_0 \int d\vec{x}_0 \int_{4\pi} d\vec{\Omega}_0 S(\vec{x}_0, \vec{\Omega}_0, E_0, t_0) \Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) \quad (1.81)$$

donde  $\Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t)$  es la versión acortada de  $\Phi(\vec{x}_0, \vec{\Omega}_0, E_0, t_0)$  la cual es la solución de la ecuación 1.78 para una fuente:

$$S_0 = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}_0) \delta^{(2)}(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}_0) \delta(E - E_0) \delta(t - t_0) \quad (1.82)$$

esto es, una partícula es puesta en movimiento en un tiempo  $t_0$  con energía  $E_0$ , dirección  $\vec{\Omega}_0$  en una posición  $\vec{x}_0$ .

La integración de la ecuación 1.81 se realiza por medio de una técnica Monte Carlos, es decir:

1. Se escogen partículas de la fuente  $S(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t)$ , se denotan sus coordenadas por  $E_0, \vec{x}_0, \vec{\Omega}_0, t_0$ .
2. Se resuelve la ecuación de transporte para estas partículas por una simulación Monte Carlo (esto es, se resuelve la ecuación de transporte para  $\Phi_0$ ).

Normalmente la simulación Monte Carlo se inicia por una partícula simple desde una fuente externa, la cual se coloca en la pila de partículas. En el sistema EGSnrc esto se realiza con una llamada a **SHOWER**. Entonces, en cada etapa de la simulación Monte Carlo, la fuente corresponde a todas las partículas que están actualmente en el **STACK**.

Se acostumbra algunas veces usar la sección eficaz macroscópica  $\Sigma$ :

$$\Sigma(E, E', \Omega, \vec{x}) \quad (1.83)$$

la cual, cuando se integra sobre  $E'$  y  $\Omega'$ , representa el número de interacciones por unidad de longitud para electrones con energía  $E$ .

La densidad atómica o molecular,  $n$ , está dada por:

$$n = \rho \frac{N_A}{M_A} = \frac{\rho}{uA} \quad (1.84)$$

donde  $N_A = 6,0022045 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$  es la constante de Avogadro,  $M_A$  es la masa molar en  $\text{mol}^{-1}$ ,  $u = 1,0665655 \times 10^{-24} \text{g}$  es la unidad de masa atómica y  $A$  es la masa relativa atómica o molecular. Entonces, las secciones eficaces macroscópicas  $\Sigma$  se obtienen de las secciones eficaces microscópicas  $\sigma$  al multiplicarla con uno de los factores de arriba.

Para electrones,  $\sigma$  es la suma de la sección eficaz bremsstrahlung  $\sigma_{\text{brem}}$ , la sección eficaz para colisiones inelásticas con electrones atómicos,  $\sigma_{\text{inel}}$ , y la sección eficaz de dispersión elástica,  $\sigma_{\text{el}}$ :

$$\sigma(E, E', \Omega, \vec{x}) = \sigma_{\text{brem}}(E, E', \Omega, \vec{x}) + \sigma_{\text{inel}}(E, E', \Omega, \vec{x}) + \sigma_{\text{el}}(E, \Omega, \vec{x}) \delta(0) \quad (1.85)$$

donde la función delta de Dirac,  $\delta$ , expresa el hecho de que las colisiones inelásticas son eventos de energía cero. Además, los positrones interactúan por medio de los procesos de aniquilación descritos por  $\sigma_{\text{annih}}$ , esta sección eficaz ingresa solamente como el tercer término de la ecuación 1.78, sin embargo, como aniquilación conduce simplemente a la pérdida de la partícula (al menos cuando se ve solo como el flujo de electrones, el correspondiente término de ganancia aparece como un término de fuente en la fluencia de fotones).

En una implementación CH de Clase II la integral de colisión se divide en dos partes,  $I_{>}[\Phi_0]$  e  $I_{<}[\Phi_0]$ . La primera incluye solamente las interacciones con cambios en energía más grandes que  $T_c$  (colisiones inelásticas) o  $k_c$  (bremsstrahlung), la última incluye solamente colisiones con cambios de energía menores  $T_c$  o  $k_c$ . Las interacciones elásticas, que son procesos de pérdida de energía cero, están incluidos en  $I_{<}[\Phi_0]$ . Por brevedad, en las siguientes ecuaciones, se obviará la dependencia de  $\vec{x}$  y del tiempo. Entonces, para  $I_{>}[\Phi_0]$ , se tiene:

$$\begin{aligned} I_{>}[\Phi_0] = & \int_{E+T_c}^{\infty} dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Phi_0(\vec{\Omega}', E') \Sigma_{\text{inel}}(E', E' - E, \vec{\Omega}' \cdot \Omega') \\ & \int_{E+k_c}^{\infty} dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Phi_0(\vec{\Omega}', E') \Sigma_{\text{brem}}(E', E' - E, \vec{\Omega}' \cdot \Omega') \\ & \Phi_0(\vec{\Omega}, E) \left[ \Sigma_{\text{inel}}^{(\text{tot})}(E) + \Sigma_{\text{brem}}^{(\text{tot})}(E) \right] \end{aligned} \quad (1.86)$$

En la ecuación anterior  $\sum_{\text{inel}}^{(\text{tot})}(E)$  y  $\sum_{\text{brem}}^{(\text{tot})}(E)$  son las secciones eficaces macroscópicas para colisiones (catastróficas) inelásticas o bremsstrahlung, respectivamente, donde:

$$\sum_{\text{inel,brem}}^{(\text{tot})}(E) = \int_{T_c, k_c}^E dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sum_{\text{inel,brem}}(E, E', \Omega') \quad (1.87)$$

Para la parte  $I_{<}[\Phi_0]$ , se tiene:

$$I_{>}[\Phi_0] = \int_{4\pi} d\Omega' \left[ \Phi_0(\vec{\Omega}', E) \sum_{el}(E, \vec{\Omega}' \cdot \Omega') - \Phi_0(\vec{\Omega}, E) \sum_{el}(E, \Omega') \right] + I_{\Delta E}[\Phi_0] \quad (1.88)$$

donde  $I_{\Delta E}[\Phi_0]$  es la parte del término de colisión sub-umbral que está asociado con la pérdida de energía, y está dado por:

$$\begin{aligned} I_{\Delta E}[\Phi_0] = & \int_E^{E+T_c} dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Phi_0(\vec{\Omega}', E') \sum_{\text{inel}}(E', E' - E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \\ & - \Phi_0(\vec{\Omega}, E) \int_0^{T_c} dE' \int_{4\pi} d\Omega' \sum_{\text{inel}}(E, E', \Omega') \\ & + \int_E^{E+k_c} dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Phi_0(\vec{\Omega}', E') \sum_{\text{brem}}(E', E' - E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \\ & - \Phi_0(\vec{\Omega}, E) \int_0^{k_c} dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sum_{\text{brem}}(E, E', \Omega') \end{aligned} \quad (1.89)$$

En este punto, la aproximación usual que se hace es asumir que las deflexiones angulares en colisiones con pequeña pérdida de energía son insignificantes o pueden ser tomados en cuenta al modificar la parte de las colisiones elásticas en forma apropiada. Con esta aproximación y después de un cambio en las variables de integración, la ecuación 1.89 se puede reescribir como:

$$\begin{aligned} I_{\Delta E}[\Phi_0] = & \int_0^{T_c} dE' \left[ \Phi_0(\vec{\Omega}, E + E') \sum_{\text{inel}}(E + E', E') \right. \\ & \left. - \Phi_0(\vec{\Omega}, E) \sum_{\text{inel}}(E, E') \right] \\ & \int_0^{k_c} dE' \left[ \Phi_0(\vec{\Omega}, E + E') \sum_{\text{brem}}(E + E', E') \right. \\ & \left. - \Phi_0(\vec{\Omega}, E) \sum_{\text{brem}}(E, E') \right] \end{aligned} \quad (1.90)$$

En la ecuación anterior la sección eficaz no depende de  $\Omega$  que está integrado sobre todos los ángulos. Si para los primeros términos en los corchetes se hace un expansión en series de Taylor, se tiene:

$$\begin{aligned} \Phi_0(\vec{\Omega}, E + E') \sum_{\text{inel,brem}}(E + E', E') &\approx \Phi_0(\vec{\Omega}, E) \sum_{\text{inel,brem}}(E, E') \\ + \frac{\partial}{\partial E} \left[ \Phi_0(\vec{\Omega}, E) \sum_{\text{inel,brem}}(E, E') \right] E' &+ \dots \end{aligned} \quad (1.91)$$

y el término de colisión  $I_{\Delta E}[\Phi_0]$  se simplifica a:

$$I_{\Delta E}[\Phi_0] \approx \frac{\partial}{\partial E} \left[ \Phi_0(\vec{\Omega}, E) L(E, T_c, k_c) \right] \quad (1.92)$$

donde  $L(E, T_c, k_c)$  es el poder de frenado restringido para las energías umbrales  $T_c$  y  $k_c$ , y:

$$\begin{aligned} L(E, T_c, k_c) &= L_{\text{coll}}(E, T_c) + L_{\text{rad}}(E, k_c) \\ L_{\text{coll}}(E, T_c) &\equiv \int_0^{T_c} dE' \sum_{\text{inel}}(E, E') E' \\ L_{\text{rad}}(E, k_c) &\equiv \int_0^{k_c} dE' \sum_{\text{brem}}(E, E') E' \end{aligned} \quad (1.93)$$

Con todo lo anterior, la ecuación de transporte puede escribirse como:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t)}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) &= \\ S_0 - \Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) \left[ \sum_{\text{inel}}^{(\text{tot})}(\vec{x}, E) + \sum_{\text{brem}}^{(\text{tot})}(\vec{x}, E) \right] & \\ + \int_{E+T_c}^{\infty} dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}', E', t) \sum_{\text{inel}}(\vec{x}, E', E' - E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') & \\ + \int_{E+k_c}^{\infty} dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}', E', t) \sum_{\text{brem}}(\vec{x}, E', E' - E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') & \\ + \int_{4\pi} d\Omega' \left[ \Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}', E', t) \sum'_{\text{el}}(\vec{x}, E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') - \Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}', E', t) \sum'_{\text{el}}(\vec{x}, E, \vec{\Omega}') \right] & \\ + \frac{\partial}{\partial E} \left[ \Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}', E', t) L(\vec{x}, E, T_c, k_c) \right] & \end{aligned} \quad (1.94)$$

En la ecuación 1.94 se ha puesto de nuevo la dependencia de la posición del flujo, el poder de frenado y secciones eficaces, y la prima en la sección eficaz de dispersión elástica significa que incluye de alguna manera las contribuciones de las deflecciones angulares debidas a los procesos sub-umbrales de pérdida de energía.

Ahora, se define la variable  $s$ , conocida como longitud de camino, la cual satisface lo siguiente:

$$\begin{aligned}\frac{dt}{ds} &= \frac{1}{v} \\ \frac{dE}{ds} &= -L(E, E_c, k_c), \quad \circ \\ s &= \int_E^{E_0} \frac{dE'}{L(E, E_c, k_c)}\end{aligned}\tag{1.95}$$

A la aproximación de la ecuación 1.91, junto con la ecuación 1.95 se le conoce como CSDA (Continuous Slowing-Down-Aproximation) aproximación de reducción continua. La CSDA se usa en el sistema EGSnrc para describir los procesos sub-umbrales de pérdida de energía. Está no es una aproximación necesaria y puede ser reemplazada.

La ecuación 1.94 puede ser resuelta con el siguiente código Monte Carlo:

1. Se elige el siguiente electrón de la pila de partículas, se denota su energía por  $E_0$ , su dirección por  $\vec{\Omega}$  y su posición por  $\vec{x}_0$ .
2. Se muestrea la energía  $E$  a la cual ocurrirá la próxima interacción catastrófica de la distribución de probabilidad siguientes:

$$P(E) = \exp\left(-\int_E^{E_0} dE' \left[\widetilde{\sum}_{\text{inel}}(E') + \widetilde{\sum}_{\text{brem}}(E')\right]\right)\tag{1.96}$$

donde se ha definido a:

$$\widetilde{\sum}_{\text{inel,brem}}(E') = \frac{\sum_{\text{inel,brem}}(E)}{L(E, E_c, k_c)}\tag{1.97}$$

como la sección eficaz total para bremsstrahlung o colisiones inelásticas para interacciones discretas por unidad de pérdida de energía.

3. Se modifica la posición, la dirección y energía de la partícula, en tal forma que se aproxime tanto como sea posible a la solución exacta de la ecuación de transporte:

$$\frac{\partial \Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}, s)}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}, s) = \int_{4\pi} d\Omega' \left[ \Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}', s) \sum'_{\text{el}}(\vec{x}, s, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') - \Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}, s) \sum'_{\text{el}}(\vec{x}, \vec{\Omega}, s) \right] \quad (1.98)$$

donde la dependencia de  $s$  de todas las cantidades se entiende en el sentido de la ecuación 1.95.

4. Una vez en el sitio de interacción, se selecciona el tipo de interacción de la sección eficaz total de interacción en la posición actual y para la energía actual, se muestrean los cambios de energía y dirección del diferencial de sección eficaz apropiado, se ponen todas las partículas resultantes en la pila y se regresa al paso 1.
5. Se repiten los pasos del 1 al 4 hasta que la pila esté vacía o todas las energías están abajo de la umbral especificada.

El procedimiento para positrones es similar pero involucra la sección eficaz de aniquilación además de bremsstrahlung y colisiones inelásticas con electrones atómicos.

Después de esta discusión, es claro que se necesitan las siguientes cantidades y algoritmos para simulación de historia condensada de Clase II o del transporte de electrones y positrones:

1. Poderes de frenado restringidos debidos a los procesos sub-umbrales. La parte de colisión de poder de frenado restringido merece un párrafo extra, y es discutido en la sección 1.4.5. La parte radiativa del poder de frenado restringido se discute en asociación con la sección eficaz bremsstrahlung (sección 1.4.2).

2. Secciones eficaces, diferenciales y totales, así como la técnica de muestreo asociada, para procesos bremsstrahlung con una pérdida de energía mayor que  $k_c$  (sección 1.4.2), colisiones inelásticas con pérdidas de energía más grandes que  $T_c$  (sección 1.4.3), y aniquilación de positrones (sección 1.4.4).
3. Secciones eficaces de dispersión elástica que toman en cuenta las deflexiones angulares debidas a colisiones inelásticas sub-umbrales (sección 1.4.6).
4. Un procedimiento para muestrear la distancia entre las interacciones discretas en base de la ecuación 1.96 (sección 1.4.10)
5. Un procedimiento para la solución aproximada de la ecuación 1.98 la cual describe los procesos de transporte entre los subsecuentes eventos discretos. Está es quizás la parte más difícil de un algoritmo de historia condensada Clase II. Este envuelve la construcción de una teoría de dispersión múltiple elástica, la cual es necesaria para modelar las deflexiones angulares, y un algoritmo de paso de electrones, el cual relaciona los desplazamientos espaciales con la longitud de camino (y posiblemente el ángulo de dispersión múltiple elástica). Estos dos aspectos de la implementación CH en el sistema EGSnrc se discuten en las secciones 1.4.7 y 1.4.8.

## 1.4.2. Bremsstrahlung

### 1.4.2.1. Sección eficaz

Los procesos bremsstrahlung y de producción de pares son simétricamente cruzados (es decir el diagrama de Feynman para un electrón bremsstrahlung se obtiene al voltear los fotones incidentes y las líneas de salida de positrones), por consiguiente, sus secciones eficaces están estrechamente relacionadas. En el sistema EGSnrc el tratamiento del proceso bremsstrahlung está determinado por el parámetro `ibr_nist` que está en `COMMON/BREMPR/`. Si `ibr_nist = 0` (opción por defecto), se emplean las secciones eficaces del sistema EGS4, esto es:

- Secciones eficaces extrema relativistas con corrección de Coulomb para energías por encima de 50 MeV, como esta formulado en el artículo de Koch y Motz [29].

- Secciones eficaces Bethe-Heitler en la primera aproximación de Born con un factor de corrección empírico para energías abajo de 50 MeV. [29]

Si `ibr_nist = 1`, el proceso bremsstrahlung es modelado de acuerdo a la base de datos de secciones eficaces bremsstrahlung de la NIST [30, 31] las cuales son la base para los poderes de frenado radiativos recomendados por ICRU [32] y que están basadas en:

- Secciones eficaces extrema relativistas con corrección de Coulumb para energías arriba de 50 MeV.
- Cálculos de análisis parcial de ondas abajo de los 2 MeV.
- Interpolación spline de 2 a 50 MeV.

Además, se emplea un procedimiento más elaborado para la contribución de los electrones atómicos en el proceso bremsstrahlung.

El diferencial de sección eficaz bremsstrahlung, por defecto, respecto a la energía  $k$  del fotón, de un electrón con energía total  $E$  incidente a un átomo con número atómico  $Z$ , es:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{brem}(E, Z)}{dk} &= \frac{A'(E, Z) r_0^2 \alpha Z (Z + \xi(Z))}{k} \left\{ \left( 1 + \frac{E'^2}{E^2} \right) \left[ \phi_1(\delta) - \frac{4}{3} \ln Z - 4\tilde{f}_c(E, Z) \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{2E'}{3E} \left[ \phi_2(\delta) - \frac{4}{3} \ln Z - 4\tilde{f}_c(E, Z) \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.99)$$

donde  $E' = E - k$  es la energía del electrón después de la emisión de un fotón,  $r_0$  es el radio clásico del electrón,  $\alpha$  es la constante de estructura fina,

$$\delta = 136Z^{-1/3}2\Delta, \quad \Delta = \frac{km}{2EE'}, \quad (1.100)$$

las funciones  $\phi_1(\delta)$ ,  $\phi_2(\delta)$ ,  $\xi(Z)$  y  $\tilde{f}_c(E, Z)$  tienen las mismas definiciones que las del proceso de producción de pares (veáse la sección 1.2.1, y  $A'(E, Z)$  es el factor de corrección empírico. Para mezclas y compuestos la sección eficaz puede se aproximada en la misma forma que con los reemplazos de la ecuación 1.10 de la sección 1.2.1.

También, son de relevancia para la simulación de historia condensada los momentos  $M_m$ , definidos por:

$$M_m(E, Z; k_{\min} k_{\max}) \equiv \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} dk k^m \frac{d\sigma_{brem}(E, Z)}{dk} \quad (1.101)$$

$M_0(E, Z; k_c, T)$  es la sección eficaz total para interacciones bremsstrahlung de un electrón con energía  $E$  (energía cinética  $T = E - m$ ) en un medio  $Z$  que produce fotones con energía arriba de la energía umbral  $k_c$ . Esta sección eficaz se requiere para muestrear las distancias entre los subsecuentes eventos radiativos catastróficos.  $M_1(E, Z; 0, T)$ , multiplicado con la densidad de los centros de dispersión (átomos o moléculas),  $n$ , pérdida promedio de energía a radiación por unidad de longitud de camino, esto es, el poder de frenado radiativo.  $M_1(E, Z; 0, T)n$  es entonces el poder de frenado radiativo restringido correspondiente a  $k_c$ . Con estas definiciones en lugar, se puede regresar a la discusión de factor de corrección empírico  $A'(E, Z)$ . En la implementación original del EGS4  $A'(E, Z)$  está basado en los datos provistos en el artículo por Koch y Motz [29]. En la referencia [33] se da un factor de corrección  $A'(E, Z)$  basado en los poderes de frenado radiativo ICRU-37 que fue implementado dentro del EGS4 en el paquete de preparación de datos PEGS4, este está definido por:

$$A'(E, Z) = \frac{M_1(E, Z; 0, T)}{M_1^{NIST}(E, Z; 0, T)} \quad (1.102)$$

donde  $M_1^{NIST}$  está definido en la misma forma que la ecuación 1.101 pero la sección eficaz es substituida con la sección eficaz bremsstrahlung NIST. El sistema EGSnrc, ha heredado el uso del paquete PEGS4, y tiene ambas opciones disponibles. La selección se hace por medio del parámetro `IAPRIM` cuando se generan los datos de PEGS4, con `IAPRIM=0` le corresponde el método original de  $A'$ , con `IAPRIM=1` se hace la aproximación de la referencia [33]. La tercera opción disponible en el sistema EGSnrc corresponde al uso directo de las secciones eficaces NIST, esto se lleva a cabo haciendo `ibr_nist=1`. El resultado de hacer esto es:

1. La sección eficaz total discreta bremsstrahlung se calculó usando la cuadratura Gauss-Legendre de 64 puntos en la subrutina `init_nist_brems` y los coeficientes de interpolación de sección eficaz vienen de modificar el conjunto de datos PEGS4 apropiadamente.

2. Se preparan tablas de los diferenciales de sección eficaz NIST en la emisión del fotón de energía  $k$  (los cuales están disponibles solamente en forma numérica). Entonces, estas tablas se usan en la ejecución para muestrear la energía del fotón.
3. La contribución de los procesos bremsstrahlung sub-umbrales al poder de frenado restringido no es corregido. Esto introduce una pequeña inconsistencia en el tratamiento del proceso bremsstrahlung la cual es irrelevante si  $k_c \ll T$  o si el poder de frenado radiativo restringido es pequeño comparado con el poder de frenado de colisión restringido o ambos.

#### 1.4.2.2. Simulación de eventos discretos bremsstrahlung, energía del fotón

En el curso de la construcción del sistema EGSnrc se encontró un error en las rutinas de muestreo dentro del algoritmo de muestreo usado en el sistema EGS4. El error, que probablemente no fue descubierto antes, puesto que solo se mostraba si la energía incidente del electrón no es mucho más grande que la energía umbral  $k_c$ , se muestra en la figura 4. Esta figura compara la distribución muestreada por la rutina BREMS para electrones de 100 keV en aluminio, expresada en términos de  $x$ , esto es:

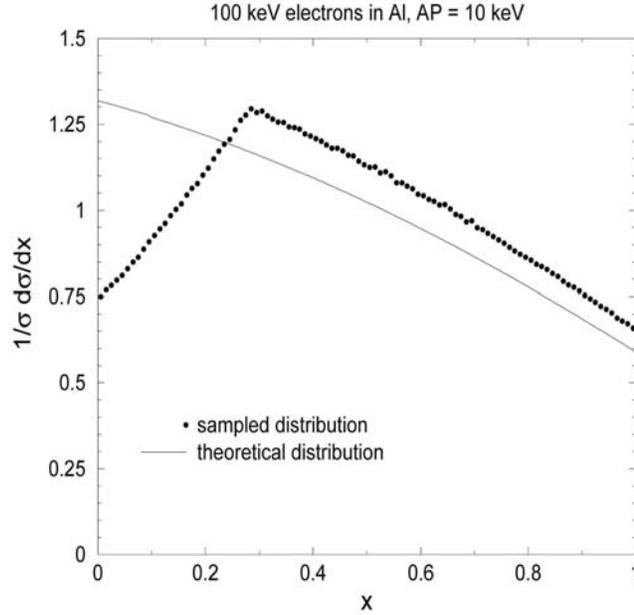
$$x = \frac{\ln k/k_c}{\ln T/k_c} \quad (1.103)$$

comparada al resultado teórico esperado. La energía umbral  $k_c$  fue de 10 keV ( $k_c$  es llamado AP en EGS4 y en EGSnrc). Este hallazgo fue suficiente motivo para recodificar completamente la rutina BREMS.

Un algoritmo más eficiente para el muestreo de las energías de los fotones en base de la ecuación 1.99 se muestra a continuación: después de un cambio de variables de  $k$  a  $x$ , se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{brem}(E, Z)}{dk} &= \left\{ \left(1 + \frac{E'^2}{E^2}\right) \left[ \phi_1(\delta) - \frac{4}{3} \ln Z - 4\tilde{f}_c(E, Z) \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{2}{3} \frac{E'}{E} \left[ \phi_2(\delta) - \frac{4}{3} \ln Z - 4\tilde{f}_c(E, Z) \right] \right\} \quad (1.104) \end{aligned}$$

Figura 4: Distribución de las energías del fotón muestreadas por la rutina BREMS (puntos) para electrones de 100 keV en aluminio, expresadas en términos de  $x$ , definidas en la ecuación 1.103, comparada con la expectativa teórica



En lo que sigue la expresión en llaves de la ecuación 1.104 se denotará como  $R$ , es la cantidad  $k d\sigma_{\text{brem}}/dk/Z^2$  que se muestra como una línea delgada en la figura 4. Como puede verse está es relativamente plana y puede ser empleada como función de rechazo junto con un muestreo uniforme de  $x$ .  $R$  conserva su máximo absoluto,  $R_{\text{máx}}$ , para  $k = 0$ ; está dado por:

$$R_{\text{máx}} = 28,381 - \text{frac}43Z_V \quad (1.105)$$

donde  $Z_V$  está definido en la ecuación 1.10 en la sección 1.2.1 y se ha hecho uso de la ecuación 1.8 para las funciones  $\phi_1(\delta)$  y  $\phi_2(\delta)$ . El algoritmo es el siguiente:

1. Se calcula  $b = \ln T/k_c$ .
2. Se eligen dos números al azar,  $r_1$  y  $r_2$ .
3. Se hace  $k = k_c \exp(r_1 b)$ , y se calcula  $R/R_{\text{máx}}$ .
4. Si  $r_2 > R/R_{\text{máx}}$ , regresar al paso 2.

5. Se libera  $k$

### 1.4.2.3. Simulación de eventos discretos bremsstrahlung, distribución angular

En la implementación original EGS4, el ángulo polar de la emisión bremsstrahlung con respecto a la dirección inicial del electrón estaba fijo y dado por  $m/E$ . En la referencia [11] se da un esquema mejorado de la selección del ángulo basado en la ecuación 2BS del artículo por Koch y Motz [29] e implementada en el EGS4. Esta implementación fue adoptada en EGSnrc con pequeñas modificaciones.

La ecuación 2BS, que es la sección eficaz bremsstrahlung, diferencial en la energía del fotón  $k$  y el ángulo de emisión del fotón  $\theta$ , es [29]:

$$d\sigma_{\text{brem}} = 4\alpha Z^2 r_0^2 \frac{dk}{k} \frac{ydy}{(y^2+1)^2} \left\{ \frac{16y^2r}{(y^2+1)^2} - (1+r)^2 + \left[ 1+r^2 - \frac{4y^2r}{(y^2+1)^2} \right] \ln M(y) \right\}$$

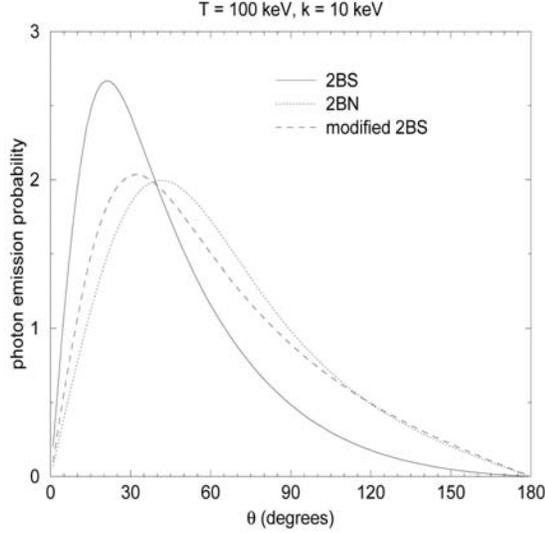
$$r = \frac{E'}{E}, \quad y = \frac{E}{m}\theta, \quad \frac{1}{M(y)} = \Delta^2 + \left( \frac{Z^{1/3}}{111(y^2+1)} \right)^2 \quad (1.106)$$

donde se aplican todas las definiciones que siguen de la ecuación 1.99. La ecuación 1.106 es el resultado de una aproximación extrema relativista, en la primera aproximación de Born y de ángulo pequeño, pero incluye una corrección de pantalla basada en el potencial de Thomas-Fermi. El efecto de pantalla del núcleo por los electrones atómicos está contenido en la expresión dentro de paréntesis en  $1/M(Y)$ . Esto puede ser verificado fácilmente al comparar la ecuación 1.106 con la ecuación 2BN(a) del artículo de Koch y Motz la cual es derivada con la misma aproximación pero usando un potencial nuclear desnudo. Para investigar el rendimiento de la ecuación 1.106 con electrones incidentes de baja energía, se puede comparar la fórmula 2BN del artículo de Koch y Motz que es para un núcleo desnudo pero sin envolver las aproximaciones extrema relativista y de ángulo pequeño. Para una comparación justa, las correcciones de pantalla deben ser insignificantes, esté es el caso si:

$$\Delta^2 \gg \left( \frac{Z^{1/3}}{111(y^2+1)} \right)^2 \quad \text{o} \quad \frac{km}{E^2} \gg \frac{2Z^{2/3}}{111^2} \quad (1.107)$$

una condición que se satisface para un amplio rango de combinaciones de energía de fotón/electrón. La figura 5 muestra un resultado típico de dicha comparación.

Figura 5: Distribución angular para la emisión de fotones bremsstrahlung de 10 keV por electrones de 100 keV en aluminio. La línea sólida representa la ecuación 2BS del artículo de Koch y Motz (ecuación 1.106 en este trabajo), la línea punteada la ecuación 2BN de Koch y Motz, la línea truncada es la ecuación 2BS con las modificaciones discutidas en el texto.



La modificación a 2BS que se ha tomado, se muestra como una línea truncada y obviamente está en mejor acuerdo con la fórmula 2BN, es bastante simple y permite que muchas de las consideraciones de la referencia [11] sean aplicadas en el procedimiento de muestreo. El término principal de la distribución 2BN es  $(1 - \beta \cos \theta)^{-2}$  donde  $\beta$  es la velocidad del electrón en unidad de velocidad de la luz. Aproximado para pequeños ángulos y altas energías es equivalente al término principal de 2BS,  $(y^2 + 1)^{-2}$ , aparte de una constante de normalización:

$$\begin{aligned}
 (1 - \beta \cos \theta)^{-2} &\approx \left[ 1 - \beta \left( 1 - \frac{\theta^2}{2} \right) \right]^2 = (1 - \beta)^2 \left[ 1 + \theta^2 \frac{\beta}{1 - \beta} \right]^2 \\
 &= (1 - \beta)^2 \left( 1 + \beta(1 + \beta) \theta^2 \frac{E}{m} \right)^2 \approx (1 - \beta)^2 (1 + y^2)^2 \quad (1.108)
 \end{aligned}$$

Usando:

$$y^2 = \beta(1 + \beta) \frac{E^2}{m^2} (1 - \cos \theta) \quad (1.109)$$

en la ecuación 1.106 y aplicando de manera distinta los resultados de la referencia [11] el algoritmo de muestreo queda como sigue:

1. Se cálcula el máximo de la función dentro de llaves (a ser denotada  $f(y)$ ),  $f_{\text{máx}}$ , la cual se obtiene para  $y^2 = 0$ ,  $y^2 = 1$  o  $y^2 = y_{\text{máx}}^2 \equiv 2\beta(1 + \beta)(E/m)^2$  para los  $E$  y  $k$  actuales.
2. Se eligen dos números al azar  $r_1$  y  $r_2$ .
3. Se muestrea  $y^2$  de  $ydy/(1 + y^2)^2$  usando:

$$y^2 = \frac{r_1 y_{\text{máx}}^2}{1 + y_{\text{máx}}^2 (1 - r_1)} \quad (1.110)$$

4. Si  $r_2 > f(y)/f_{\text{máx}}$  ir al paso 2.
5. Se libera  $\cos \theta$ ,

$$\cos \theta = 1 - \frac{y^2 m^2}{\beta(1 + \beta) E^2} = 1 - \frac{y}{2y_{\text{máx}}^2} \quad (1.111)$$

La eficiencia de esté algoritmo es cercana a la unidad para bajas energías y decrece logarítmicamente con el incremento de la energía. Además, requiere de varias evaluaciones logarítmicas (3 en el paso 1, 1 por cada repetición del paso 4) y por consiguiente es bastante lento. Se ha implementado un segundo esquema de selección de ángulo bremsstrahlung que usa solamente el término principal de la distribución angular y puede ser seleccionado por el usuario al hacer cero el parámetro `IBRDST` en `COMMON/BREMPR/` (el valor por defecto de `IBRDST` es 1).

#### 1.4.2.4. Partición radiativa

Si se activa la opción de partición radiativa (`nbr_split > 1`), el resultado de un evento bremsstrahlung será fotones `nbr_split`, cada uno teniendo la fracción `1/nbr_split` del peso del electrón, y un electron con una energía dada por su energía inicial menos la energía del último fotón bremsstrahlung producido. Notése que esto viola la conservación de la energía en una base de evento por evento, la energía es conservada solamente en promedio. La motivación para incluir la técnica de partición bremsstrahlung fue que las varias cantidades, necesarias para el muestreo de la energía del fotón, ángulos de emisión, y rotaciones asociadas, pueden ser calculadas una sola vez y reusadas `nbr_split` veces.

Vale la pena notar que si `nbr_split` se pone en cero, el evento bremsstrahlung será pasado por alto. Esto da la posibilidad de estudiar, por ejemplo, la influencia de despreciar la producción bremsstrahlung en cantidades calculadas, lo que debería ser útil para alguien.

### 1.4.3. Colisiones inelásticas discretas

En su estado actual, los efectos de ligadura no se tienen en cuenta en el tratamiento de la dispersión inelástica de electrones y positrones con electrones atómicos en el sistema EGSnrc. Namito y otros [7] han implementado varias secciones eficaces de impacto de ionización de electrones para uso en EGS4. Se han estudiado sus aproximaciones pero se ha decidido posponer la inclusión de los efectos de ligadura hasta que esté disponible un tratamiento más general que pueda ser aplicado fácilmente a las colisiones catastróficas y colisiones inelásticas.

Cuando se ignoran las ligaduras de los electrones atómicos, la dispersión electrón-electrón puede ser descrita por la sección eficaz de Møller y la dispersión positrón-electrón por la sección eficaz de Bhabha.

#### 1.4.3.1. Dispersión Møller

La sección eficaz de Møller, que es el diferencial de la sección eficaz para la dispersión electrón-electrón, con respecto a la energía cinética  $T'$  del electrón dispersado que está inicialmente en reposo, es [32]:

$$\frac{d\sigma_{inel}^-}{dT'} = \frac{2\pi r_0^2 m}{\beta^2} \frac{1}{T'^2} \left[ 1 + \frac{T'^2}{(T - T')^2} + \frac{\tau^2}{(\tau + 1)^2} \left( \frac{T'}{T} \right)^2 - \frac{2\tau + 1}{(\tau + 1)^2} \frac{T'}{T - T'} \right] \quad (1.112)$$

donde  $\beta$  es la velocidad del electrón incidente en unidades de la velocidad de la luz,  $T$  es la energía cinética incidente y  $\tau = T/m$ . Puesto que los dos electrones son indistinguibles, la ecuación 1.112 es simétrica respecto al intercambio de energía de las dos partículas dispersadas. Por definición, el electrón con más alta energía después de la colisión se considera el primario, por lo que la sección eficaz total para interacciones Møller se obtiene por medio de la integración de la ecuación 1.112 desde  $T_c$  hasta  $T/2$ :

$$\sigma_{inel}^- = \int_{T_c}^{T/2} \frac{d\sigma_{inel}^-}{dT'} dT' \quad (1.113)$$

En los sistemas EGS4 y EGSnrc,  $T_c$  es conocido como TE y la energía total correspondiente AE. La energía cinética umbral arriba de la cual pueden ocurrir los eventos Møller es obviamente  $2T_c$ . La integración de la ecuación 1.113 se evalúa en PEGS con la función AMOLTM.

Para muestrear la energía del electrón dispersado en base de la ecuación 1.112, se hace el siguiente cambio de variables,  $\varepsilon = T'/T$ , la cual puede tomar valores entre  $\varepsilon_0 = T_c/T$  y  $1/2$ , y después de hacer el re-arreglo se obtiene [9]:

$$\frac{d\sigma_{inel}^-}{d\varepsilon} = C \left( \frac{\varepsilon_0}{1 - 2\varepsilon_0 \varepsilon^2} \right) g(\varepsilon) \quad (1.114)$$

donde  $C$  es una constante irrelevante para el algoritmo de muestreo, la expresión entre paréntesis es una PDF normalizada para  $\varepsilon$ , y  $g(\varepsilon)$  será usada como función de rechazo. La función de rechazo es:

$$g(\varepsilon) = \frac{1 + g_2 \varepsilon^2 + r(r - g_3)}{g_{\text{máx}}} \quad (1.115)$$

$$g_{\text{máx}} = 1 + \frac{5}{4}g_2, \quad g_2 = \frac{\tau^2}{(\tau + 1)^2}, \quad g_3 = \frac{2\tau + 1}{(\tau + 1)^2}, \quad r = \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon}$$

El algoritmo para muestrear  $\varepsilon$  es entonces el siguiente:

1. Se calculan las cantidades que dependen solamente de  $T$ , esto es:

$$\tau, g_2, g_3, g_{\text{máx}}$$

2. Se eligen dos números al azar,  $r_1$  y  $r_2$ .
3. Se muestrea  $\varepsilon$  de la expresión en paréntesis de la ecuación 1.114 usando:

$$\varepsilon = \frac{T_c}{T + (T - 2T_c)r_1} \quad (1.116)$$

4. Se calcula  $g(\varepsilon)$ , si  $r_2 > g(\varepsilon)$  ir al paso 2
5. Se libera  $\varepsilon$ .

La eficiencia de este algoritmo es cercana a la unidad para bajas energías incidentes  $T$ , pero, tiende a  $4/9$  a altas energías. Una mejor aproximación sería la siguiente: se reescribe la ecuación 1.113 como:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{inel}^-}{dT'} &= \frac{2\pi r_0^2 m}{\beta^2} [F(T') + F(T - T')] \\ F(T') &= \frac{1}{T'^2} + \frac{1}{2(T + m)^2} - \frac{2\tau + 1}{(\tau + 1)^2} \frac{1}{TT'} \end{aligned} \quad (1.117)$$

Si ahora se extiende el rango de  $T'$  a  $T - T_c$ , se puede obviar  $F(T - T')$ , y muestrear  $T'$  de  $F(T')$  solamente. Al final  $T'$  se hará  $\min(T', T - T')$ . Hay varias posibilidades para muestrear  $T'$  de  $F(T')$ . Por ejemplo, se puede usar a  $1/T'^2$  como una PDF y

$$g'(T') = \frac{1}{g'_{\max}} \left( 1 + \frac{T'^2}{2(T + m)^2} - \frac{2\tau + 1}{(\tau + 1)^2} \frac{T'}{T} \right) \quad (1.118)$$

como función de rechazo. Aquí:

$$g'_{\max} = \begin{cases} 1 & , \text{ si } \tau \leq 2 + \sqrt{6} \\ \frac{3\tau^2}{2(\tau+1)^2} & , \text{ para lo demás} \end{cases} \quad (1.119)$$

La eficiencia de este algoritmo es  $2/3$  a altas energías y por consiguiente 1.5 veces mejor que el usado en EGS4 y EGSnrc.

Los ángulos de dispersión polar  $\theta$  y  $\theta'$  en los eventos Møller están determinados únicamente por su cinemática. Estos están dados por:

$$\begin{aligned} \cos \theta &= \sqrt{\frac{T - T'}{T} \frac{T + 2m}{T - T' + 2m}} \\ \cos \theta' &= \sqrt{\frac{T' T + 2m}{T T' + 2m}} \end{aligned} \quad (1.120)$$

Los ángulos azimutales son opuestos y se muestrean uniformemente entre cero y  $2\pi$ .

### 1.4.3.2. Dispersión Bhabha

La sección eficaz Bhabha, que es el diferencial de sección eficaz para la dispersión positrón-electrón, respecto a la energía cinética  $T'$  del electrón dispersado que está inicialmente en reposo, está dada por [9]:

$$\frac{d\sigma_{inel}^+}{dT'} = \frac{2\pi r_0^2 m}{T^2} \left[ \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{1}{\varepsilon\beta^2} - B_1 \right) + B_2 + \varepsilon (\varepsilon B_4 - B_3) \right] \quad (1.121)$$

donde  $T$  es la energía cinética del positrón incidente y se aplican las siguientes definiciones:

$$\varepsilon = \frac{T'}{T}, \quad \tau = \frac{T}{m}, \quad y = \frac{1}{\tau + 2}, \quad \beta^2 = \frac{\tau(\tau + 2)}{(\tau + 1)^2}, \quad B_1 = 2 - y^2$$

$$B_2 = (1 - 2y)(3 + y^2), \quad B_3 = B_4 + (1 - 2y)^2, \quad B_4 = (1 - 2y)^3 \quad (1.122)$$

El posible rango de valores para  $T'$  va desde  $T_c$  hasta  $T$  (esto es, el positrón puede tener una energía menor que  $T_c$  después de una dispersión Bhaba). La sección eficaz total de Bhabha se obtiene al integrar la ecuación 1.121 en el rango permitido, así:

$$\sigma_{inel}^+ = \int_{T_c}^T dT' \frac{d\sigma_{inel}^+}{dT'} \quad (1.123)$$

La sección eficaz total discreta de Bhaba se evalúa en PEGS con la función **BHABTM**.

El método empleado para muestrear las energías de eletron dispersado en base de la ecuación 1.121 es similar al método en Møller. La fracción de energía  $\varepsilon$  se muestrea desde  $1/\varepsilon^2$ , la función de rechazo  $g(\varepsilon)$  es:

$$g(\varepsilon) = 1 - \beta^2 \varepsilon (B_1 - \varepsilon (B_2 - \varepsilon (B_3 - \varepsilon B_4))) \quad (1.124)$$

Los ángulos de dispersión polar Bhabha estan dados por la ecuación 1.133.

#### 1.4.4. Aniquilación fotón/positrón-electrón

El diferencial de sección eficaz de un positrón incidente con energía total  $E$ , respecto a la energía  $k$  de un fotón de aniquilación es [9]

$$\frac{d\sigma_{annih}}{dk} = \frac{\pi r_0^2}{\tau(\tau + 2)} [S_1(\kappa) + S_1(\tau + 2 - \kappa)] \quad (1.125)$$

donde  $\tau$  y  $\kappa$  son la energía cinética del positrón y la energía del fotón, respectivamente, en unidades de  $m$  y:

$$S_1(x) = \frac{1}{x} \left( \tau + 2 + 2 \frac{\tau + 1}{\tau + 2} - \frac{1}{x} \right) - 1 \quad (1.126)$$

La ecuación 1.125 es simétrica respecto al intercambio de energía de los fotones de aniquilación, el segundo fotón tiene una energía  $E + m - k$ .

Los ángulos polares de emisión de los fotones de aniquilación están determinados únicamente por su cinemática y están dados por [9]:

$$k = \frac{m}{1 - a \cos \theta}, \quad a = \sqrt{\frac{\tau}{\tau + 2}} \quad (1.127)$$

por lo que las energía máxima y mínima posibles del fotón son:

$$k_{\text{mín}} = \frac{m}{1 + a}, \quad k_{\text{máx}} = \frac{m}{1 - a} \quad (1.128)$$

La sección eficaz total de aniquilación se obtiene al integrar la ecuación 1.125 sobre el rango permitido de  $k$  y puede escribirse como:

$$\sigma_{\text{annih}} = \frac{\pi r_0^2}{\tau + 2} \left[ \frac{\tau^2 + 5\tau + 6}{\tau(\tau + 2)} + \ln \left( \tau + 1 + \sqrt{\tau(\tau + 2)} \right) - \frac{\tau + 4}{\sqrt{\tau(\tau + 2)}} \right] \quad (1.129)$$

A altas energías ( $\tau \geq 1$ ),  $\sigma_{\text{annih}}$  decrece a razón de  $(\ln \tau)/\tau$ , para  $\tau \rightarrow 0$  la sección eficaz tiende a infinito (esto es, los positrones son aniquilados siempre en reposo si no han sido aniquilados antes).

El proceso de aniquilación es un proceso catastrófico y es tratado discretamente.

Para muestrear la energía de uno de los fotones de la ecuación 1.125, se hace un cambio de variables  $\varepsilon = \kappa/(\tau + 2)$ , se obvia la segunda  $S_1$  debido a su simetría, y después de reorganizar se obtiene:

$$\frac{d\sigma_{\text{annih}}}{d\varepsilon} = C f(\varepsilon) g(\varepsilon) \quad (1.130)$$

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\ln[(1 - \varepsilon_0)/\varepsilon_0]} \frac{1}{\varepsilon}, \quad g(\varepsilon) = 1 - \frac{[\varepsilon(\tau + 2) - 1]^2}{\varepsilon(\tau^2 + 4\tau + 2)} \quad (1.131)$$

donde  $C$  es una constante que contiene factores irrelevantes para el procedimiento de muestreo y  $\varepsilon_0$  el valor mínimo posible de  $\varepsilon$  es:

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{(\tau + 2)(1 + a)} \quad (1.132)$$

La función  $f(\varepsilon)$  es una PDF normalizada,  $g(\varepsilon)$  es siempre positiva y tiene un máximo de 1 para  $\varepsilon = 1/(\tau + 2)$  es una función de rechazo válida. El algoritmo de muestreo es el siguiente:

1. Se calculan las cantidades dependientes de  $E$ , a saber:

$$\tau, A = \tau + 2, a, \varepsilon_0, b = \ln \frac{1 - \varepsilon_0}{\varepsilon_0}$$

2. Se eligen dos números al azar,  $r_1$  y  $r_2$ .

3. Se hace:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \exp(r_1 b) \tag{1.133}$$

4. Si  $r_2 > g(\varepsilon)$ , ir al paso 2

5. Se libera  $\varepsilon$ .

Si los positrones no se aniquilan en vuelo, lo harán en reposo produciendo dos fotones. Como se puede verificar de las ecuaciones 1.127 y 1.128, la energía del fotón tiende a  $m$  cuando  $\tau$  tiende a cero. Además, el diferencial de sección eficaz en el ángulo de emisión del fotón se hace uniforme en el límite cuando  $\tau \rightarrow 0$ .

Si se hace `nbr_split`  $> 1$ , el proceso de aniquilación producirá 2 fotones `nbr_split`, cada uno portando una fracción  $1/\text{nbr\_split}$  del peso del positrón. La producción simultánea de eventos de aniquilación `nbr_split` permite que la cantidad  $b$  además del parámetro relacionado con las rotaciones angulares sea usado `nbr_split` veces.

#### 1.4.5. Poder de frenado de colisiones

El sistema EGSnrc heredó el tratamiento de los poderes de frenado de colisiones restringido del sistema EGS4, es decir, usa las fórmulas recomendadas por Seltzer y Berger [34] las cuales están basadas en la teoría de Bethe-Bloch [35, 36, 37]. El tratamiento estándar asume que hay cierto valor para transferir energía a los electrones atómicos,  $T_{med}$ , que es (i) grande comparada con las energías de ligadura, (ii) corresponde al parámetro de impacto que es grande comparado con las dimensiones atómicas.

Los procesos de colisión que están asociados con pérdidas de energía  $T'$  menores que  $T_{med}$  son tratados de acuerdo a la teoría de Bethe, de la cuál el resultado principal es:

$$L_{coll}^{\pm}(T, T' < T_{med}) = \frac{2\pi r_0^2 mn}{\beta^2} \left[ \ln \left( \frac{2m\beta^2 T_{med}}{(1-\beta^2) I^2} \right) - \beta^2 - \delta \right] \quad (1.134)$$

donde  $\beta$  es de nuevo la velocidad del electrón en unidades de la velocidad de la luz,  $I$  es la energía de ionización media y  $\delta$  es la corrección de efecto de densidad que toma en cuenta la polarización del medio debida al campo de electrones. Como  $T_{med}$  se define grande comparado con las energías de ligadura del átomo, los procesos de colisión con transferencia de energía más grande que  $T_{med}$  pueden ser tratados usando las secciones eficaces de Møller (electrones) o de Bhabha (positrones) (veáse la sección 1.4.3), esto es:

$$L_{coll}^{\pm}(T, T' > T_{med}) = \int_{T_{med}}^{T_c} dT' T' \frac{d\sigma_{inel}^{\pm}}{dT'} \quad (1.135)$$

Usando algunas aproximaciones adicionales, se puede obviar a  $T_{med}$  de la suma de  $L_{coll}^{\pm}(T, T' < T_{med})$  y  $L_{coll}^{\pm}(T, T' > T_{med})$  y se obtiene:

$$L_{coll}^{\pm}(T, T_c) = \frac{2\pi r_0^2 mn}{\beta^2} \left[ \ln \frac{T^2}{T} + \ln(1 + \tau/2) + G^{\pm}(\tau) - \delta \right] \quad (1.136)$$

En la ecuación anterior,  $\tau = T/m$  y la función  $G^{\pm}$  es distinta par electrones y positrones debida a diferencias en las secciones eficaces de Møller y de Bhaba y están dadas por:

$$\begin{aligned} G^{-}(\tau) &= -1 - \beta^2 + \ln[\eta(1-\eta)] + \frac{1}{1-\eta} \\ &\quad + (1-\beta^2) \left[ \frac{\tau^2 \eta^2}{2} + (2\tau+1) \ln(1-\eta) \right] \\ G^{+}(\tau) &= \ln(4\eta) - \beta^2 \left[ 1 + (2-y^2)\eta - (3+y^2) \frac{y\tau}{2} \eta^2 \right. \\ &\quad \left. + (1+y\tau) \frac{y^2 \tau^2}{3} \eta^3 - \frac{y^3 \tau^3}{4} \eta^4 \right] \end{aligned} \quad (1.137)$$

donde  $\eta = T_c/T$  y  $y$  está definida en la ecuación 1.121.

De la discusión anterior y de la discusión general de la implementación de historia condensada de Clase II en la sección 1.4.1 es claro que el formalismo usado para tratar las colisiones inelásticas con electrones atómicos es aplicable solamente si:

$$T_c \gg \text{las energías de ligadura del medio de interés} \quad (1.138)$$

Esto impone una limitación bastante severa en el uso de códigos de historia condensada Clase II para materiales con  $Z$  grande.

### 1.4.6. Secciones eficaces de dispersión elástica

El tratamiento de dispersión elástica para electrones y positrones en el sistema EGSnrc está determinado por el parámetro lógico `SPIN_EFFECTS` que está en `COMMON/ET_CONTROL`. Si se hace `.true.` (la opción por defecto) se emplean las secciones eficaces de dispersión elástica que toman en cuenta los efectos de spin, estos son discutidos en la sección 1.4.6.2. Si se pone en `.false.` se emplean las secciones eficaces basadas en la sección eficaz de pantalla de Rutherford.

#### 1.4.6.1. Dispersión elástica de pantalla de Rutherford

La sección eficaz de pantalla de Rutherford, que es el diferencial de sección eficaz respecto del coseno de  $\mu$  del ángulo de dispersión polar de los electrones o positrones incidentes en átomos de número atómico  $Z$ , es:

$$\frac{d\sigma_{SR}}{d\mu} = \frac{2\pi r_0^2 Z^2}{\beta^2 \tau (\tau + 2)} \frac{1}{(1 - \mu + 2\eta)^2} \quad (1.139)$$

donde  $\beta$  es la velocidad de la partícula en unidades de la velocidad de la luz,  $\tau$  la energía cinética  $T$  en unidades de  $m$  y  $\eta$  el parámetro de pantalla. La sección eficaz total de dispersión elástica se obtiene de la ecuación 1.139 al integrar sobre  $\mu$  de -1 a 1 y está dado por:

$$\sigma_{SR} = \frac{\pi r_0^2 Z^2}{\beta^2 \tau (\tau + 2) \eta (\eta + 1)} \quad (1.140)$$

En el sistema EGS4 el parámetro  $\eta$  está basado en la teoría de Molière de dispersión elástica simple [39]. Molière desarrolló un análisis parcial de onda (PWA) de la ecuación de Klein-Gordon (esto es, despreciando los efectos de spin) en el campo nuclear descrito por el potencial de Thomas-Fermi, usando una aproximación de pequeño ángulo. (esto es, reemplazo los polinomios de Legendre por la función de Bessel de orden cero  $J_0$ ), y empleo una expansión WKB de la ecuación radial resultante hasta el orden cero en  $\hbar$  para calcular los desplazamientos de fase  $\phi(z)$  para llegar a:

$$\frac{d\sigma_M}{\chi d\chi} = 2\pi a^2 \left| \int_0^\infty dz z J_0 \left( z \frac{\chi}{2\sqrt{\eta_0}} \right) [\exp(-2i\alpha'\phi(z)) - 1] \right|^2 \quad (1.141)$$

donde  $\chi$  es el ángulo de dispersión,  $a$  es el radio de Thomas-Fermi,  $\eta_0$  está definido en la ecuación 1.143 y  $\alpha'$  está dado por:

$$\alpha' = \frac{\alpha Z}{\beta} \quad (1.142)$$

( $\alpha \approx 1/137$ ) de la constante de estructura fina. Además Molière aproximó el potencial de Thomas-Fermi por la suma de las tres funciones exponenciales en cuyo caso los desplazamientos de fase  $\phi(z)$  están dados por las funciones de Bessel modificadas de orden cero.

Molière requirió que el promedio del cuadrado del ángulo de dispersión, calculado de una sección eficaz de pantalla de Rutherford, fuera el mismo que el cuadrado del ángulo de dispersión resultante de la ecuación 1.141 y, después de estudiar los casos límites  $\alpha' \rightarrow 0$  y  $\alpha' \rightarrow \infty$  llegó a la fórmula simple siguiente:

$$\eta = \eta_0 (1,13 + 3,67\alpha'^2), \quad \eta_0 = \frac{\alpha^2 Z^{2/3}}{4C_{TF}^2 \tau (\tau + 2)}, \quad C_{TF} = \left( \frac{9\pi^2}{128} \right)^{1/3} \quad (1.143)$$

para el parámetro de pantalla efectivo  $\eta$ .

El tratamiento de la dispersión elástica en el sistema EGS4 está intrínsecamente asociado con la teoría de dispersión múltiple de Molière [38].

En su tratamiento de la dispersión múltiple, Molière, usa la aproximación de pequeño ángulo en cuyo caso los momentos de la sección eficaz de pantalla de Rutherford, están dados por las funciones de Bessel modificadas de primer orden  $K_1$  (veáse la sección 1.4.7). Además, se realiza una expansión pequeña a  $K_1$  por lo que la sección eficaz de dispersión elástica para compuestos y mezclas puede ser expresada con dos parámetros,  $b_c$  y  $\chi_{cc}$ , como sigue:

$$b_c = \frac{4\pi r_0^2 C_{TF}^2 \rho}{1,13\alpha^2 u} \frac{Z_S \exp(Z_E/Z_S)}{A \exp(Z_X/Z_S)} = 7821,6 \text{cm}^2/\text{g}\rho \frac{Z_S \exp(Z_E/Z_S)}{A \exp(Z_X/Z_S)}$$

$$\chi_{cc}^2 = \frac{4\pi r_0^2 m^2}{u} \rho \frac{Z_S}{A} = 0,1569 \text{cm}^2 \text{MeV}^2/\text{g}\rho \frac{Z_S}{A} \quad (1.144)$$

donde  $A$  es la masa molecular relativa y:

$$Z_S = \sum p_i Z_i (Z_i + \xi_{MS})$$

$$Z_E = \sum p_i Z_i (Z_i + \xi_{MS}) \ln Z_i^{-2/3}$$

$$Z_X = \sum p_i Z_i (Z_i + \xi_{MS}) \ln (1 + 3,34\alpha^2 Z_i^2) \quad (1.145)$$

El propósito del parámetro  $\xi_{MS}$  es tomar en cuenta las contribuciones de las dispersiones inelásticas sub-umbral con los electrones atómicos. El macro **\$FUDGEMS** en PEGS4 se usa para  $\xi_{MS}$  con la intención de proveer al usuario de con la posibilidad de implementar un tratamiento más real de las contribuciones inelásticas sub-umbral. En términos de los parámetros  $b_c$  y  $\chi_{cc}$  el parámetro de pantalla es:

$$\eta = \frac{\chi_{cc}^2}{4b_c m^2 \tau (\tau + 2)} \quad (1.146)$$

y la sección eficaz total macroscópica es:

$$\sum_{SR} = \frac{b_c}{\beta^2} \quad (1.147)$$

El muestreo de las deflecciones angulares en eventos de dispersión simple elástica en base de la ecuación 1.139, es consumado por:

$$\mu = 1 - \frac{2\eta r}{1 - r + \eta} \quad (1.148)$$

donde  $r$  denota un número al azar entre 0 y 1, las deflecciones de dispersión elástica simple son necesarias cuando se modela exactamente el cruce de fronteras entre diferentes medios.

### 1.4.6.2. Dispersión elástica con spin

Potencialmente, las secciones eficaces de dispersión elástica más precisas son aquellas que se obtienen de la solución PWA de la ecuación de Dirac para un campo nuclear apantallado por electrones atómicos. La expresión general para la sección eficaz, derivada por Mott, está dada por:

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma_{\text{PWA}}}{d\Omega} &= \frac{r_0^2}{4\alpha^2\tau(\tau+2)} [ |f|^2 + |g|^2 ] \\ f &= \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ (l+1) [e^{2i\phi_l} - 1] + l [e^{2i\phi_{-l-1}} - 1] \right\} P_l(\mu) \\ g &= \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ e^{2i\phi_{-l-1}} - e^{2i\phi_l} \right\} P_l^1(\mu)\end{aligned}\tag{1.149}$$

donde se aplican las definiciones para  $\tau$  y  $\alpha$  de la sección previa,  $P_l$  y  $P_l^m$  son los polinomios asociados de Legendre y  $\phi_l$  denota el corrimiento de fase. Estos se obtienen de la solución asintótica de la siguiente ecuación:

$$\frac{d^2 F_l}{dr^2} + \left[ pr + \frac{l(l+1)}{r^2} - U_l \right] F_l = 0\tag{1.150}$$

En la ecuación anterior, se ha escrito en la siguiente forma  $F_l(r \rightarrow \infty) = \sin(pr - l\pi/2 + \phi_l)$ . Aquí,  $p = \sqrt{\tau(\tau+2)}$  es el momento del electrón en unidades de  $m/c$  y la estructura de carga nuclear y /o atómica está contenida en el potencial efectivo de Dirac,  $U_l$ :

$$\begin{aligned}U_l &= 2(\tau+1)V - V^2 - \frac{l+1}{r^2} \frac{D'}{D} + \frac{3}{4} \frac{D'^2}{D^2} - \frac{1}{2} \frac{D''}{D} \\ D &= D = \tau + 2 - V, \quad D' = \frac{dD}{dr}, \quad D'' = \frac{d^2 D}{dr^2}\end{aligned}\tag{1.151}$$

donde  $V$  es un potencial de simetría esférica que surge de la estructura de carga del núcleo y/o átomo. Mott también presenta una solución analítica para los corrimientos de fase para núcleos desnudos (esto es,  $V = \pm Z/r$  donde el signo + es para positrones y el - para electrones). Su resultado se puede escribir como sigue [41]:

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = \frac{r_0^2 Z^2}{\beta^2 \tau (\tau + 2)} \frac{R_{mott}(Z, \tau, \mu)}{(1 - \mu)^2}\tag{1.152}$$

En la ecuación 1.152  $R_{mott}$  se conoce como la corrección de Mott y está dada por:

$$\begin{aligned}
R_{mott} &= \frac{1-\mu}{(\tau+1)^2} |F_0 + F_1|^2 + \frac{2\beta^4}{\tau(\tau+2)} \frac{(1-\mu)^2}{1+\mu} \frac{|G_0 + G_1|^2}{\alpha^2 Z^2} \\
F_0 &= \frac{i\Gamma(1-i\alpha')}{2\Gamma(1+i\alpha')} \left(\frac{1-\mu}{2}\right)^{i\alpha'} \\
G_0 &= -i\alpha' \frac{1-\mu}{1+\mu} F_0 \\
F_1 &= \frac{i}{2} \sum_{l=0}^{\infty} [l\phi_l - (l+1)\phi_{l+1}] (-1)^l P_l(\mu) \\
G_1 &= \frac{i}{2} \sum_{l=0}^{\infty} [l^2\phi_l - (l+1)^2\phi_{l+1}] (-1)^l P_l(\mu) \\
\phi_l &= \frac{\exp(-i\pi l) \Gamma(l-i\alpha')}{l+i\alpha'} \frac{\Gamma(l+i\alpha')}{\Gamma(l+i\alpha')} - \frac{\exp(-i\pi\rho_l) \Gamma(\rho_l-i\alpha')}{\rho_l+i\alpha'} \frac{\Gamma(\rho_l+i\alpha')}{\Gamma(\rho_l+i\alpha')} \\
\rho_l &= \sqrt{l^2 - \alpha^2 Z^2}
\end{aligned} \tag{1.153}$$

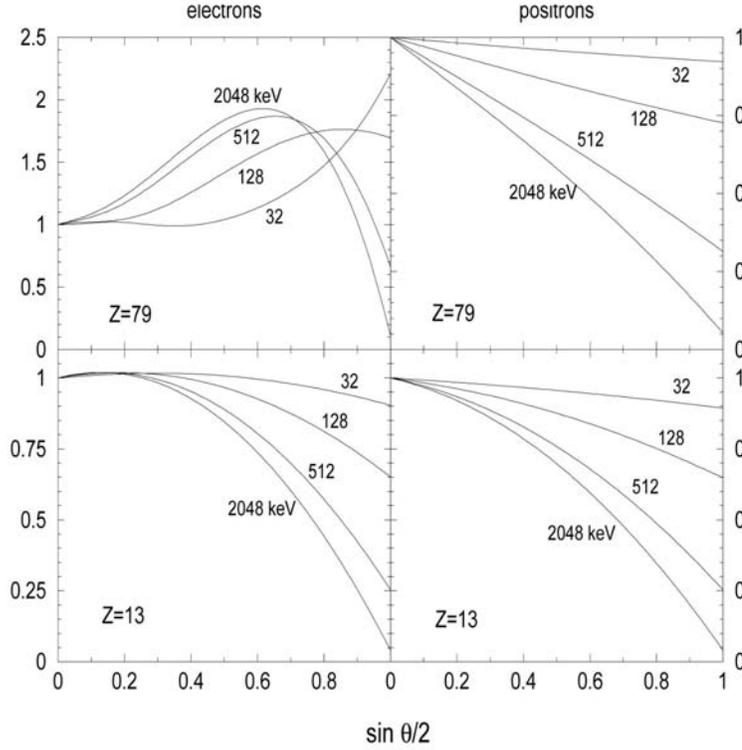
donde  $\Gamma$  es la función gamma. La cantidad  $\alpha'$  está definida en la ecuación 1.142 pero ahora número atómico  $Z$  es considerado como  $-Z$  para los electrones y como  $+Z$  para los positrones. Debido a este hecho, la corrección de Mott es distinta para electrones y positrones.  $R_{mott}$  debe ser evaluada numéricamente. La figura 6 da unos ejemplos representativos.

Como referencia, en los códigos Monte Carlos ETRAN e ITS, donde se implementó la técnica de historia condensada de Clase I, el transporte de electrones se realiza en una grilla de tamaño de paso predeterminado. Esto permite el cálculo de la distribución de dispersión elástica múltiple (veáse la sección 1.4.7) para una sección eficaz arbitraria complicada para una grilla de tamaño de paso usada con una razonable cantidad de datos precálculados.

La situación con la técnica de Clase II es más difícil puesto que las longitudes de paso son estocásticas (veáse la sección 1.4.1). Por consiguiente, la sección eficaz de dispersión elástica se aproxima como:

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\mu} = \frac{d\sigma_{SR}}{d\mu} R_{mott}(Z, \tau, \mu) \tag{1.154}$$

Figura 6: El factor de corrección de Mott  $R_{mott}$  para oro y aluminio para varias energías de electrones y positrones incidentes



En la ecuación anterior  $d\sigma_{SR}/d\mu$  es la sección eficaz de pantalla de Rutherford dada en la ecuación 1.139. Se sabe que esta aproximación es precisa para energías arriba de 1 MeV (para materiales con  $Z$  grande) o 100 keV (para materiales con  $Z$  pequeño) Para reproducir la dispersión promedio a bajas energías se trata el parámetro de pantalla,  $\eta$ , como un parámetro libre y se determina numéricamente al resolver la siguiente ecuación:

$$\int_{-1}^1 d\mu \frac{d\sigma_{SR}}{d\mu} R_{mott}(Z, \tau, \mu) (1 - \mu) \equiv \int_{-1}^1 d\mu \frac{d\sigma_{PWA}}{d\mu} (1 - \mu) \quad (1.155)$$

El parámetro de pantalla resultante para electrones se muestra en la figura 7 como una función de  $\beta$  para 4 elementos distintos. En esta figura  $\eta$  está expresada en unidades de  $\eta_M$ , que es el parámetro de pantalla usado en el sistema EGS4, y está dado por:

$$\eta_M = \eta_0(1,13 + 3,76\alpha^2 Z^2) \quad (1.156)$$

La sección eficaz de dispersión elástica para compuestos y mezclas está expresada en forma similar a la ecuación 1.154 pero ahora la corrección de Mott es:

$$R_{mott}(\tau, \mu) = \frac{\sum p_i Z_i^2 R_{mott}(Z_i, \tau, \mu)}{\sum p_i Z_i^2} \quad (1.157)$$

donde el parametro de pantalla está determinado de la ecuación 1.155 donde el análisis parcial de onda de la sección eficaz para compuestos y mezclas es calculada de las secciones eficaces PWA de sus elementos, usando la aproximación de átomo independiente.

Respecto a las deflecciones angulares, en el sistema EGSnrc, se ha tomado el punto de vista simplista de que las contribuciones de las deflecciones angulares para todas las colisiones inelásticas, sub-umbrales y discretas, se pueden tomar en cuenta al reemplazar  $Z^2$  con  $Z(Z + \xi_0)$  en la sección eficaz de pantalla de Rutherford, ecuación 1.139. Aquí  $\xi_0$  es un parámetro apropiado, se usa por defecto  $\xi_0 = 1$  pero no es un requerimiento necesario. Si ahora son simuladas explícitamente las colisiones inelásticas con energía de transferencia más grande que  $T_c$ ,  $\xi_0$  debe ser reemplazado con una energía y un parámetro de corte dependiente  $\xi(T, T_c)$  como sigue [42]:

$$\xi(T, T_c) = \xi_0 \left( 1 - \frac{1}{\bar{Z} + \xi_0} \frac{g_M(\tau, \tau_c)}{g_R(\eta)} \right) \quad (1.158)$$

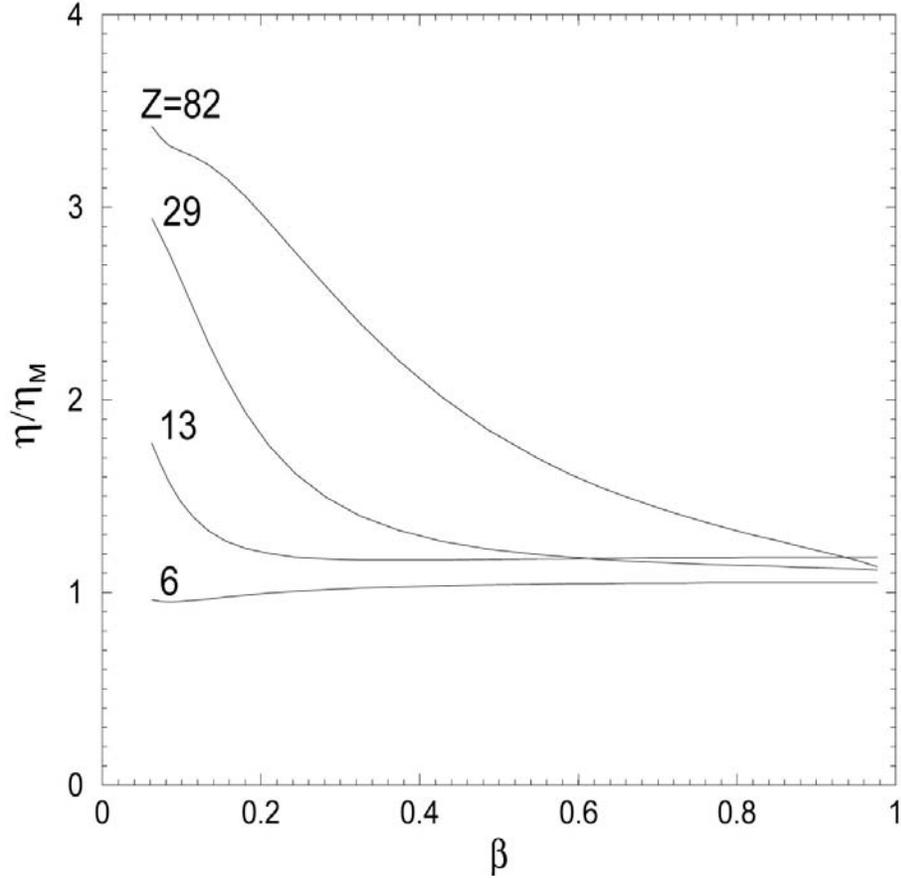
En la ecuación anterior,  $\bar{Z}$  es el número atómico promedio del compuesto y

$$\begin{aligned} g_M(\tau, \tau_c) &= \ln \frac{\tau}{2\tau_c} + \left[ 1 + \frac{(\tau + 2)^2}{(\tau + 1)^2} \right] \ln \frac{2(\tau - \tau_c + 2)}{\tau + 4} \\ &- \left[ \frac{(\tau + 2)^2}{4} + \frac{(\tau + 2)(\tau + 1/2)}{(\tau + 1)^2} \right] \ln \frac{(\tau + 4)(\tau - \tau_c)}{\tau(\tau - \tau_c + 2)} \\ &+ \frac{(\tau - 2\tau_c)(\tau + 2)}{2} \left[ \frac{1}{\tau - \tau_c} - \frac{1}{(\tau + 1)^2} \right] \end{aligned} \quad (1.159)$$

$$\tau_c = T_c/m$$

$$g_R(\eta) = 1 + 2\eta \left[ \ln \left( 1 + \frac{1}{\eta} \right) - 2 \right] \quad (1.160)$$

Figura 7: El parámetro de pantalla  $\eta$ , determinado de la ecuación 1.155, en unidades de  $\eta_M$



Para resumir, cuando se usan los efectos de spin en el sistema EGSnrc (`SPIN_EFFECTS = .true.`), la sección eficaz de dispersión elástica usada es:

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\mu} = \frac{2\pi r_0^2 Z (Z + \xi(T, T_c)) R_{mott}(Z, T, \mu)}{\beta^2 \tau (\tau + 2) (1 - \mu + 2\eta)} \quad (1.161)$$

donde:

- El parámetro de pantalla  $\eta$  está determinado del requerimiento que la sección eficaz descrita arriba reproduce la dispersión promedio de la sección eficaz PWA obtenida por medio de la solución numérica de las ecuaciones 1.149 y 1.151 usando las densidades de electrón Hartree-Fock. Este parámetro es distinto para electrones y positrones.

- El parámetro  $\xi(T, T_c)$  toma en cuenta las contribuciones de las colisiones inelásticas sub-umbral, depende de la energía y de la energía umbral  $T_c$ .
- $R_{mott}$  es la corrección de Mott que resulta de la solución de la ecuación de Dirac en un campo de núcleos desnudos.

El muestreo de los eventos de dispersión elástica en base de la ecuación 1.161 se llevan a cabo usando una técnica de rechazo. Se usa la ecuación 1.148 para muestrear la parte de pantalla de Rutherford, la  $\mu$  muestreada se acepta si un segundo número al azar es menor que  $R_{mott}/R_{mott,max}$ . La eficiencia de este algoritmo es cercana a la unidad para materiales con  $Z$  pequeño pero solamente 1/2 para materiales con  $Z$  grande.

#### 1.4.7. Dispersión elástica múltiple

La distribución de dispersión elástica múltiple para el transporte de electrones en un medio infinito y homogéneo, para una longitud de paso  $s$ , la cual corresponde a una pérdida de energía  $E_0 - E$ , se puede obtener de la ecuación 1.98 al integrarla sobre la posición, expandiendo  $\Phi_0$  y la sección eficaz en los polinomios de Legendre  $P_l$  para llegar a la siguiente ecuación:

$$\Phi_0(\mu, \phi, E) = \frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \left( l + \frac{1}{2} \right) \exp(-G_l) P_l(\mu) \quad (1.162)$$

donde  $\mu$  es el coseno del ángulo polar  $\theta$  y el proceso es considerado en un marco donde el electron está moviéndose inicialmente a lo largo del eje  $z$ . Esta expresión fue obtenida por primera vez por Goudsmit y Saunderson [43, 44]. Los momentos de Goudsmit-Saunderson (GS),  $G_l$  están dados por:

$$G_l = \int_0^s ds' \kappa_l(s') = \int_E^{E_0} \frac{dE'}{L(E', E_c, k_c)} \kappa_l(E') \quad (1.163)$$

donde  $\kappa_l$  denota los momentos de la sección eficaz de dispersión elástica, y está dado por:

$$\kappa_l(E') = 2\pi \int_{-1}^1 d\mu \sum_{el}'(\mu, E) [1 - P_l(\mu)] \quad (1.164)$$

Los momentos  $\kappa_l$  dependen de la energía y del material en el cual el transporte toma lugar, por lo que la distribución elástica múltiple es dependiente de la energía, longitud de paso (o la correspondiente pérdida de energía), material, y energía umbral para interacciones discretas.

En una implementación de historia condensada de Clase I se usa el poder de frenado total (puesto que las interacciones discretas no son modeladas explícitamente). Además, los posibles longitudes de paso están limitados a la grilla de pérdida de energía decidida previo a la simulación. Estos dos hechos permiten que las distribuciones elástica-múltiple sean precalculadas y guardadas en la memoria usando una cantidad de datos relativamente pequeñas. En una implementación de clase II las longitudes de paso son estocásticas y simplemente el pre-cálculo de todas las posibles longitudes de paso no es posible.

#### 1.4.7.1. Dispersión elástica múltiple de la sección eficaz de pantalla de Rutherford

La teoría de dispersión elástica múltiple para la sección eficaz de pantalla de Rutherford empleada en el sistema EGSnrc, fue desarrollada por Kawrakow y Bielajew en la referencia [3] y refinada después por Kawrakow en la referencia [5] para una mejora en la pérdida de energía.

El tratamiento en la referencia [3] empieza con la distribución de dispersión múltiple que resulta de despreciar la pérdida de energía, la cual puede ser escrita como:

$$2\pi\Phi_0(\mu, \phi, E) = e^{-\lambda}\delta(1 - \mu) + \lambda e^{-\lambda} \frac{1}{\sigma_{SR}} \frac{d\sigma_{SR}(\mu)}{d\mu} + (1 - e^{-\lambda} - \lambda e^{-\lambda}) F_{SR}^{(2+)}(\mu) \quad (1.165)$$

donde  $\lambda$  es el número de caminos libres correspondientes a la longitud de camino  $s$ :

$$\lambda = \sum_{SR} s, \quad (1.166)$$

y la sección eficaz de pantalla de Rutherford está dada en la ecuación 1.139.

La distribución  $F_{SR}^{(2+)}$  es la distribución de dispersión múltiple normalizada que resulta de al menos dos colisiones elásticas descritas por la sección eficaz de pantalla de Rutherford:

$$F_{SR}^{(2+)}(\mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \left( l + \frac{1}{2} \right) P_l(\mu) j_l^{(2+)} \quad (1.167)$$

$$j_l^{(2+)} = \frac{\exp(-G_{l,SR}) + [1 + \lambda - G_{l,SR}] \exp(-\lambda)}{1 - \exp(-\lambda) - \lambda \exp(-\lambda)}$$

Aquí, se ha puesto el subíndice  $SR$  en el momento  $G_l$  para establecer explícitamente que estos se calculan usando la sección eficaz de pantalla de Rutherford. La ecuación 1.167 puede ser puesta de una forma más tratable al hacer un cambio de variable:

$$u = (1 + a) \left( 1 - \frac{2a}{1 - \mu + 2a} \right) \quad (1.168)$$

donde el parámetro  $a$  se elige de tal forma que haga a  $q_{SR}^{(2+)}$ , tan plano como sea posible y:

$$q_{SR}^{(2+)}(u) = F_{SR}^{(2+)}(\mu) \frac{d\mu}{du} \quad (1.169)$$

Después de algunas manipulaciones, se obtiene [3]

$$a = \kappa + \sqrt{\kappa^2 + \kappa} \quad (1.170)$$

con la notación corta:

$$\kappa = \frac{\langle 0 \rangle - 2 \langle 1 \rangle + \langle 2 \rangle}{4 \langle 1 \rangle}$$

$$\langle n \rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \left( l + \frac{1}{2} \right) j_l^{(2+)} \sum_{m=0}^{\infty} \left( m + \frac{1}{2} \right) j_m^{(2+)} \int_{-1}^1 d\mu \mu^n P_l(\mu) P_m(\mu) \quad (1.171)$$

La cantidad  $\omega^2 = a/\eta$  ( $\eta$  es el parámetro de pantalla) es una función de  $\lambda$  y tiene una ligera dependencia de  $\eta$ . En términos de eficiencia de simulación, es mejor ignorar la dependencia de  $\eta$  de  $\omega$  y usar un ajuste de datos obtenido al tiempo de la ejecución de las ecuaciones 1.170 y 1.171 para  $\eta \rightarrow 0$ . Se usa:

$$\frac{\omega^2}{\lambda + 4} = \begin{cases} 1,347 + t(0,209364 - t(0,45525 - t(0,50142 - 0,081234t))) & \text{si } \lambda < 10 \\ -2,77164 + t(2,94874 - t(0,1535754 - 0,00552888t)) & \text{lo demás} \end{cases} \quad (1.172)$$

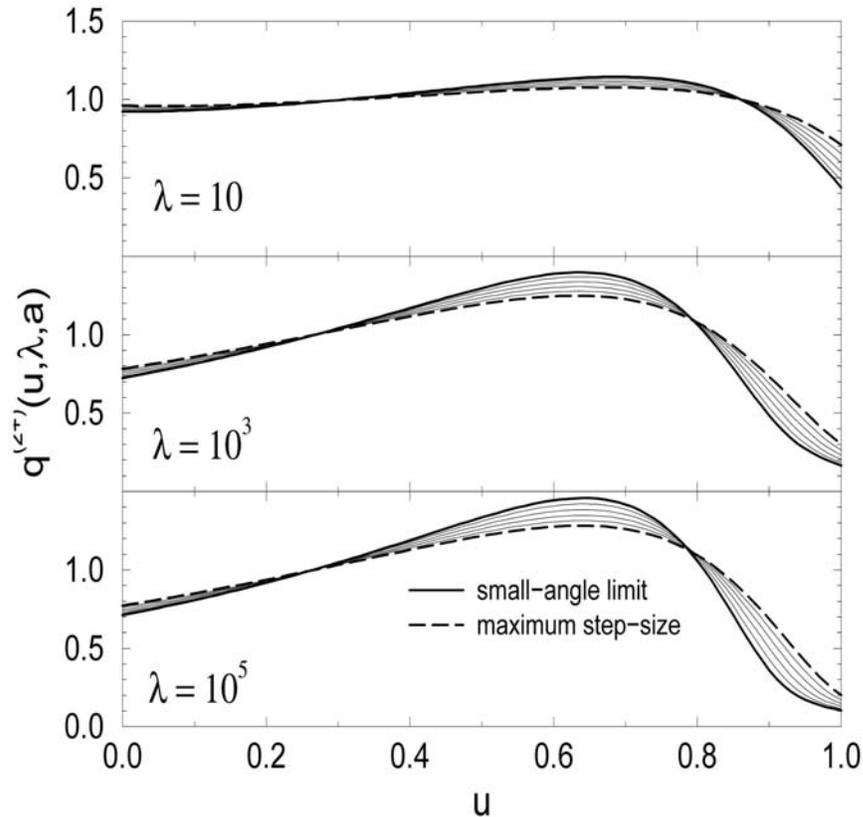
$$t = \ln \lambda$$

La dependencia de la distribución  $q_{SR}^{(2+)}(u)$  de  $\lambda$  y  $\eta$  es bastante débil, como puede verse en la figura 8. Por consiguiente  $q_{SR}^{(2+)}$  puede ser interpolada muy precisamente durante el tiempo de la ejecución usando interpolación lineal en  $\ln \lambda$  y  $G_{l,SR}$  desde una tabla precálculada. Aquí  $G_{l,SR}$  denota el primer momento  $GS$ , veáse la ecuación 1.163, resultante de la dispersión elástica de pantalla de Rutherford:

$$G_{l,SR} = 2\lambda\eta \left[ (1 + \eta) \ln \left( 1 + \frac{1}{\eta} \right) - 1 \right] \quad (1.173)$$

Los datos de  $q_{SR}^{(2+)}$  los cuales están en la forma de una tabla de 3 dimensiones, están guardados en el archivo `newms.data` y se leen dentro de la subrutina `ini_ms_SR`.

Figura 8: La distribución  $q_{SR}^{(2+)}$  para tres longitudes de paso. La curva etiquetada small-angle limit es la distribución para  $\eta \rightarrow 0$  (energía infinita), la curva para maximum step-size corresponde al máximo tamaño de paso para pasos de historia condensada para los cuales la base de datos fue generada ( $G_1 < 0,5$ )



Para tomar en cuenta la pérdida de energía, se usa la distribución de dispersión múltiple para una energía de paso efectiva la cual es determinada por el requerimiento [5]:

$$\frac{G_2(E_0, E)}{G_1(E_0, E)} = \frac{\kappa_2(E_{eff})}{\kappa_1(E_{eff})} \quad (1.174)$$

Estos dos requerimientos garantizan que los primeros dos momentos  $GS$  son reproducidos exactamente, y da al mismo tiempo una aproximación muy precisa para  $GS$  de orden alto por lo que la distribución de dispersión múltiple resultante es virtualmente idéntica a la distribución de distribución múltiple calculada por medio de integración numérica de los momentos  $G_l$ .

Para la sección eficaz de pantalla de Rutherford la energía efectiva y la longitud de paso estan dados por:

$$\begin{aligned} E_{eff} &= E_0 \left[ 1 - \frac{\epsilon}{2} - \frac{\epsilon^2}{12(2-\epsilon)} \left( \frac{5\tilde{\tau}^2 + 10\tilde{\tau} + 6}{(\tilde{\tau} + 1)(\tilde{\tau} + 2)} + 2b(\tilde{E}) \right) + O(\epsilon^3) \right] \\ s_{eff} &= s \left( 1 - \frac{\epsilon^2}{3(2-\epsilon)} \frac{\tilde{\tau}^4 + 4\tilde{\tau}^3 + 7\tilde{\tau}^2 + 6\tilde{\tau} + 4}{(\tilde{\tau} + 1)^2(\tilde{\tau} + 2)^2} + O(\epsilon^4) \right) \end{aligned} \quad (1.175)$$

donde se ha definido:

$$b(E) = \frac{E}{C(E)} \frac{dC(E)}{dE}, \quad C(E) = L(E) \beta^2 \quad (1.176)$$

$\beta$  denota la velocidad de la partícula en unidades de velocidad de la luz. En las ecuaciones de arriba  $\epsilon = (E_0 - E)/E$  y  $\tilde{\tau} = 1/2(E_0 + E)/m$ .

Con todo esto, el algoritmo para muestrear los ángulo de dispersión elástica múltiple es:

1. Se calcula  $s_{eff}$  y  $E_{eff}$  de la ecuación 1.175.
2. Se calcula  $\lambda$  de la ecuación 1.166 y 1.147,  $t = \ln \lambda$  y  $\eta$  de la ecuación 1.146
3. Se elige un número al azar  $r_1$ .
4. Si  $r_1 < e^{-\lambda}$ , entonces el ángulo de dispersión es cero, se regresa el control a la rutina de llamada.

5. De otro modo si  $r_1 < e^{-\lambda}(1 + \lambda)$ , entonces se muestrea  $\mu$  de la distribución de dispersión simple de acuerdo a la ecuación 1.148, se regresa el control a la rutina de llamada.
6. De otra manera, se muestrea  $\mu$  de la distribución  $q_{SR}^{(2+)}$ . Se calcula  $G_{1,SR}$  de la ecuación 1.173,  $\omega^2$  de la ecuación 1.172 y  $a = \omega^2\eta$ .
7. Se determina de a partir de tablas  $\ln \lambda$  y  $G_{1,SR}$ .
8. Se muestrea  $u$  de la distribución correspondiente,  $q_{SR}^{(2+)}(u)$ .
9. Se libera  $\mu$ ,

$$\mu = \frac{2au}{1 - u + a} \quad (1.177)$$

#### 1.4.7.2. Dispersión elástica múltiple con efectos de spin

En principio, la aproximación desarrollada en la referencia [3] a secciones eficaces de dispersión elástica simple más complicadas que la sección eficaz de pantalla de Rutherford. Se ha encontrado, sin embargo, que el uso directo de esta aproximación para la sección eficaz con efectos de spin (veáse la sección 1.4.6.2 no lleva a una interpolación satisfactoriamente precisa. Por consiguiente, se ha implementado una técnica de rechazo para el muestreo de los ángulos de dispersión múltiple cuando `SPIN_EFFECTS = .true,.`

La distribución de dispersión múltiple que resulta de al menos dos procesos de dispersión elástica, se escribe como:

$$F^{(2+)}(\lambda, \eta, Z, \mu) = F_{SR}^{(2+)}(\lambda, \eta, \mu) R(\lambda, \eta, Z, \mu) \quad (1.178)$$

donde  $F_{SR}^{(2+)}$  es la distribución 2+ de una sección eficaz de pantalla de Rutherford para una longitud de camino correspondiente a  $\lambda$  la media de camino libre elástico y un ángulo de pantalla  $\eta$ , y  $R(\lambda, \eta, Z, \mu)$  se define como:

$$R(\lambda, \eta, Z, \mu) = \frac{F^{(2+)}(\lambda, \eta, Z, \mu)}{F_{SR}^{(2+)}(\lambda, \eta, \mu)} \quad (1.179)$$

La función  $R(\lambda, \eta, Z, \mu)$  es una superficie tridimensional para cada medio. Experimentos numéricos muestran que la forma en la que se requiere la cantidad mínima de datos precalculados para interpolar la función  $R(\lambda, \eta, Z, \mu)$  entre los datos precalculados es usar para cada medio lo siguiente:

- Interpolación lineal en la cantidad  $q$ , donde,

$$q = \frac{2G_{1,SR}(\lambda, \eta)}{1 + 2G_{1,SR}(\lambda, \eta)} \quad (1.180)$$

$q$  solamente puede tomar valores entre 0 y 1. Para  $q \rightarrow 0$ ,  $R(\lambda, \eta, Z, \mu)$  converge a  $R_{mott}(E, Z, \mu)$ . Para  $q \rightarrow 1$ ,  $R(\lambda, \eta, Z, \mu)$  tiende a la unidad para todos los ángulos  $\mu$ . La razón a la cual cambia la función  $R$  de un límite a otro depende de la energía.

- Interpolación lineal en  $\beta^2$  para energías más grandes que 100 keV, interpolación lineal en  $\ln E$  para energías menores que 100 keV.
- Interpolación lineal en  $\sin \theta/2 = \sqrt{(1 - \mu)/2}$

Los datos precalculados son guardados en archivos separados para todos los elementos en el directorio `spinms` y usados en la subrutina `init_spin` para calcular  $R$  para los medios involucrados en la simulación actual. `init_spin` es llamado de `mscati` el cual a su vez es llamado de `HATCH`.

El algoritmo de muestreo, entonces, es similar al dado al final de la sección anterior pero involucra bucles de rechazo adicionales en los pasos 4 y 8 usando a  $R_{mott}$  o  $R$  como función de rechazo. Además, el cálculo del parámetro de pantalla  $\eta$  y el número de camino libre medio  $\lambda$  involucra factores de corrección adicionales, puesto que ambos,  $\eta/\eta_0$  y el parámetro  $\xi$  el cual describe la contribución de las colisiones inelásticas sub-umbral a las deflexiones angulares, no son constantes, véase la sección 1.4.6.2

#### 1.4.8. Algoritmo de paso de electrón

Como se mencionó en la sección 1.4.1, el transporte entre las subsecuentes colisiones catastróficas es descrito por las ecuaciones 1.98 y 1.95 proveen el vínculo entre la energía y la longitud de paso. No se conoce una solución exacta de estas ecuaciones, y así, se requieren métodos aproximados para relacionar la pérdida de energía, la longitud de paso y el desplazamiento espacial.

La aproximación más simple posible que se puede tomar es ignorar las deflexiones debidas a la dispersión elástica múltiple durante el paso de historia condensada y transportar al electrón sobre una línea recta a lo largo de su dirección inicial de movimiento. Para que esta aproximación sea precisa los pasos de historia condensada deben ser suficientemente cortos para que la línea recta de aproximación no sea una aproximación severa. Larsen mostró [45] que cualquier algoritmo de historia condensada que converge a una respuesta correcta en el límite de pasos suficientemente pequeños, provee una simulación fiel de la dispersión elástica múltiple. Sin embargo, hacer las longitudes de paso muy cortas puede causar que la simulación sea extremadamente ineficiente. Además, si los resultados calculados muestran dependencias del tamaño de paso, se necesita realizar un estudio cuidadoso del tamaño de paso para determinar cuando el resultado converge.

El algoritmo de paso de electrón empleado en el sistema EGSnrc depende del parámetro `transport_algorithm` que está en `COMMON/ET_Control/`. Si se hace uno, se emplea una versión ligeramente modificada de los algoritmos de PRESTA, PLC (path-length-correction) corrección de longitud de paso y LCA (lateral correlation algorithm) algoritmo de correlación lateral. Se conoce al algoritmo PRESTA por subestimar las deflexiones laterales (deflexiones perpendiculares a la dirección inicial de movimiento), subestimar el desordenamiento longitudinal y por producir una singularidad en la distribución que describe la dispersión lateral de los electrones en un paso de historia condensada simple [46, 4]. Las implicaciones de los resultados de la simulación dependen de la situación bajo investigación. A altas energías, donde la dispersión elástica es débil, PRESTA es quizá suficientemente preciso. Su uso para aplicaciones a bajas energías no se recomienda.

Si el parámetro `transport_algorithm` se hace cero (su valor por defecto), se emplea el algoritmo de paso de electrón desarrollado en la referencia [4] y refinado en la referencia 5. Este algoritmo es desarrollado de tal forma que reproduce los momentos espaciales de segundo orden del flujo  $\Phi_0(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t)$ , conocido de la teoría de Lewis [47] para el transporte en un medio infinito y homogéneo.

A continuación se da un breve resumen de los algoritmos de transporte disponibles en el sistema EGSnrc. Las posiciones finales están en un marco donde el electrón está inicialmente en el origen y se mueve a lo largo del eje  $z$  positivo. Las posiciones en el sistema de coordenadas de la simulación actual se obtienen usando las rotaciones y las traslaciones espaciales apropiadas.

- `transport_algorithm = 1` (PRESTA)

$$\begin{aligned}
 x &= r_{\perp} \sin \theta \cos \phi \\
 y &= r_{\perp} \sin \theta \sin \phi \\
 z &= \langle z \rangle \\
 r_{\perp} &= \min \left( \frac{s}{2}, \sqrt{\frac{s^2 - \langle z \rangle^2}{\sin^2 \theta}} \right)
 \end{aligned} \tag{1.181}$$

donde  $\theta$  y  $\phi$  son los ángulos de dispersión polar y azimutal, respectivamente,  $\langle z \rangle$  es la distancia de transporte promedio en la dirección inicial de movimiento para una longitud de paso  $s$ .  $\langle z \rangle$  se calcula de la expresión exacta de Lewis, lo cual implica:

$$\langle z \rangle = s \frac{1 - \exp(-G_1)}{G_1} \tag{1.182}$$

si se desprecia la pérdida de energía.

- `transport_algorithm = 0` (valor por defecto) El paso de historia condensada es dividido en dos sub-pasos y los ángulos de dispersión elástica múltiple  $\theta_1, \phi_1$  y  $\theta_2, \phi_2$  son muestreados por separado. El ángulo final de dispersión es determinado de  $\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2$ :

$$\cos \theta = \cos \theta_1 \cos \theta_2 - \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\phi_1 - \phi_2) \tag{1.183}$$

La posición final se calcula como sigue:

$$\begin{aligned}
x &= s [\eta\delta \sin \theta_1 \cos \phi_1 + \eta(1 - \delta) \sin \theta_2 (\cos \phi_1 \cos \phi_2 - \cos \theta_1 \sin \phi_1 \sin \phi_2) + a_2 \sin \theta \cos \phi] \\
y &= s [\eta\delta \sin \theta_1 \cos \phi_1 + \eta(1 - \delta) \sin \theta_2 (\cos \phi_1 \cos \phi_2 + \cos \theta_1 \sin \phi_1 \sin \phi_2) + a_2 \sin \theta \sin \phi] \\
z &= s [a_1 + \eta\delta \cos \theta_1 + \eta(1 - \delta) \cos \theta_2 + a_2 \cos \theta] \\
a_1 &= \frac{1 - \eta}{2} (1 + \alpha_1) \\
a_2 &= \frac{1 - \eta}{2} (1 - \alpha_1) \\
\delta &= \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{6}}{6} - \left( \frac{1}{4\sqrt{6}} - \gamma \frac{4 - \sqrt{6}}{24\sqrt{6}} \right) G_1 + \alpha_2 \\
\gamma &= \frac{G_2}{G_1}
\end{aligned} \tag{1.184}$$

Aquí,  $\eta$  es un número al azar muestreado de  $2\eta d\eta$  ( y no el parámetro de pantalla) y  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  son las correcciones de pérdida de energía derivados en la referencia [5], esto es:

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= \frac{\kappa'_1(\tilde{E})}{\kappa_1(\tilde{E})} \frac{\Delta E}{2} + O(\Delta E^2) \\
\alpha_2 &= \left( \frac{\kappa'_2(\tilde{E})}{\kappa_2(\tilde{E})} - \frac{\kappa'_1(\tilde{E})}{\kappa_1(\tilde{E})} \right) \frac{\Delta E}{2\sqrt{6}} + O(\Delta E^2)
\end{aligned} \tag{1.185}$$

donde  $\Delta E$  es la pérdida de energía sub-umbral asociada con el paso,  $\tilde{E}$  la energía de paso promedio y  $\kappa'_1$  y  $\kappa'_2$  las derivadas de los momentos  $\kappa_1$  y  $\kappa_2$  (veáse la ecuación 1.164) con respecto a  $E$ . Si la dispersión elástica es descrita por la sección eficaz de pantalla de Rutherford, las correcciones de pérdida de energía  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  están dadas por:

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &\approx \left( \frac{2 + \tilde{\tau} + \tilde{\tau}^2}{(1 + \tilde{\tau})} - \frac{1 + \tilde{\tau}}{\ln(1 + 1/\tilde{\eta})(1 + \tilde{\eta}) - 1} \right) \frac{\Delta E/\tilde{E}}{(2 + \tilde{\tau})} \\
\alpha_2 &\approx \frac{\Delta E/\tilde{E}}{\sqrt{6}(1 + \tilde{\tau})(2 + \tilde{\tau}) [\ln(1 + 1/\tilde{\eta})(1 + \tilde{\eta}) - 1] [\ln(1 + 1/\tilde{\eta})(1 + 2\tilde{\eta}) - 2]}
\end{aligned} \tag{1.186}$$

En la ecuación anterior  $\tilde{\tau} = \tilde{E}/m$  y  $\tilde{\eta}$  es el parámetro de pantalla para el punto de energía media  $\tilde{E}$ . Estas ecuaciones son usadas en la subrutina `msdist_pII`, la cuál implementa la historia condensada de transporte de electrones de acuerdo al algoritmo dado en la ecuación 1.184. Estrictamente hablando cuando los efectos de spin son encendidos, se debería usar las correcciones de pérdida de energía derivadas de los momentos resultantes de la correspondiente sección eficaz de dispersión elástica.

El algoritmo dado en la ecuación 1.184 reproduce los momentos espaciales de primer y segundo orden mejor que el 0.1 % para  $G_1 < 0,5$  si la pérdida de energía es despreciada ( $G_1$  está definido en la ecuación 1.163 y es una función de longitud de paso, por lo que esta condición impone un tamaño máximo de paso permitido). Esta precisión se mantiene cuando se toma en cuenta la pérdida de energía por medio de las correcciones dadas en la ecuación 1.185 si la máxima fracción de pérdida de energía está restringida a un 25 %. Estas dos restricciones del tamaño de paso de historia condensada están controlados por medio de los parámetros `ximax` (correspondiente al máximo permitido de  $G_1$ ) y `ESTEPE` que está en `COMMON/ET_Control` y sus valores por defecto son 0.5 y 0.25 respectivamente.

Debido al uso de las correcciones de pérdida de energía derivados de la sección eficaz de pantalla de Rutherford además de la dispersión elástica con spin, en este caso la desviación del valor teórico esperado es ligeramente más grande y excede el 0.1 % para `ESTEPE` entre 0.15 y 0.2.

#### **1.4.9. Algoritmo de cruce de fronteras**

Los algoritmos de paso de electrón discutidos en la sección 1.4.8 son válidos solamente para el transporte en un medio infinito y homogéneo. En situaciones prácticas se trata con interfaces entre distintos materiales. Si un electrón está cerca de una interface con otro material, porciones de su camino curvado pueden estar en materiales distintos y por tanto su trayectoria será distinta de la simulada.

En la versión original EGS4, este problema asociado con la simulación de historia condensada de transporte de electrones fue ignorado completamente, y se le conoció como el artefacto de interface [48]. Para dirigir el artefacto de interface, se incorporó a PRESTA un BCA (boundary crossing algorithm) algoritmo de cruce de fronteras, refinado. De acuerdo a este algoritmo, al electrón no le es permitido tomar pasos mas largos que  $t_{\perp}$ , donde  $t_{\perp}$  es la distancia perpendicular a la frontera más cercana, a menos que  $t_{\perp}$  sea más pequeño que  $t_{\text{mín}}$ , que es la longitud de paso mínimo definido por el usuario para el cruce de frontera. Para  $t_{\perp} < t_{\text{mín}}$ , las deflecciones laterales son apagadas y la partícula es transportada.

En un trabajo reciente [49], Foote y Smyth demostraron que la aproximación de forzar un evento de dispersión múltiple en la frontera causa una singularidad en el flujo de partículas simulado. La singularidad resulta del hecho que hay una probabilidad no cero para la dispersión paralela a la frontera. En la vida real las partículas se mueven paralelas a la frontera, no la cruzan y por consiguiente no contribuyen al flujo planar. Aunque la singularidad está presente en cualquier situación sobre una distancia del orden de  $t_{\text{mín}}$ , será observada, por ejemplo, como una sobrepredicción de dosis, solamente si el tamaño de la región es comparable a  $t_{\text{mín}}$  debido al promedio.

Para superar este problema, en el sistema EGSnrc, se implemento un algoritmo de cruce de fronteras exacto, es decir, la simulación se hace en un modo de dispersión elástica simple, cada vez que un electrón se acerque a una frontera como  $t_{\text{mín}}$ . En el sistema EGSnrc el único criterio para  $t_{\text{mín}}$  es la eficiencia (puesto que la teoría de dispersión múltiple empleada es aplicable a todos los tamaños de paso). Esto hace que la simulación de dispersión simple sea más eficiente que la simulación de historia condensada en al menos 3 caminos libres medios elásticos. Este se toma como el valor por defecto para el parametro `$SKIN_DEPTH_FOR_BCA` el cual determina  $t_{\text{mín}}$ .

La investigación de la referencia [6], muestra que, la fortaleza del efecto de la singularidad del flujo debido a forzar eventos de dispersión elástica múltiple exactamente en las fronteras, es proporcional al primer momento de  $GS$ ,  $G_1$ . A altas energía  $G_1$  es muy pequeño para tamaños de pasos razonables y así, una simulación de dispersión elástica en la vecindad de las fronteras es potencialmente un desperdicio. Es por eso que se conserva el algoritmo de cruce de frontera original de PRESTA en el sistema EGSnrc. La selección entre el algoritmo BCA exacto y BCA de PRESTA se hace por medio del parámetro `BCA_ALGORITHM` que está en `COMMON/ET_Control`. Si se hace 0 (valor por defecto), se emplea el BCA exacto; si se hace 1 se utiliza el BCA de PRESTA. Si se selecciona el BCA de PRESTA y el parámetro `$$SKIN_DEPTH_FOR_BCA` se hace 0, el sistema EGSnrc calculará  $t_{\min}$  de acuerdo a la implementación original de PRESTA. Vale la pena notar que si `BCA_ALGORITHM` se hace 1 y el parámetro `$$SKINDEPTH_FOR_BCA` tiene un número muy grande, se correrá la simulación entera sin deflexiones laterales en los pasos individuales de historia condensada. Si, por otro lado, `BCA_ALGORITHM` se hace 0 y el parámetro `$$SKINDEPTH_FOR_BCA` tiene un número muy grande, se hará la simulación entera en el modo de dispersión simple. Estas dos son las opciones disponibles, si la geometría bajo investigación es demasiado compleja para el cálculo de  $t_{\perp}$ .

#### 1.4.10. Otros aspectos de historia condensada

Hay dos aspectos adicionales de la implementación de la técnica de historia condensada que merecen alguna consideración:

1. El cálculo de longitudes de camino correspondientes a una pérdida de energía dada y viceversa. Las dos cantidades están relacionadas por la ecuación 1.95.
2. El muestreo de las distancias entre interacciones discretas. Puesto que las secciones eficaces son dependientes de la energía y los cambios de energía por medio de pérdidas de energía sub-umbral (continuos), el muestreo de las distancias entre interacciones discretas es ligeramente más complicado para electrones que para fotones.

#### 1.4.10.1. Evaluación de la pérdida de energía

La pérdida de energía  $\Delta E$  debida a los procesos sub-umbrales para un paso de historia condensada de longitud  $s$  es:

$$\Delta E = \int_0^s ds' L(s') \quad (1.187)$$

donde el poder de frenado restringido es una función de  $s'$  en el sentido de la ecuación 1.95. La ecuación 1.187 debe ser evaluada en vuelo para cada paso de historia condensada y tan rápido y preciso como el procedimiento lo necesite. En la implementación original EGS4 la integral de arriba fue aproximada con:

$$\Delta E \approx L(E_0)s \quad (1.188)$$

donde  $E_0$  es la energía al inicio del paso. En el algoritmo PRESTA se hace el siguiente refinamiento:

$$\Delta E \approx L(E_0 - L(E_0)s/2)s \quad (1.189)$$

La motivación de lo anterior es la fórmula de integración de Euler:

$$\int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} dx' f(x') = f(x) \Delta x + O(\Delta x^3) \quad (1.190)$$

y así, se puede esperar que a primera vista un error  $O(\Delta E^3)$  debido al uso de la ecuación 1.189. Un examen más cuidadoso de la integral revela que la ecuación 1.189 tiene además un error  $O(\Delta E^2)$  como en la aproximación original del EGS4 (aunque el coeficiente del término  $O(\Delta E^2)$  es más pequeño). Una aproximación más precisa se presenta en la referencia [5], pero en el sistema EGSnrc se usa otra aproximación más simple pero no menos precisa.

En el sistema EGSnrc se usa una interpolación lineal en  $\ln E$  al momento de la ejecución para calcular varias cantidades, el poder de frenado restringido entre ellos, esto es:

$$L(E) = a_i + b_i \ln E \quad \text{para } E_i \leq E < E_{i+1} \quad (1.191)$$

donde  $E_i$  son las energías de borde. Esta aproximación ha probado ser muy precisa (si no es suficientemente precisa, la precisión se puede incrementar al incrementar el número de interpolaciones). Se define ahora  $R_i$ :

$$R_i = \int_{E_1}^{E_i} \frac{dE'}{L(E')} \quad (1.192)$$

donde  $E_1$  es la primera energía en la tabla de interpolación (usualmente ligeramente más pequeña que TE).  $R_i$  es la longitud de camino que un electrón con energía  $E_i$  viajará hasta una absorción local si la pérdida de energía es solamente por medio de procesos sub-umbrales. En el sistema EGSnrc las cantidades  $R_i$  son guardadas en el arreglo `range_ep` que está en `COMMON/ELECIN/` para cada medio. Usando las  $R_i$  se puede calcular el rango  $R(E)$  para energías arbitrarias de:

$$R(E) = R_i + \int_{E_i}^E \frac{dE'}{a_i + b_i \ln E'} \approx R_i + \frac{E - E_i}{L_i} \left( 1 - \frac{b_i \epsilon}{L_i 2} + \frac{b_i (2b_i + L_i) \epsilon^2}{L_i^2 6} \pm \dots \right) \quad (1.193)$$

En la ecuación anterior,  $E_i$  es la más baja energía de borde del bin al cual pertenece  $E$ ,  $L_i$  es la notación corta para  $L(E_i) = a_i + b \ln E_i$  y  $\epsilon = E/E_i - 1$  es usualmente muy pequeño, por lo que la expansión de segundo orden en  $\epsilon$  es suficientemente precisa. El rango de electrones se calcula de acuerdo a la ecuación 1.193 al inicio de cada paso de historia condensara en el sistema EGSnrc. Si la decisión ahora es hacer un paso con longitud  $s$ , el rango del electron al final del paso es  $R - s$  y se puede usar la ecuación 1.193 para calcular la energía final de paso correspondiente después de encontrar el bin al cual pertenece la nueva energía usando los rangos  $R_i$ . Si, por otro lado, el tamaño de paso es determinado por medio de una pérdida de energía dada  $\Delta E$ , se calcula  $R(E - \Delta E)$  de la ecuación 1.193 y se usa  $R(E) - R(E - \Delta E)$  como la longitud de paso,  $s$ , correspondiente.

El atractivo de la aproximación descrita anteriormente está en su simplicidad y generalidad. Si un día se decide que el entendimiento de los poderes de frenado restringidos está incompleto y se requiere de un cambio, esta aproximación aún será aplicable tanto como se usa aún la interpolación logarítmica. En este punto se debe mencionar que el conocimiento de la precisión del rango de electrones es absolutamente esencial para la precisión del cálculo de pérdida de energía. Bajo ninguna circunstancia la variable `range` (que da el valor de  $R$ ) debe ser sobrescrita por el usuario.

Una característica adicional y útil es la que resulta del conocimiento del rango del electrón en el material actual, es que se puede aplicar el rango de rechazo del electrón. Si el parámetro `i_do_rr` se hace 1 para la región actual, la energía del electrón será menor que `e_max_rr` (esto es la energía total, incluyendo la energía en reposo) y el rango del electrón  $R$  es menor que  $t_{\perp}$  (véase la sección 1.4.9), se termina la simulación del electrón actual y su energía entera es depositada localmente.

#### 1.4.10.2. Distancia entre interacciones discretas

Si se usa la longitud de camino como la variable para medir las distancias entre interacciones discretas, la longitud de paso  $s$  al próximo evento discreto debe ser muestreada de:

$$\int_0^s ds' \sum^{(tot)}(s') = -\ln r \quad (1.194)$$

donde  $r$  es un número al azar uniformemente distribuido entre cero y uno. Para evitar la intensiva solución numérica de la ecuación de arriba, se emplea el así llamado método de las secciones eficaces ficticias: se introduce una interacción adicional y ficticia, su sección eficaz total  $\sum_f(s')$  se elige de tal forma que:

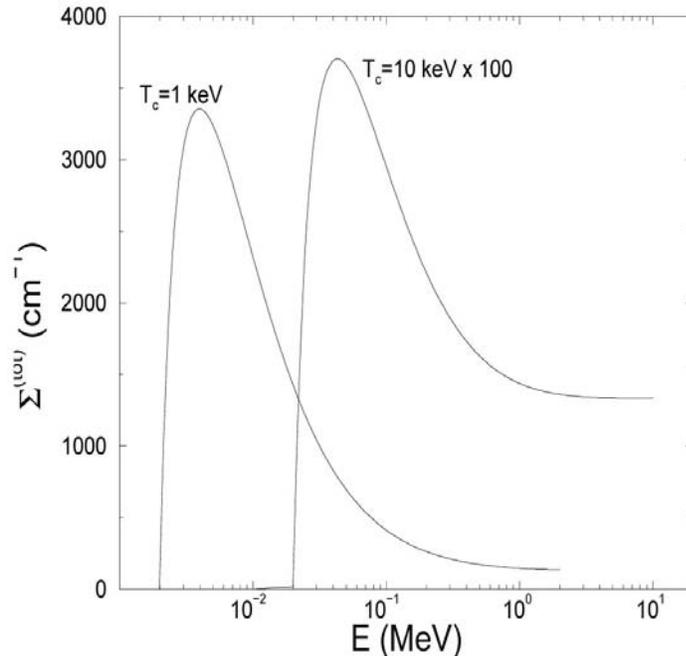
$$\sum^{(tot)}(s') + \sum_f(s') \equiv \sum_0 = \text{constante} \quad (1.195)$$

La longitud de camino a la siguiente interacción, real o ficticia, será simplemente:

$$s = -\frac{\ln r}{\sum_0} \quad (1.196)$$

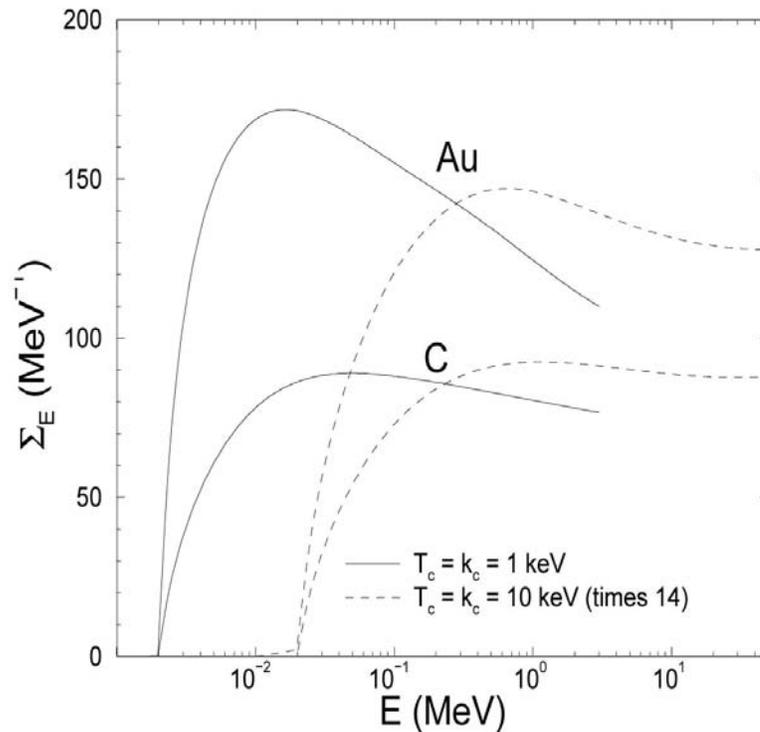
Una vez en el sitio de interacción, la interacción es rechazada con la probabilidad  $1 - \Sigma^{(tot)}(s) / \Sigma_0$  (dicho de otra forma, una interacción ficticia toma lugar con la probabilidad  $1 - \Sigma^{(tot)}(s) / \Sigma_0$ ). Para que esta aproximación trabaje apropiadamente,  $\Sigma_0$  debe ser más grande que  $\Sigma^{(tot)}(s)$  para todas las  $s$ . Basado en la observación que a altas energías la sección eficaz de interacción discreta es una función de incremento monotono de la energía, se usa la sección eficaz para la energía inicial. Esta aproximación falla para energías umbrales para producción de partículas delta menores que  $m/7$ , como lo remarca Rogers [50]. Aunque este problema se ha conocido por mucho tiempo, nunca ha sido corregido. La modificación propuesta por Ma y Nahum en 1992 [51] también es parcial, como puede verse en la referencia [5]. Si se intenta emplear el método de sección eficaz ficticio usando la máxima sección eficaz global como  $\Sigma_0$ , la simulación se vuelve extremadamente ineficiente para valores pequeños de  $T_c$  y  $k_c$ . Esto puede entenderse en la figura 9 que muestra la sección eficaz total para dos distintas energías de corte.

Figura 9: La sección eficaz total para interacciones discretas en grafito, calculadas con  $T_c = k_c = 1\text{keV}$  y  $T_c = k_c = 10\text{keV}$  como una función de la energía cinética



En el sistema EGSnrc la distancia entre interacciones discretas es medida en unidades de la pérdida de energía debido a los procesos sub-umbral. La sección eficaz total relevante es entonces  $\widetilde{\Sigma}^{(tot)}(E) = \Sigma^{(tot)}(E)/L(E)$  (véase la discusión general de la ecuación de transporte en la sección 1.4.1). Esta sección eficaz que se muestra en la figura 10 para grafito y oro y para dos valores distintos de  $T_c$  y  $k_c$ , es mucho más plana que  $\Sigma^{(tot)}$  (al menos para valores pequeños de energía de corte) y tiene un máximo simple. Este máximo está determinado después de que los datos de PEGS están disponibles y se usa al tiempo de la ejecución para muestrear las pérdidas de energía entre interacciones discretas. Esto ahorra la necesidad de evaluar la sección eficaz al inicio de cada bucle de interacción discreta (el TSTEP LOOP) en la subrutina ELECTR. El procedimiento descrito arriba se usa entonces, para calcular la longitud de camino correspondiente.

Figura 10: La sección eficaz total por unidad de pérdida de energía,  $\widetilde{\Sigma}^{(tot)}(E)$ , para interacciones discretas en grafito y oro, calculadas con  $T_c = k_c = 1\text{keV}$  y  $T_c = k_c = 10\text{keV}$  (aumentado en un factor de 14) como una función de la energía cinética





## 2. EL SISTEMA EGSnrc

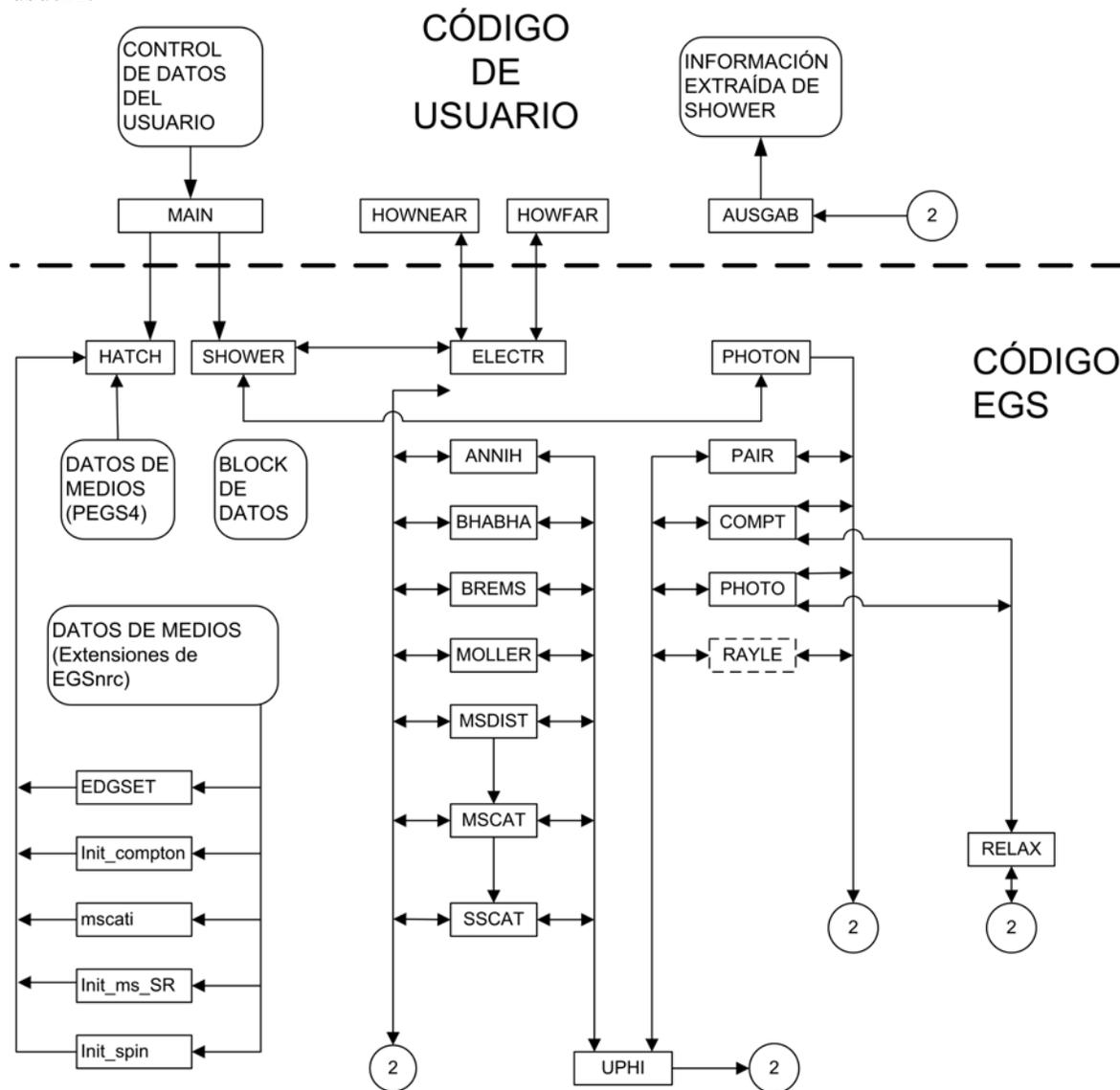
### 2.1. Descripción general de la implementación

El código EGSnrc consiste en sí mismo de dos subrutinas llamadas por el usuario, `HATCH` y `SHOWER`, las que a su vez llaman a otras subrutinas en el código, de las subrutinas que son llamadas, tres son escritas por el usuario, `HOWFAR`, `HOWNEAR` y `AUSGAB`. Esto se ilustra mejor en la figura 11.

Para usar el EGSnrc el usuario debe escribir un código de usuario. Éste, consiste del programa `MAIN` y las subrutinas `HOWFAR`, `HOWNEAR` y `AUSGAB`, las últimas tres determinan la geometría y la salida (registro), respectivamente. Para facilitar su uso, pueden ser incluidos subprogramas auxiliares en el código de usuario. El usuario puede comunicarse con el EGSnrc por medio de varias variables `COMMON`. Usualmente, en `MAIN` se realiza cualquier iniciación necesaria para las rutinas de geometría, `HOWFAR` Y `HOWNEAR`, y se establecen los valores de ciertas variables `COMMON` en EGS, que especifican cosas tales como nombres de los medios a ser usados, las energías de corte deseadas, y las unidades de distancia a ser usadas (por ejemplo, pulgadas, centímetros, longitudes de radiación, etc.). Posteriormente `MAIN` llama a la subrutina `HATCH`, la cual abre al EGS, haciendo una inicialización necesaria por una vez y lee los datos de los materiales para los medios, de un conjunto de datos que se crea previamente por `PEGS`. Cuando la inicialización está completada, `MAIN` llama a `SHOWER` cada vez que se desea. Cada llamada a `SHOWER` tiene como resultado la generación de una historia (también conocida como caso). Los argumentos en `SHOWER` especifican los parámetros de la partícula incidente que inicia la cascada.

Además, se puede usar definiciones macro, que pueden ser incluidas en `MAIN` para controlar la sobre-escritura de varias funciones tanto en el código EGSnrc como en los códigos de usuario.

Figura 11: Estructura del sistema del código EGSnrc cuando es usado por un código de usuario



El sistema EGSnrc tiene por defecto un conjunto de opciones que harán la simulación tan completa y precisa como el sistema es capaz. El usuario posee la capacidad de encender o apagar varias banderas. Por ejemplo, se puede elegir entre el modelo de dispersión Compton Klein Nishina en vez del modelo de dispersión Compton ligado al cambiar las opciones en una bandera.

Una de las características en el sistema EGSnrc es la implementación dentro del código mismo de varias técnicas de reducción de varianza (las dos principales son; rango de rechazo y separación bremsstrahlung), lo que permite un implementación más eficiente. El usuario, si así lo desea, puede ignorar por completo estas características.

En resumen, el usuario se comunica con EGSnrc por medio de:

**Subrutinas:**

- HATCH: para establecer los datos de los medios.
- SHOWER: para iniciar la cascada.
- HOWFAR y HOWNEAR: para especificar la geometría.
- AUSGAB: para el registro y la salida de los resultados y para el control de la reducción de varianza.

**Bloques COMMON:** para cambiar los valores de las variables.

**Definiciones Macro:** para la redefinición de características predefinidas.

En adelante, se hará referencia a la combinación MAIN/HOWFAR/AUSGAB (más los subprogramas auxiliares y macros) como el código de usuario. En las siguientes secciones se discuten estas cosas con mayor detalle.

## 2.2. Los bloques COMMON

A continuación, en las tablas II, III, IV, V, VI y VII se enumeran los bloques COMMON pertinentes al usuario ( y sus correspondientes variables) con una breve descripción de sus funciones. Su uso se discute con mayor detalle en las secciones posteriores. La forma más fácil de declarar cualquiera de los bloques COMMON es con el macro COMIN. Por ejemplo, COMIN/STACK,BOUNDS/;, se expande automáticamente a las formas correctas COMMON/STACK/; y COMMON/BOUNDS/;.

El sistema EGSnrc está codificado completamente, por defecto, usando **IMPLICIT NONE**. Esto significa que todos los parámetros en **COMMON** están escritos explícitamente. Para mayor información, vease la sección 2.3.1.2.

Tabla II: Descripción de los bloques **COMMON** accesibles al usuario en el sistema EGSnrc.

Bloque	Variable	Descripción
<b>COMMON</b>		
BOUNDS	ECUT	Arreglo de regiones de energías de corte para partículas cargadas (total) en MeV.
	PCUT	Arreglo de regiones de energías de corte para fotones en MeV.
	VACDST	Distancia de transporte en el vacío (por defecto= 1.E8).
<b>EGS_VARIANCE_REDUCTION</b>		
	e_max_rr	Arreglo real ( <b>\$MXREG</b> ) de la energía máxima total al cual se hace el rango de rechazo si se ha puesto <b>i_do_rr</b> .
	i_do_rr	Arreglo entero ( <b>\$MXREG</b> ) de banderas para el rango de rechazo en cada región. 0 $\Rightarrow$ se hace (por defecto). 1 $\Rightarrow$ se hace.
	i_play_RR	Bandera que especifica si la Ruleta Rusa se juega en forma global.
	i_survived_RR	Bandera entera, que hace que la Ruleta Rusa sea jugada cada vez. Si todas las partículas sobreviven está se pone en 0 (que es su posición por defecto si no se juega en todo). Se pone en $n$ si $n$ partículas fueran eliminadas vía la Ruleta Rusa en esta interacción. Es 0 si un evento Compton es rechazado.
	prob_RR	Probabilidad de sobrevivencia si se juega la Ruleta Rusa.
	n_RR_warning	Es un contador interno que marca que tan a menudo es consultado con $\text{prob\_RR} \leq 0,0$ . Se imprime una advertencia para la primera vez que <b>\$MAX-RR-WARNING</b> es alcanzado (50, por defecto).
	nbr_split	Para $\text{nbr\_split} > 1$ , <b>nbr_split</b> fotones bremsstrahlung son muestreados cada vez que hay una interacción bremsstrahlung. La ponderación se reduce con $1/\text{nbr\_split}$ . Su valor por defecto es 1.0. Si se pone a 0, no se genera bremsstrahlung y el electrón no pierde energía.

Tabla III: Descripción de los bloques **COMMON** accesibles al usuario en el sistema EGSnrc.

Bloque	Variable	Descripción
<b>COMMON</b>		
EPCONT	EDEP	Energía depositada en MeV (doble precisión).
	TSTEP	Distancia a la proxima interacción (en cm).
	TUSTEP	Longitud total de paso (curva) solicitado antes de chequear la geometría.
	USTEP	Longitud de paso recto, se calcula desde TUSTEP.
	TVSTEP	Longitud de paso real (curva)de transporte.
	VSTEP	Longitud de paso recta después del truncamiento de la geometría.
	IDISC	Bandera de descarte del usuario(que se pone en HOWFAR). IDISC> 0 significa que el usuario requiere que se descarte inmediatamente, IDISC< 0 significa que el usuario requiere descartar después de que se completa el transporte. IDISC=99 o -99 significa que se generan fotones de aniquilación cuando los positrones son descartados.
	IROL	Índice de la región previa.
	IRNEW	Índice de región nueva.
	RHOF	Valor de corrección de densidad (por defecto =1), (esto es, la relación de la densidad real con la densidad del conjunto de datos).
	EOLD	Energía de la partícula cargada (total) al inicio del paso en MeV.
	ENEW	Energía de partícula cargada (total) al final del paso en MeV.
	IAUSFL	Arreglo (de 29) de banderas para encender varias llamadas en AUSGAB. (Veáse la tabla X).
	EKE	Energía cinética del electrón en MeV.
	ELKE	Logaritmo natural de EKE (no disponible para un paso en el vacío).
	GLE	Logarimo natural de la energía del fotón.
	E_RANGE	Para pasos del electrón IARG=0. es el rango de rechazo del electrón en unidades actuales (veáse la sección 2.9.1).

Tabla IV: Descripción de los bloques COMMON accesibles al usuario en el sistema EGSnrc.

Bloque	Variable	Descripción
COMMON		
ET-CONTROL		Control de transporte de electrones.
	SMAXIR	Arreglo (\$MXREG que define el límite superior en el tamaño del paso en cada región (en las unidades que haya sido definido DUNIT. (Por defecto= 1.E10).
	ESTEPR	Arreglo (\$MXREG que define la máxima fracción de pérdida de energía por paso de electrón en base a regiones. (por defecto = 1.0).
	ESTEPE	Límite global de pérdida de energía. (Por defecto = 0.25)
	XIMAX	Máximo del primer momento GS por paso (aproximadamente la mitad del cuadrado del ángulo MS) (por defecto = 0.5)
	SKINDEPTH _FOR_BCA	Distancia desde una frontera (en un MFP elastico) en el cual se cambia a uno de los algoritmos de cruce de fronteras (BCA). (por defecto = 3). Si se pone inicialmente en 0 por el usuario y BCA_ALGORITHM= 1, entonces el código asigna un valor consistente con BLCMIN en PRESTA-I, de otro modo es 3.0
	TRANSPORT _ALGORITHM	Bandera entera que dice que algoritmo de transporte se usará, 0 ⇒ PRESTA-II; 1 ⇒ PRESTA-I. (Por defecto = 0).
	BCA _ALGORITHM	Bandera entera que dice que BCA se usará. 0 ⇒ usa el algoritmo exacto (dispersión simple) dentro de una frontera SKINDEPTH_FOR_BCA. 1 ⇒ usa dispersión multiple pero sin deflecciones laterales dentro de un frontera SKINDEPTH_FOR_BCA. Por defecto es 0.
	SPIN_EFFECTS	Variable lógica, <code>.true.</code> ⇒ usa las teorías de dispersión simple y múltiple que incluyen efectos relativisticos de spin; <code>.false.</code> ⇒ usa las teorías de dispersión simple y múltiple basadas en la dispersión de Rutherford. (Por defecto es <code>.true.</code> ).

Tabla V: Descripción de los bloques COMMON accesibles al usuario en el sistema EGSnrc.

Bloque	Variable	Descripción
COMMON		
MEDIA	MEDIA	Arreglo (24, \$MXMED) de nombres de medios.
	NMED	Número de medios que se usarán.
	IRAYLM	Arreglo (\$MXMED) de banderas para encender (=1) la dispersión coherente (Rayleigh) en varios medios. Se pone en HATCH basado en los valores de IRAYLR.
	RLC	Arreglo (\$MXMED) que contiene la longitudes de radiación de los medios en cm.
	RLDU	Arreglo (\$MXMED) que contiene la longitudes de radiación de los medios en unidades de distancia establecida en DUNIT.
	RHO	Arreglo (\$MXMED) que contiene la densidad de los medios en $g/(cm)^3$ .
MISC	MED	Arreglo (\$MXMED) que contiene el índice de los medios para cada región.
	DUNIT	La unidad de distancia que será usada. DUNIT=1 (por defecto) establece todas las distancias en cm. DUNIT=2.54 establece todas las distancias en pulgadas.
	KMPI	Número de unidad Fortran (por defecto = 8) desde el cual se leen los datos de los materiales.
	KMPO	Número de unidad Fortran (por defecto = 12) en el cual se muestran los datos de los materiales (por ejemplo, salida impresa, etc.).
	RHOR	Arreglo (\$MXMED) que contiene la densidad para cada región ( $g/(cm)^3$ ). Si esté es diferente que la densidad por defecto para el medio en la región correspondiente, las secciones eficaces y los poderes de frenado (con excepción del efecto de densidad), son puestos a escala apropiadamente.
	IRAYLR	Arreglo (\$MXMED) de banderas para encender (=1) la dispersión coherente (Rayleigh) en varias regiones. (Por defecto = 0 $\Rightarrow$ apagado).
RANDOM	IXX, JXX	Cuando se usa el generador de números al azar RANLUX, el usuario no pasa nada por medio de este COMIN. Cuando usa RANMAR, IXX y JXX, son pasados. Al principio las semillas de números al azar, se vuelven a los punteros una vez el generador es inicializado. $0 < IXX \leq 31328$ y $0 < JXX \leq 30081$ .

Tabla VI: Descripción de los bloques COMMON accesibles al usuario en el sistema EGSnrc.

Bloque	Variable	Descripción
COMMON		
STACK		Nota: Esté bloque COMMON contiene la información sobre las partículas que están actualmente en el SHOWER. De las siguientes variables todas son arreglos (\$MXSTACK) excepto NP, NPold y LATCHI.
	E	Energía total en MeV (Doble precisión).
	X, Y, Z	Posición de las partículas en unidades establecidas por DUNIT.
	U, V, W	Cosenos directores de las partículas.
	DNEAR	Distancia a la frontera más baja desde (X, Y, Z) a la superficie más cercana de la región actual.
	WT	Ponderación estadística de la partícula actual (por defecto = 1.0). Se usa en conjunto con las técnicas de reducción de varianza como lo determina el usuario.
	IQ	Carga entera de la partícula (+1,0,-1).
	IR	Índice de la región actual de la partícula.
	NP	El puntero de pila. También, el número de partículas en la pila.
	NPold	El valor de NP previo a una interacción.
	LATCH	Variable entera que se usa en las historias de camino.
	LATCHI	Valor inicial de LATCH cuando el SHOWER es llamado.
TRESH		
	RMT2	Dos veces la energía de la masa del electrón en reposo, en MeV.
	RMSQ	El cuadrado de la energía de la masa del electrón en reposo, en (MeV) <sup>2</sup> .
	AP	Arreglo (\$MXMED) que contiene la más baja energía de corte de un fotón en PEGS para cada medio, en MeV.
	UP	Arreglo (\$MXMED) que contiene la más alta energía de corte de un fotón en PEGS para cada medio, en MeV.
	AE	Arreglo (\$MXMED) que contiene la más baja energía de corte de una partícula cargada en PEGS para cada medio, en MeV.
	UE	Arreglo (\$MXMED) que contiene la más alta energía de corte de una partícula cargada en PEGS para cada medio, en MeV.
	TE	Es igual que AE, excepto que es la energía cinética más que la energía total.
	THMOLL	Arreglo (\$MXMED) que contiene la energía umbral de Moller para cada medio, en MeV. (THMOLL=AE+TE.

Tabla VII: Descripción de los bloques COMMON accesibles al usuario en el sistema EGSnrc.

Bloque	Variable	Descripción	
COMMON	UPHIOT	THETA	ngulo de dispersión de la colisión (polar).
		SINTHE	Seno de THETA.
		COSTHE	Coseno de THETA.
		SINPHI	Seno de PHI. (ngulo de dispersión azimutal de la colisión)
		COSPHI	Coseno de PHI.
		PI	Pi.
		TWOPI	Dos veces Pi.
	USEFUL	MEDIUM	Índice del medio actual. Si es vacío, entonces MEDIUM = 0.
MEDOLD		Índice de la región previa.	
RM		Energía de la masa del electrón en reposo, en MeV.	
PRM		Precisión de la energía de la masa del electrón en reposo, en MeV (Doble precisión).	
PRMT2		Dos veces PRM. (Doble precisión).	
PZERO		0.0 preciso (Doble precisión).	
USER		Nulo por defecto, pero disponible en ELECTR, PHOTON y HATCH, permite a los usuarios pasar datos in las rutinas de transporte (por ejemplo, datos de la geometría, datos de la reducción de varianza, etc.).	

Además de los COMIN descritos anteriormente, hay varios COMIN que son normalmente de uso interno del EGSnrc, los cuales tienen una o dos variables que pueden requerir acceso para controlar varias opciones dentro del EGSnrc. En la tabla VIII se hace un resumen de los COMIN que son necesarios para controles adicionales de los parámetros de transporte.

Tabla VIII: Descripción de los bloques **COMMON** accesibles opcionalmente al usuario en el sistema EGSnrc. No son descritos todos los elementos en cada **COMIN** puesto que muchos de ellos no son accesibles al usuario.

Bloque COMMON	Variable	Descripción
EDGE	IEDGFL	Arreglo entero ( <b>\$MXREG</b> ) que especifica si se modela una relajación atómica después de un evento de foto-absorción o de un evento de ligadura Compton. Cuando está encendido, se modelan explícitamente fotones fluorescentes, electrones Auger y electrones Coster-Kroning por encima del umbral. (1 $\Rightarrow$ si (por defecto), 0 $\Rightarrow$ no).
	IPHTER	Arreglo entero ( <b>\$MXREG</b> ) que especifica si se muestrea la distribución angular de los foto-electrones en cada región. (1 $\Rightarrow$ si (por defecto), 0 $\Rightarrow$ no).
COMPTON- DATA	IBCMP	Arreglo entero ( <b>\$MXREG</b> ) que especifica si se incluyen los efectos de ligadura y ensanchamiento Doppler en los eventos de dispersión Compton. (1 $\Rightarrow$ si (por defecto), 0 $\Rightarrow$ no).
BREMPR	IBRDST	Bandera que determina la selección del ángulo de un fotón bremsstrahlung. 0 $\Rightarrow$ se muestrea la distribución angular; 1 $\Rightarrow$ se muestrea la distribución angular de Kotch y Motz. Por defecto es 1. Para $< 0$ el ángulo es el mismo que el del fotón, por lo que el usuario lo puede definir en una llamada a <b>AUSGAB</b> .
	IPRDST	Bandera que determina la selección de los ángulos del electrón/positrón después de un evento de producción de pares. 0 $\Rightarrow$ usa la aproximación de ángulo fijo. 1 $\Rightarrow$ se se muestrea la distribución angular. 2 $\Rightarrow$ se muestrea la distribución angular completa. Por defecto es 1.
	<b>ibr_nist</b>	Bandera entera que determina el diferencial de sección eficaz a muestrear después de que ocurre un evento bremsstrahlung. 0 $\Rightarrow$ se usa Bethe-Heitler. Este es por defecto. 1 $\Rightarrow$ se usa la base de datos NIST del reporte ICRU 37.

### 2.3. La secuencia de operaciones

A continuación se muestra la secuencia de operaciones necesaria para una operación correcta del EGS:

**Paso 0** Se llama a `egs_init` para la inicialización del archivo (para más detalles veáse [8]).

**Paso 1** Sobreescritura por el usuario de Macros y predeterminados EGS. (veáse la sección 2.3.1).

**Paso 2** Inicialización de la llamada a Pre-HATCH. (Veáse la sección 2.3.2).

**Paso 3** Llamada a HATCH. (Veáse la sección 2.3.3).

**Paso 4** Se inicializa HOWFAR y HOWNEAR. (Veáse la sección 2.3.4).

**Paso 5** Se inicializa AUSGAB. (Veáse la sección 2.3.5).

**Paso 5.b** Se inicializa la reducción de varianza. (Veáse la sección 2.3.6).

**Paso 6** Se determinan los parámetros de la partícula incidente . (Veáse la sección 2.3.7).

**Paso 7** Se llama a SHOWER. (Veáse la sección 2.3.8).

**Paso 8** Salida de los resultados. (Veáse la sección 2.3.9).

**Paso 9** Se llama a `egs_finish` como última declaración ejecutable. Veáse la referencia [8] para detalles.

Las restricciones en el orden de estas operaciones son las siguientes:

1. El paso 1 debe preceder al uso de los macros EGS por el usuario.
2. El paso 0 debe ser la primera declaración ejecutable y así es usualmente después del paso 1 y posiblemente en el paso 2
3. El paso 2 debe preceder al paso 3.
4. Los pasos 3 al 6 deben preceder al paso 7.
5. El paso 7 puede repetirse tan a menudo como se desee, dependiendo de si la información se quiere en `showers` simples o en `showers` múltiples.

6. Al menos un paso 7 debe preceder al primer paso 8.

Los detalles de los pasos anteriores se dan en las siguientes subsecciones. Se recomienda fuertemente que el usuario repita TODOS los parámetros de ingreso en la lista del archivo de salida para asegurarse que se tiene un registro completo de la corrida.

### **2.3.1. Sobreescritura por el usuario de macros y predeterminados del EGS (Paso 1)**

Los macros EGS que el usuario puede sobrescribir incluyen los siguientes:

#### **2.3.1.1. \$CALL-HOWNEAR(#)**

Para que haya compatibilidad con los códigos de usuario EGS4/PRESTA, el uso de la subrutina HOWNEAR es una llamada a un macro en EGSnrc. No hay una definición por defecto de macro, pero se sugiere la siguiente:

```
REPLACE {$CALL-HOWNEAR(#);} WITH CALL HOWNEAR({P1},X(NP),Y(NP),Z(NP),IRL);
```

El usuario puede elegir definir un macro equivalente. El parametro que debe ser retornado por el macro es la distancia más corta a cualquier frontera desde la posición actual. Véase la sección 2.5 que especifica completamente el macro o subrutina.

#### **2.3.1.2. \$IMPLICIT-NONE, \$REAL, \$INTEGER**

El sistema EGSnrc está codificado con \$IMPLICIT-NONE; en todas las subrutinas. Esto significa que el usuario está pasando una variable en el sistema EGSnrc al añadirla a una definición COMIN, se debe especificar explícitamente el tipo de tal variable.

Para deshabilitar esta característica se añade la siguiente declaración en el código de usuario:

```
REPLACE {$IMPLICIT-NONE;} WITH {;}
```

Se recomienda fuertemente que el código de usuario adopte el uso de `$IMPLICIT-NONE`; puesto que esté encontrara cualquier error de codificación y previene la colisión accidental de variables.

Además del uso de `$IMPLICIT-NONE`; , el sistema EGSnrc hace uso de los macros `$REAL` y `$INTEGER` dondequiera que se hayan definido variables reales o enteras, además del uso de funciones genéricas intrínsecas tales como `máx` y `mín`. Por defecto, `$REAL` y `$INTEGER`, están definidas como `REAL*4` e `INTEGER*4`. Sin embargo, puede hacerse que el código entero corra en doble precisión, añadiendo los siguientes macros:

```
REPLACE {$REAL} WITH {;REAL*8}
REPLACE {$INTEGER} WITH {;INTEGER*8}
```

Sin embargo, esto requiere que todo tipo de declaraciones en el código de usuario se usen donde sea los macros `$REAL` y `$INTEGER`.

### 2.3.1.3. Dimensiones de los arreglos

`$MXMED` Número máximo de medios (por defecto = 10).

`$MXREG` Número máximo de regiones (por defecto = 2000).

`$MXSTACK` Número máximo de partículas en la pila a la vez (por defecto = 40).

Por ejemplo, para extender el número de medios a 25, se incluye la siguiente declaración en el código de usuario:

```
REPLACE {$MXMED} WITH {25}
```

### 2.3.1.4. Inicialización de números al azar

El generador de números al azar `RANLUX`, por defecto, no requiere inicialización. Sin embargo, para usar el nivel superior al de por defecto, o una semilla inicial distinta, se debe inicializar usando:

```
$INITIALIZE RNG USING luxury_level AND iseed;
```

Los `luxury_level` van de 0 a 4, se sabe que el valor 0 causa problemas con los cálculos de EGSnrc. El valor de `iseed` va de 1 a 1073741824 ( $2^{30}$ ).

Si se ha seleccionado el generador de números al azar RANMAR (por medio del archivo `.configuration`, entonces, éste debe ser inicializado antes de ser usado por primera vez. Puede ser acompañado de la declaración siguiente:

```
$RNG-INITIALIZATION;
```

la cual inicializa RANMAR usando cualquiera sea el valor actual de `IXX` y `JXX`, y usa los valores por defecto, si estos no han sido cambiados (estos son pasados en `COMIN/RANDOM/;`). Alternativamente puede usarse la siguiente declaración:

```
$INITIALIZE RNG USING IXX AND JXX;
```

que cumple el mismo objetivo. Los valores están restringidos a:  $0 < \text{IXX} \leq 31328$  y  $0 < \text{JXX} \leq 30081$  que son los valores por defecto.

El generador de números al azar puede ser inicializado en cualquier pasop previo a la llamada de `SHOWER` en el paso 7, o previo a su primer uso en el código de usuario.

#### 2.3.1.5. `$SET-RHOF`

En la sección 2.3.2 se explica el uso de `RHOF`, a cada paso el sistema EGSnrc llama a un macro `$SET-RHOF` el cual evalúa la relación de densidad del punto con la densidad dada en el archivo de datos PEGS4 para el material en la región. El uso de `RHOR` permite proporcionar la tatalidad de la densidad de una región a una nueva densidad. Si se tiene problema en cual es la densidad que está variando dentro de la región, está puede ser manejada al reemplazar el macro por defecto:

```
REPLACE {$SET-RHOF;} WITH {RHOF=RHOR(IRL)/RHO(MEDIUM);
```

para que en cualquier lugar del código se pueda regresar a la relación local de densidad. Si, de otro modo no se quiere usar el proporcionamiento de densidad del todo en el código de usuario, se puede reemplazar por el siguiente:

```
REPLACE {$SET-RHOF;} WITH {RHOF = 1.0;}
```

dado que esté guarda una división en cada paso.

### 2.3.1.6. Senos y cosenos

Para incrementar la velocidad de cálculo, los senos y cosenos no se determinan siempre de la función (por ejemplo, `SINTHE= SIN(THETA)` por defecto en el EGS4. En efecto, el seno es extraído de una tabla de senos y el coseno se determina desde el seno. Sin embargo, se encontró que lleva a muy pequeños errores para ángulos cercanos a los 0 grados [40]. Esto se supera con las máquinas modernas, donde la velocidad de las evaluaciones de los senos y cosenos es tan rápido como el método de extraer en tablas, por lo que se ha revertido las evaluaciones directas de las funciones. Para máquinas un poco antiguas la característica de extracción de tablas gana tanto como el 40% del tiempo del CPU. Si se está usando una de estas máquinas, vale la pena usar el método de extracción de tablas a menos que el cálculo de pequeños ángulos sea crítico. Para reimplementar esto, se usan los siguientes dos macros en el paso 1:

```
REPLACE {EVALUATE#USING SIN(#);} WITH {{P1}=SIN1(L{P2})*{P2}+SINO(L{P2});}}
REPLACE {$SET INTERVAL#,SINC} WITH {L{P1} = SINC1*{P1}+SINCO;}}
```

Debe señalarse que debido a la precisión envuelta en el método de extracción en tablas, los cosenos directores pueden estar un poco no normalizados. Dependiendo del problema que se tenga puede llevar a soluciones incorrectas -tales como cuando están envueltos simultáneamente en ordenamiento angular de partículas. El problema puede ser remediado generalmente, al renormalizar los cosenos directores previo a usarlos.

### 2.3.1.7. Transporte de partículas cargadas

En la subrutina `ELECTR`, se ha incluido el modelo `$CHARGED-TRANSPORT` para permitir el transporte de partículas cargadas por otros medios que los usados en esta versión. Por ejemplo:

```
REPLACE {CHARGED-TRANSPORT;} WITH {CALL MYTRAN;}
```

la cual puede ser incluida en el paso 1 del código de usuario, y será necesario que el usuario provea la subrutina `MYTRAN` apropiada.

### 2.3.2. Inicialización de la llamada a Pre-HATCH

Este paso consiste en poner a las variables EGS COMMON que son usadas por HATCH en sus operaciones de inicialización. Todas estas variables son inicializadas a algún valor razonable en el subprograma BLOCK DATA. Por consiguiente, si se desean valores distintos, deben ser puestos en el código ejecutable. Al mismo tiempo, se incluyen los bloques COMMON (i.e. BOUNDS, MEDIA MISC) en la sección de declaración del programa MAIN del código de usuario. Estas variables son:

**NMED** Esta variable debe ser inicializada al número de medios a ser usados en la generación del SHOWER (por defecto = 1).

**NMEDIA** Este arreglo contiene los nombres de los medios requeridos y está dimensionado MEDIA(24, \$MXMED), donde \$MXMED es un macro EGS cuyo valor por defecto es 10, el cuál es el número máximo de medios que se le asigna al espacio de arreglo (véase la sección 2.3.1). Los nombres de los medios son guardados en MEDIA en una especificación A1 de campo alfanúmerico para asegurar portabilidad. Cada nombre de un medio tiene 24 caracteres de longitud. Para conveniencia de quienes compilan con los macros EGS, éste es un macro que genera *strings* A1. Por ejemplo:

```
$S'STRING' se expande a 'S','T','R','I','N','G'.
```

Una manera de implementar lo anterior en el código de usuario se muestra en el siguiente ejemplo, el cual es para tres medios: plomo, hierro y aire a NTP (condiciones normales de presión y temperatura). Se declara un arreglo temporal y se inicializa en MAIN por:

```
CHARACTER*4 TEMP(24,3)/$S'PB', 22* ", $S'STEEL', 19*", $S'AIR AT  
NTP', 14*"/;
```

y en el paso 2 se pone:

```
NMED=3;          "número de medios usados"  
DO J=1,NMED     [DO I=1,24[MEDIA(I,J)=TEMP(I,J);]]
```

**MED** Este arreglo, que está dimensionado `MED($MXREG)`, contiene los índices de los medios para cada región (los valores por defecto son 1 para todos los `$MXREG`). Un medio de índice cero significa que una región está llena con vacío. Por ejemplo, si se consideran los tres medios del ejemplo anterior junto con el vacío para definir cuatro regiones, en el paso 2 del código de usuario se puede poner:

```
MED(1)=3; "la primera región es aire a NTP"  
MED(2)=1; "la segunda región es plomo"  
MED(3)=0; "la tercera región es vacío"  
MED(4)=2; "la cuarta región es acero"
```

**ECUT y PCUT** Estos arreglos contienen las energías de corte (en MeV) para las partículas cargadas y fotones, respectivamente, para cada región. Estos arreglos están dimensionados `ECUT($MXREG)` y `PCUT($MXREG)` y tienen temporalmente los valores por defecto 0.0 en `BLOCK DATA`. A la vez que los datos para cada medio son generados en el código preprocesador (PEGS), los dos parámetros (**AE** y **AP**) son puestos a las más bajas energías a las que se desea sean transportados los electrones y fotones. Cuando la subrutina de EGS, **HATCH** es llamada, estos valores de **AE** y **AP** son leídos y **HATCH** actualiza los valores de **ECUT** y **PCUT** de tal forma que se elige el máximo del actual (**ECUT,AE**) y (**PCUT,AP**). Por consiguiente, de esta manera, al asignar los valores de **ECUT** y **PCUT** previo a la llamada de **HATCH**, el usuario puede aumentar (y no disminuir) las energías de corte. Por ejemplo; si se consideran las cuatro regiones del ejemplo anterior; la declaración:

```
DO I=1,3 [ECUT(I)=10.0; PCUT(I)=100.0;]
```

al poner la declaración anterior en el paso 2 del código de usuario, da como resultado historias de partículas cargadas que son terminadas a 10.0 MeV (energía total) e historias de fotones que son terminadas a 100.0 MeV, solamente en las tres primeras regiones. En la cuarta región los cortes respectivos se hacen en **AE** y **AP** como se estableció en **PEGS**. `COMMON/BOUNDS/` deberá ser declarado en la rutina que llama a **HATCH**, para pasar **ECUT** y **PCUT** a **HATCH**. Combinado con `COMMON/MEDIA/` y `COMMON/MISC/`, la definición macro debe quedar como sigue:

```
COMIN/BOUNDS,MEDIA,MISC/;
```

**DUNIT** Este parámetro determina la unidad de distancia que se usará en la simulación del **SHOWER** (la unidad por defecto es cm si **DUNIT=1.0**). En el ingreso a **HATCH** este parámetro será interpretado como sigue:

**DUNIT>0** significa que **DUNIT** es la longitud de la unidad de distancia en centímetros. Por ejemplo, al hacer **DUNIT=2.54** significa que la unidad de distancia será una pulgada.

**DUNIT<0** significa que el valor absoluto de **DUNIT** será interpretado como el índice del medio. La unidad de distancia a ser usada será entonces la longitud de radiación para este medio, y en la salida de **HATCH** será igual a la longitud de radiación del medio en centímetros. El uso obvio de esta característica es solamente para el caso de un medio con **DUNIT=-1**. De ahí que el **SHOWER** esté expresado completamente en unidades de radiación del primer medio. La unidad de distancia usada por **PEGS** es la longitud de radiación, después de que **HATCH** interpreta a **DUNIT**, proporciona todos los tipos de datos de distancia, por lo que todas las operaciones subsecuentes serán realizadas correctamente con todas las distancias en unidades de **DUNIT** (valor por defecto = 1.0 cm).

**IRAYLR** Los elementos en este arreglo entero (dimensionados **IRAYLR(\$MXREG)** y pasados en **COMMON/MISC/**) son puestos a 1 previo a la llamada de **HATCH** si la dispersión coherente se hace en una región en particular. La ejecución es terminada si los datos Rayleigh no están incluidos en los datos de **PEGS**. El valor por defecto es 0. (Véase la sección 1.2.4).

**RHOR** Para cada medio ingresado, hay una densidad por defecto, **RHO(MED)**. El usuario puede asignar una densidad arbitraria en cada región geométrica al inicializar el arreglo **RHOR(\$MXREG)**. Entonces, el sistema **EGSnrc** hace las proporciones apropiadas de todas las secciones eficaces en cada región. Esto es hecho al calcular el valor de **RHOF = RHOR(IRL)/RHO(MED)** en cada paso de los cálculos, usando el macro **\$SET-RHOF** (sección 2.3.1.5). El arreglo **RHOR** está inicializado en cero. Si el usuario no inicializa **RHOR**, en **HATCH** este se pone en **RHO(MED)** usando los materiales asignados a cada región. En este caso **RHOF** es siempre la unidad.

Notese que esta proporción no es perfecta puesto que los poderes de frenado de los electrones no están proporcionados, si se necesita un trabajo muy preciso, entonces se necesita definir una variedad de medios con diferentes densidades.

**IBCMP** Los elementos en este arreglo entero (dimensionados `IBCMP($MXREG)` y pasados en `COMMON/COMPTON-DATA/` son puestos a 0 previo a la llamada a `HATCH` si Klein Nishina es modelado en una región en particular, como se oponen al uso del formalismo de ligadura Compton por defecto. Los efectos de ligadura pueden ser importante para algunas simulaciones abajo de 1 MeV pero por encima son raramente importantes y su cálculo solamente toma tiempo extra. El valor por defecto es 1 (i.e. se usa dispersión Compton ligada). Véase la sección 1.2.2.

**IEDGFL** Los elementos en este arreglo entero (dimensionados `IEDGFL($MXREG)` y pasados en `COMMON/EDGE/` son puestos a 0 previo a la llamada a `HATCH` si no se quiere que se modele una relajación atómica en una región dada. La relajación considera la creación de fotones fluorescentes de las capas K, L, M y N; electrones Auger y electrones Coster-Kroning. La relajación es modelada actualmente después de los eventos foto-eléctrico y compton ligado, aunque puede ser extendido a otros procesos a la vez. La modelación de relajación se hace por defecto.

Cuando no se simula la relajación y hay un evento foto-eléctrico, toda la energía del fotón es transferida al foto-electrón. Este difiere del EGS4 en que la energía de ligadura es sustraída y depositada en el punto. Cualquier opción para la energía del foto-electrón es una aproximación, de la experiencia se sabe que la transferencia de toda la energía al foto-electrón es más preciso que poner toda la energía en el punto. Si este transporte de energía es importante del todo, se debe hacer la relajación y modelarse correctamente. (Véase la sección 1.3).

**SPIN\_EFFECTCS** Es una variable lógica que se pasa en `COMMON/ET-Control` que debe ser puesta en falso previo a la llamada a `HATCH` si se quiere excluir los efectos de spin en la dispersión de electrones simple y múltiple. Su valor por defecto es `.true.` para una precisión alta. Véase la sección 1.4.7.2.

`ibr_nist` Es una bandera entera que se pasa en `COMIN/BREMPR/` la cual debe ser puesta previo a una llamada a `HATCH`. Sus valores determinan como será muestreada la energía de los fotones bremsstrahlung.  $0 \Rightarrow$  se muestrean las secciones eficaces Bethe-Heither usadas en EGS4; éste es su valor por defecto.  $1 \Rightarrow$  se muestrean las secciones eficaces bremsstrahlung de la base de datos de NIST [30, 31]. Véase la sección 1.4.2.2

`IBRDST` Es una bandera entera que se pasa en `COMIN/BREMPR/` que especifica que tipo de distribución angular se muestrea cuando se crea un fotón bremsstrahlung.  $0 \Rightarrow$  se muestrea el término principal en la distribución angular de Kotch y Motz.  $1 \Rightarrow$  se muestrea la distribución angular de Kotch y Motz; éste es el valor por defecto. Véase la sección 1.4.8.

`IPRDST` Es una bandera entera que se pasa en `COMIN/BREMPR/` que especifica que tipo de distribución angular se muestrea cuando ocurre un evento de producción de pares.  $0 \Rightarrow$  se usa un ángulo fijo wrt, la dirección del fotón de  $m/E_\gamma$ , ésta es la opción por defecto en EGS4.  $1 \Rightarrow$  se usa término principal en la distribución angular [17]. Éste es el valor por defecto.  $2 \Rightarrow$  se usa la distribución angular de Motz y otros [12] como la implementa Bielajew [17]. Véase la sección 1.2.1.3.

`IPHTER` Los elementos de éste arreglo (dimensionado `IPHTER($MXREG)` y pasados en `COMMON/EDGE/` son puestos a cero si no se quiere que se modele una distribución angular de foto-electrón [27]. Ésta distribución angular se modela por defecto. Esta rareza, si sucede, tiene un efecto en la simulación puesto que de cualquier forma los electrones de baja energía experimentan demasiada dispersión múltiple. Éste arreglo no necesita ser inicializado hasta antes de la llamada a `SHOWER`. Véase la sección 1.2.3.3.

`BCA_ALGORITHM` Es una bandera entera que se pasa en `COMMON/ET-Control/` que debe configurarse previo a la llamada a `HATCH`, para especificar que algoritmo de cruce de frontera (BCA) se usará.  $1 \Rightarrow$  se usa el algoritmo exacto (dispersión simple) dentro de una distancia de `SKINDEPTH_FOR_BCA` de cualquier frontera; éste es el valor por defecto.

2  $\Rightarrow$  aproximación a una frontera usando dispersión múltiple dentro de una distancia de `SKINDEPTH_FOR_BCA` de cualquier frontera, se ignoran las deflecciones laterales. Véase la sección 1.4.9.

`SKINDEPTH_FOR_BCA` Es una variable real que se pasa en `COMMON/ET-Control/` que debe ser ajustada solamente previo a la llamada a `HATCH`, para especificar la distancia desde una frontera (en camino libre medio elástico) al cual se cambia el algoritmo de cruce de frontera. Su valor está inicializado en 3.0. Si el usuario lo pone en 0.0 mientras se está usando el BCA exacto, éste se reajusta a 3.0 puesto que el valor 0.0 significa que las partículas nunca cruzarán una frontera. Si se usa el BCA `PRESTA-I` y `SKINDEPTH_FOR_BCA` está puesto en cero, el código usará el valor de `BCLMIN` que utiliza `PRESTA-I`. Si `SKINDEPTH_FOR_BCA` está ajustado a un valor grande y `TRANSPORT_ALGORITHM` está en 0 lo que significa que el algoritmo `PRESTA-II` está siendo usado, entonces se hace un claculo completo de dispersión simple. En contraste, si `SKINDEPTH_FOR_BCA` está ajustado a un valor grande y el valor de `TRANSPORT_ALGORITHM` es 1, se ignorarán las deflecciones laterales en cualquier lugar. Véase la sección 1.4.9.

`TRANSPORT_ALGORITHM` Es una bandera entera que se pasa en `COMMON/ET-Control/` que debe ajustarse previo a la llamada a `HATCH` para especificar que algoritmo de transporte de electrones se usará. 0  $\Rightarrow$  se usa el algoritmo `PRESTA-II`, éste es el valor por defecto. 1  $\Rightarrow$  `PRESTA-I`. Véase la sección 1.4.8.

`ESTEPE` Es una variable real que se pasa en `COMMON/ET-Control/` que debe ajustarse previo a la llamada a `HATCH` que especifica la máxima fracción global de perdida de energía en un paso de electrón debido a la pérdida continua de energía. El valor por defecto, 0.25, que es también el máximo valor permitido no debe ser cambiado a menos que se esté usando el `TRANSPORT_ALGORITHM PRESTA-I`.

`ESTEPR` Los elementos de éste arreglo real (dimensionados `ESTEPR($MXREG` y pasados en `COMMON/ET-Control/`) son los mismos que `ESTEPE` excepto que se aplican solamente a una región local. El valor global de `ESTEPE` sobrescribe los valores de `ESTEPR`. El valor por defecto es 1.0 lo que significa que no tiene efecto.

**SMAXIR** Los elementos de este arreglo real (dimensionados **MAXIR(\$MXREG** y pasados en **COMMON/ET-Control/**) determina el paso máximo de un electrón en la región en cualquiera unidad definida en **DUNIT**. El valor máximo es muy grande. Este parámetro es necesario solamente si se usa el algoritmo de transporte **PRESTA-I**.

**XIMAX** Esta variable real es pasada en **COMMON/ET-Control/** es el máximo del primer momento **GS** por paso (aproximadamente la mitad del promedio de dispersión múltiple del cuadrado del ángulo, por defecto es 0.5). Véase la sección 1.4.8. No debe ser cambiado.

### **2.3.3. Llamada a HATCH (Paso 3)**

Este paso es muy simple (**HATCH** no tiene argumentos), por lo que solo se debe hacer lo siguiente:

```
CALL HATCH;
```

El siguiente es un mensaje de salida típico cuando **DUNIT** no ha sido cambiado (y los datos Rayleigh están incluidos en el archivo):

```
RAYLEIGH DATA AVAILABLE FOR MEDIUM 1 BUT OPTION NOT REQUESTED.  
EGSnrc SUCCESSFULLY 'HATCHED' FOR ONE MEDIUM.
```

Sin embargo, si el usuario ha ajustado a **DUNIT=2.54** previo a la llamada a **HATCH**, el mensaje se parecerá al que se muestra a continuación (dos medios, sin datos Rayleigh):

```
DUNIT REQUESTED&USED ARE: 2.54000E+00 2.54000E+00(CM.)  
EGS SUCCESSFULLY 'HATCHED' FOR 2 MEDIA.
```

Por otro lado, una falla en “hatch”, dará el siguiente mensaje:

```
END OF FILE OF UNIT 12  
PROGRAM STOPPED IN HATCH BECAUSE THE  
FOLLOWING NAMES WERE NOT RECOGNIZED:  
  
                (list of names)
```

seguido de un alto en **HATCH**. [Nota: no se puede pedir el mismo medio dos veces.]

#### 2.3.4. Inicialización de HOWFAR y HOWNEAR (Paso 4)

Como se estableció previamente las rutinas HOWFAR y HOWNEAR son las que especifican la geometría de las regiones. Si bien, la inicialización de los puntos que son usados en HOWFAR y HOWNEAR pueden ser hechos en cualquier paso previo a la llamada de SHOWER (paso 7), el paso 4 permite un espacio en MAIN para considerar si dicha inicialización necesita ser realizada. Por ejemplo, si las regiones están definidas por planos semi-infinitos, puede ser realizada aquí la definición de los datos de cada plano (por ejemplo, coordenadas y vectores normales). Los datos pueden ser remitidos dentro de HOWFAR y HOWNEAR o por sub-programas escritos por el usuario que son llamados por HOWFAR y HOWNEAR. Puede suceder que algunas de las dimensiones de las regiones sean determinadas al momento de la ejecución, o que la geometría sea tan compleja que es deseable usar un código ejecutable que genere tablas para el uso de HOWFAR y HOWNEAR. En tales casos, la inicialización consistirá de llenar algunos bloques COMMON escritos por el usuario.

#### 2.3.5. Inicialización de AUSGAB (Paso 5)

Este paso es similar al paso 4 en el que se provee un lugar específico en MAIN en el cual se pueden inicializar las cantidades usadas en AUSGAB. Por ejemplo, supóngase que se desea crear un arreglo, ESUM, para guardar la energía total depositada en cada región. Entonces se puede añadir en ambos, MAIN y AUSGAB, la siguiente declaración:

```
COMMON/TOTALS/ESUM($MXREG) ;
```

y se puede añadir lo siguiente en MAIN:

```
DO i=1,$MXREG [ESUM(i)=0.0;]
```

Entonces la declaración siguiente:

```
ESUM(IR(NP))=ESUM(IR(NP)) + EDEP;
```

en AUSGAB guardará la energía total depositada en cada región bajo consideración.

Nótese que **EDEP** es una variable de doble precisión, aún cuando el resto del código este corriendo en precisión simple (ver la sección 2.3.1.2. Esto se establece por medio de un macro. Por tanto, se podría querer establecer a **ESUM** como doble precisión también (en ambos, **MAIN** y **AUSGAB**). Se han experimentado situaciones donde el balance de energía no es alcanzado debido a dificultades de errores de redondeo. Esto es particularmente evidente para problemas con historias con grandes “shower” que envuelven la incorporación de pequeños valores de energía para números grandes en varias regiones. Como resultado de esta experiencia, ciertas variables de energía, claves en el código EGS han sido definidas como de doble precisión. El usuario puede tomar ventaja de esto a su discreción.

### **2.3.6. Inicialización para la reducción de varianza (Paso 5b)**

La reducción de varianza se asocia a menudo con varias llamadas a **AUSGAB** por lo que este paso es en realidad parte del paso 5, pero tiene su propia sección la cual enfatiza las nuevas opciones de reducción de varianza dentro del **EGSnrc**.

Todas estas opciones son controladas por los parámetros en **COMIN/EGS-VARIANCE-REDUCTION/** (véase la tabla II y son descritas con detalle en la sección 2.9. Además, el usuario que así lo desee puede introducir sus propias técnicas de reducción de varianza.

### **2.3.7. Determinación de los parámetros de la partícula incidente (Paso 6)**

Este paso en realidad se explica a si mismo, particularmente cuando se le ve junto con el paso 7. Un ejemplo específico de tal codificación puede ser útil y se da a continuación:

IQI=-1;	"la partícula incidente es un electrón"
EI=1000.0	"energía total (MeV)"
XI=0.0; YI=0.0; ZI=0.0;	"coordenadas de la partícula"
UI=0.0; VI=0.0; WI=0.0;	"cosenos directores"
IRI=2;	"la región número 2 es la región de incidencia"
WTI=1.0;	"factor de ponderación en el muestreo"
IXX=12; JXX=3001;	"semillas de generación de números al azar"
NCASES=10;	"número de historias a ejecutarse"
LATCHI=0;	"variable para la historia de camino"
	"una historia"

### 2.3.8. Llamada a SHOWER (Paso 7)

La secuencia de llamada a SHOWER es la siguiente:

```
CALL SHOWER(IQI, EI, XI, YI, ZI, UI, VI, WI, IRI, WTI);
```

Los tipos de los argumentos se dan por su letra inicial de acuerdo con la convención Fortran. Estos argumentos especifican la carga, energía total, posición, dirección, índice de la región y el peso estadístico de la partícula incidente; y son usados para llenar las variables correspondientes en la pila (véase la sección 2.2, tabla VI). La única excepción es el parámetro LATCHI que es pasado en COMMON/STACK/ directamente y por razones históricas no es simétrico con los demás parámetros. La sección 2.3.7 da alguna ayuda en el entendimiento de la lista de parámetros. La subrutina puede ser llamada repetidamente por medio de la siguiente declaración:

```
DO I=1, NCASES [CALL SHOWER(IQI, EI, XI, ..., etc.);]
```

La ponderación estadística, WTI, se toma generalmente como la unidad a menos que el usuario emplee alguna técnica de reducción de varianza. Debe notarse, sin embargo, que si a IQI se le asigna el valor 2, la subrutina SHOWER reconoce esto como un evento de decaimiento de un meson pi-zero, y se añaden dos fotones a la pila con energías y cosenos directores que se obtienen apropiadamente por muestreo.

### 2.3.9. La salida de resultados (Paso 8)

Este paso que se explica a si mismo.

## 2.4. Especificaciones para HOWFAR

En la entrada del subprograma de geometría, HOWFAR, EGS ha determinado como transportar la partícula en la cima de la pila por una línea recta una distancia USTEP. Todos los parámetros de la partícula están disponibles al usuario por medio de COMMON/STACK/ como se describió anteriormente. El usuario controla el transporte al ajusta las siguientes variables:

USTEP, IDISC, IRNEW, y DENEAR(NP).

Excepto por la última variable (que está en COMMON/STACK/), las demás están disponibles al usuario por medio de COMMON/EPCONT/. Las formas en que estas pueden ser cambiadas, y la manera en que EGS interpreta estos cambios, son discutidos en detalle a continuación:

1. Si el usuario decide que la partícula actual debe ser descartada, entonces IDISC debe ser puesto distinto de cero (el convenio usual es que IDISC=1).
  - Un valor positivo para IDISC hará que la partícula sea descartada inmediatamente. El valor especial IDISC=99 se usa para que un positrón sea descartado inmediatamente pero que ocurra una aniquilación de positrones como si estuviera en reposo. Para IDISC=1 se descarta un positron sin que se cree aniquilación de fotones.
  - Un valor negativo de IDISC hará que EGS descarte una partícula cuando está termine el transporte. De nuevo, IDISC=-99 señala que la aniquilación de positrones debe tomar lugar.

El sistema EGS inicializa IDISC a cero, y si se deja en ese valor el usuario no requiere que se lleve a cabo el descarte de particulas. Por ejemplo, una forma fácil de definir un medio infinito y homogéneo es con la rutina HOWFAR:

```
SUBROUTINE HOWFAR;  
RETURN;  
END;
```

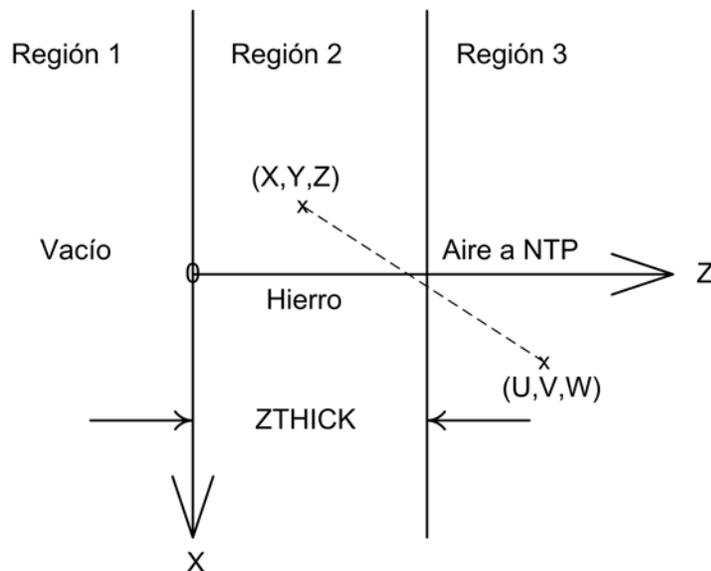
En este caso, el transporte de la partícula continuará hasta que se alcancen las energías de corte. Sin embargo, el procedimiento común es hacer  $IDISC=1$  cada vez que la partícula alcance una región de descarte.

2. Si no se requiere un descarte inmediato, entonces el usuario debe chequear si la distancia de transporte  $USTEP$  causa que la frontera de una región sea cruzada. La presencia del índice de región para la partícula actual,  $IR(NP)$ , debe hacer esta tarea mucho más fácil que si solamente se conociera la posición de la partícula. Si no se cruza ninguna frontera, entonces  $USTEP$  e  $IRNEW$  pueden dejarse como están. Si la frontera es cruzada, entonces  $USTEP$  debe ser ajustado a la distancia a la frontera desde la posición actual a lo largo de la dirección actual, e  $IRNEW$  debe ser ajustado al índice de la región al otro lado de la frontera. Para geometrías sofisticadas, esta es la parte más compleja del código de usuario.
3. El ajuste de  $DNEAR(NP)$  por parte del usuario es opcional y no es requerido por  $EGSnrc$  puesto que este siempre se calcula a cada paso del electrón usando la rutina  $HOWNEAR$ . El chequeo fronteras en  $HOWNEAR$  toma tiempo y debe evitarse siempre que sea posible. Si  $EGSnrc$  no tiene la forma de conocer que tan lejos está de una frontera, entonces le pedirá al usuario que tan lejos deberá transportar una partícula cada vez que lo requiera. Esto no es tan serio con los fotones puesto que estos viajan relativamente lejos en cada transporte. Sin embargo, el transporte de partículas cargadas de una interacción a la siguiente requiere el proceso de dispersión múltiple. Si, se toma relativo a pequeños pasos, la partícula estaría a una distancia bastante grande de la frontera más cercana, y el chequeo de cruce de fronteras sería una pérdida de tiempo. Para evitar esta ineficiencia, cada partícula ha guardado en la pila una variable llamada  $DNEAR$ , la cual es usada por  $EGS$  para guardar un límite reducido para la distancia desde la posición actual de la partícula a la frontera de la región más cercana. El sistema  $EGS$  usa esta variable en las siguientes formas:
  - $EGSnrc$  inicializa  $DNEAR$  a cero para la partícula incidente.
  - Cada vez que una partícula se mueve (una distancia  $USTEP$  en línea recta) la longitud de camino de transporte de la partícula se deduce desde  $DNEAR$ .

- Cada vez que una partícula interactúa, los valores de DNEAR para las partículas producto se ajusta desde el valor de DNEAR de la partícula madre.
- Cuando EGSnrc ha decidido como transportar la partícula actual una distancia USTEP (la cual es la distancia a la siguiente interacción), la subrutina HOWFAR será llamada para conseguir el permiso del usuario para ir más lejos, solamente si USTEP es más grande que DNEAR.

El usuario puede tomar ventaja de la eficiencia de estas características para pasos de electrones. Es improbable que estas características sean de ayuda en el transporte de fotones, pero si lo hiciera, el usuario puede hacer uso de HOWNEAR desde dentro de HOWFAR para los fotones solamente y ajustar DNEAR(NP). Si el medio para una región es vacío, el usuario no necesita molestarse en calcular DNEAR, puesto que EGS hará el transporte a la siguiente frontera en un solo paso, solamente en este caso.

Figura 12: Un ejemplo de una geometría de 3 regiones para HOWFAR. El eje Y ingresa a la página.



### 2.4.1. Un ejemplo de HOWFAR

Considerese, como un ejemplo de como escribir una rutina HOWFAR, la geometría de las tres regiones en la figura 12. Ahi, se muestra una partícula en la Región 2 con coordenadas  $(X,Y,Z)$  y cosenos directores  $(U,V,W)$ . Se asume que la parte con grosor ZTHIC es semiinfinita (en las direcciones  $x$  e  $y$ ), y que las partículas son descartadas inmediatamente cada vez que llegan dentro de la Región 1 o la Región 3. Entonces, puede aplicarse el siguiente código:

```
SUBROUTINE HOWFAR;
COMIN/EPCONT,STACK/;
"los bloques COMMON necesarios en los cálculos"
COMMON/GEOM/ZTHICK; "se define el grosor en MAIN"
IF(IR(NP) = 2) [IDISC=1; RETURN;]
IF(W(NP) = 0.0) [RETURN;] "la partícula va paralela al plano"
"chequea primero el plano delantero puesto que el shower"
"lo guía de esta manera la mayoría de las veces"
IF(W(NP) > 0.0) [DELTAZ=(ZTHICK-Z(NP))/W(NP); IRNEXT=3;]
"si no, la partícula debe ser guiada en la dirección contraria"
ELSE [DELTAZ=-Z(NP)/W(NP); IRNEXT=1;]
"ahora chequea con USTEP y reajusta las cosas si es necesario"
IF(DELTAZ <= USTEP) [USTEP=DELTAZ; IRNEW=IRNEXT;]
RETURN; END;
```

### 2.5. Especificaciones para HOWNEAR

Como se menciona en la sección 2.3.1.1, para que haya compatibilidad con los códigos de usuarios previos, EGS4/PRESTA, el sistema EGSnrc requiere formalmente una definición macro la cual por defecto es:

```
REPLACE {$CALL-HOWNEAR(#);} WITH {CALL HOWNEAR({P1},X(NP),Y(NP),Z(NP),IRL);
```

donde la variable # es tperp, la distancia más cercana a cualquier frontera. Si se está empezando desde cero es fácil codificar HOWNEAR como una subrutina.

A la SUBROUTINE HOWNEAR le concierne la geometría pero su trabajo es un tanto más simple de definir que la SUBROUTINE HOWFAR puesto que está solo necesita retornar un valor, a saber `tperp`, la distancia a la frontera más cercana en cualquier dirección. A diferencia de HOWFAR, HOWNEAR pasa los parámetros de transporte a la subrutina como:

```
SUBROUTINE HOWNEAR(tperp, x,y,z, irl);
```

donde `x,y,z` son la posición actual de la partícula e `irl` es la región actual, el resto de la información sobre la geometría es pasada en cualquier COMMON que contenga la información necesaria.

Una simplificación es que la rutina no maneje regiones fuera de la geometría.

En geometrías complejas, la matemática de HOWNEAR puede ser dificultosa y algunas veces casi imposible. Si para el usuario es fácil calcular algún límite bajo a la distancia más cercana, este debe ser usado en HOWNEAR. En un caso peor, se puede regresar `tperp` a 0.0 en cuyo caso el código entrara en el modo de dispersión simple si se está usando el algoritmo de cruce de fronteras exacto. De hecho, está es la forma general más facil de regresar a la dispersión simple a través de toda la geometría.

El siguiente es un ejemplo de la rutina HOWNEAR para la geometría dada en la sección 2.4 que concierne a HOWFAR:

```
SUBROUTINE HOWNEAR(tperp,X,Y,Z,IRL);  
COMMON/GEOM/ZTHIC; "se define el grosor en main"  
tperp = min(Z,ZTHIC-Z);  
RETURN; END;
```

## 2.6. Especificaciones para AUSGAB

La subrutina AUSGAB es llamada por EGS con la siguiente declaración:

```
CALL AUSGAB(IARG);
```

Tabla IX: Valores por defecto de IARG y para los cuales se deposita la energía

IARG	Situación
0	La partícula será transportada una distancia TUSTEP.
1	La partícula será descartada puesto que su energía está por debajo de las energías de corte ECUT (para partículas cargadas) o PCUT (para fotones), pero su energía es más grande que las energías de corte de PEGS, AE o AP, respectivamente.
2	La partícula será descartada puesto que su energía es menor que ambas ECUT y AE (o PCUT y AP).
3	La partícula será descartada porque el usuario así lo requiere (usualmente en HOWFAR o por rango de rechazo).
4	La diferencia entre la energía del fotón incidente y de todos sus productos finales se deposita localmente. Esta energía se debe a los eventos de relajación sub-umbral.

El argumento IARG indica la situación bajo la cual AUSGAB es llamado. IARG puede tomar 29 valores empezando desde cero (esto es, IARG=0 hasta IARG=28), aunque solo las primeras cinco son llamadas por defecto en el sistema EGSnrc. Los restantes 24 valores de IARG deben ser encendidos por medio del arreglo IAUSFL. Los valores de IARG y sus correspondientes situaciones se dan en la tabla IX.

En ocasiones cuando se quiere terminar la historia de una partícula desde dentro de AUSGAB, limpia y eficientemente se hace a E(NP)=0. También se puede hacer la ponderación a cero si no se quiere que sea registrada ninguna energía EDEP.

Como un ejemplo de como escribir una subrutina AUSGAB, considere la geometría de las tres regiones en la figura 12. Suponiendo que se desea registrar solamente los fotones que van de la Región 2 a la Región 3. En este ejemplo se imprime las variables de la pila más IARG. La subrutina AUSGAB sería la siguiente:

```

SUBROUTINE AUSGAB(IARG);
COMIN/STACK/;
IF(IARG = 3 & IQ(NP) = 0 & IR(NP) = 3) [OUTPUT E(NP),X(NP),Y(NP),Z(NP),
    U(NP),V(NP),W(NP),IQ(NP),IR(NP),IARG; (7G15.7,3I5);]
RETURN; END;

```

Los valores de **IARG** en la tabla IX son los que se requieren generalmente en la mayoría de situaciones en las cuales se usa a EGSnrc para simular el desarrollo de la cascada electromagnética. En particular, **IARG=0**, es útil cuando se calculan las longitudes de camino o cuando se necesita la pérdida por ionización de partículas cargadas. También, para comprobar la conservación de energía, **EDEP** puede ser sumado dentro de **AUSGAB** para todos los valores de **IARG** menores que 5.

Los valores restantes 24 de **IARG** le permiten al usuario extraer información adicional sin tener que hacer cambios al código de EGSnrc. Esto se puede hacer con el arreglo de banderas entero **IAUSFL(J)**, para **J=1** hasta 29). Esté toma los valores de 1 o 0 dependiendo de si es llamado o no por **AUSGAB**, respectivamente. Para **J=1** hasta 5, que corresponde a **IARG=0** hasta 4, **IAUSFL(J)=1** (por defecto). En otras palabras, **AUSGAB** siempre está llamando para las situaciones enumeradas en la tabla IX. Los valores de **IARG =5** hasta 28 y sus correspondientes situaciones se muestran en la tabla X.

### 2.6.1. Comprobación del desborde del STACK

El sistema EGSnrc previene al usuario de poner demasiadas partículas en el **STACK**. Esto se hace por medio del macro **\$CHECK-STACK(,#, #)**; el cuál terminará la ejecución si el puntero **\$MXSTACK** se excede. Esto toma algún tiempo, pero, si se quiere optimizar la velocidad de cálculo, se puede refinar como un macro nulo una vez se está haciendo la corrida, de la siguiente manera:

```
REPLACE {$CHECK-STACK(,#, #);} WITH {;}
```

Aún anulado el macro, EGSnrc continúa verificando que haya un espacio adecuado en el **STACK** aún cuando se esté usando partición radiativa.

### 2.6.2. Estado del STACK en varias llamadas de AUSGAB

En el EGS4, la regla general fue que después de una interacción, la partícula de más baja energía siempre fuera puesta en la parte superior del **STACK**. Esta regla general ha sido suavizada en el sistema EGSnrc.

Tabla X: Valores de IARG que no están habilitados por defecto.

IARG	IAUSFL	Situación
5	6	La partícula ha sido transportada una distancia TUSTEP.
6	7	Ocurre una interacción bremsstrahlung y se hace una llamada a BREMS en ELECTR.
7	8	Se regresa a ELECTR después de que fue hecha una llamada a BREMS
8	9	Ocurre una interacción Moller y se hace una llamada a MOLLER en ELECTR.
9	10	Se regresa a ELECTR después de que fue hecha una llamada a MOLLER
10	11	Ocurre una interacción Bhabha y se hace una llamada a BHABHA en ELECTR.
11	12	Se regresa a ELECTR después de que fue hecha una llamada a BHABHA
12	13	Ocurre una aniquilación de positrones en vuelo y se hace una llamada a ANNIH en ELECTR.
13	14	Se regresa a ELECTR después de que fue hecha una llamada a ANNIH
14	15	Se aniquila un positrón en reposo
15	16	Ocurre una producción de pares y se hace una llamada a PAIR en PHOTON
16	17	Se regresa a PHOTON después de que fue hecha una llamada a PAIR
17	18	Ocurre una interacción Compton y se hace una llamada a COMPT en PHOTON
18	19	Se regresa a PHOTON después de que fue hecha una llamada a COMPT
19	20	Ocurre una interacción fotoeléctrica y se hace una llamada a PHOTO en PHOTON
20	21	Se regresa a PHOTON después de que fue hecha una llamada a PHOTO (asumiendo que NP es distinto de cero)
21	22	La subrutina UPHI ha sido ingresada. No se ingresa en todos los casos puesto que ahora se hace el muestreo de forma más eficiente, directamente en algunas subrutinas.
22	23	La subrutina UPHI ha sido terminada.
23	24	Una interacción coherente (Rayleigh) ocurrirá.
24	25	Una interacción coherente (Rayleigh) acaba de ocurrir.
25	26	Acaba de ser creado un fotón fluorescente en RELAX.
26	27	Acaba de ser creado un electrón Coster-Kroning en RELAX.
27	28	Acaba de ser creado un electrón Auger en RELAX.
28	29	Se aniquilará a un electrón en reposo.

Con la adición de los eventos de relajación en el sistema EGSnrc, las posibilidades sobre que esta en el STACK después de varios eventos es más compleja que con el EGS4.

Por ejemplo, después de un evento de dispersión Compton en EGS4 (IARG=18), se cuenta una partícula más en el **STACK** comparado a justo antes de la llamada (IARG=17). En EGSnrc, cuando se simula una ligadura compton, esté ya no es más el caso. Primero, porque la técnica de rechazo usada determina si el evento sucede actualmente (veáse la sección 1.2.2) es posible que solamente el fotón original esté en el **STACK**. En el extremo opuesto, el fotón dispersado y el electrón pueden estar en el **STACK** junto con 2 o 3 partículas de relajación (fotones fluorescentes, electrones Auger, electrones Coster-Kroning). Sucede otra complicación si se usa la Ruleta Rusa ya que en este caso puede haber eventos en cuales no se deja nada en el **STACK** después de un evento (por ejemplo, después de un evento de pares donde las partículas son descartadas). Para ayudar a ordenar estas situaciones, EGSnrc tiene la variable **NPold** en **COMIN/STACK/** que apunta la posición en el **STACK** de la partícula inicial (el fotón previo a una dispersión Compton; dispersión Rayleigh, producción de pares, evento foto-eléctrico o el electrón previo a dispersión Moller o a un evento bremsstrahlung, etc.).

Otro cambio en EGSnrc es que el ordenamiento de las partículas resultantes no esta puesto rigurosamente de la más baja a la más alta energía. Esto ahorra tiempo de cálculo. Sin embargo, para simulaciones de alta energía ( $> 100$  MeV) puede causar problemas. Para superar esto en el código de usuario se pueden definir los macros **\$PARTICLE-SELECTION-MOLLER;** (donde **MOLLER** puede ser cualquier interacción) para ordenar el **STACK** por energía después de cualquier interacción necesaria. Estos macros son, por defecto, macros nulos, pero pueden ser ubicados inmediatamente después de la llamada a cualquier subrutina que muestree un tipo de evento.

El ordenamiento en el **STACK** se resume a continuación:

**Fotoeléctrico** **NPold** apunta a los fotoelectrones a menos que la energía inicial del fotón sea menor que 1 keV en cuyo caso dara un mensaje de error y se crea un electrón con la energía del fotón. Otra excepción sucede si la energía del fotón es menor que la de ligadura de la capa-N (lo que solamente ocurre para  $Z \geq 96$ ) en cuyo caso **EDEP** se ajusta a la energía del fotón y se deja un fotón con energía 0.0 en **NPold**.

Para eventos normales, las partículas desde  $NP_{old}+1$  hasta  $NP$  se deben a eventos de relajación. Si se está usando la Ruleta Rusa interna, es posible que para  $NP$  sea  $NP_{old}-1$  si todos no son fotones fluorescentes y todos los electrones resultantes son eliminados por la Ruleta Rusa.

**Dispersión Compton** Para el modelado Klein-Nishina, el fotón dispersado y el electrón están en  $NP_{old}$  y  $NP_{old}+1=NP_{old}$  respectivamente (la energía no está ordenada). Cuando la dispersión compton de ligadura es modelada, hay varias posibilidades. En un extremo, puesto que se usa la técnica de rechazo, puede que la dispersión no ocurra. En este caso  $NP_{old} = NP$ . Si la dispersión ocurre, entonces el fotón dispersado y el electrón Compton están en  $NP_{old}$  y  $NP_{old}+1$ , como en el caso de Klein-Nishina. Si hay cualquier partícula de relajación (esto es,  $NP > NP_{old}+1$ ), estas se encuentran en  $NP_{old} + 2$  hasta  $NP$ . Hay una ligera complicación si se usa la Ruleta Rusa, y si todos los electrones desaparecen debido a ello, entonces  $NP_{old}=NP$ . Para distinguir estos dos casos, se puede usar la bandera `i_survived_RR`. Esta tiene un valor 0 para el caso de una interacción sin ligadura sea rechazada y tiene un valor mayor que 0 si la interacción ocurre y todas las secundarias son eliminadas por la Ruleta Rusa.

**Producción de Pares** Para la producción de pares el electrón y el positrón están en  $NP_{old}$  y  $NP_{old}+1=NP$  con la partícula de más alta energía en la parte superior del `STACK` (en  $NP$ ). Si la Ruleta Rusa interna elimina el par positrón/electrón, entonces,  $NP=NP_{old}-1$  a menos que está deje a  $NP=0$ , en cuyo caso se coloca un fotón de energía cero en el `STACK` con  $NP=1$ .

**Dispersión Rayleigh** En este caso, el fotón aún está en  $NP_{old}$ .

**Producción bremsstrahlung** En este caso, el electrón resultante está siempre en  $NP_{old}$  y el fotón está en la parte superior del `STACK` en  $NP_{old}+1$ , i.e. la partícula de más baja energía no está necesariamente en la parte superior del `STACK`. Cuando se usa la división bremsstrahlung, los fotones están entre  $NP_{old}+1$  y  $NP$ . Nótese que no están ordenados por energía.

**Dispersión Moller** Aquí el resultante, un electrón de más baja energía está en  $NPold+1 = NP$ .

**Dispersión Bhabha** El positrón y el electrón resultantes, están en  $NPold$  y  $NPold+1$ , ordenados por sus energías.

**Aniquilación** Los dos fotones resultantes están en  $NPold$  y  $NPold+1$  a menos que se use la división bremsstrahlung en cuyo caso los fotones van de  $NPold$  a  $NP$ . Las energías de las partículas no están ordenadas.

## 2.7. Finalización de las historias de las partículas

El método estándar para finalizar una historia es haciendo `IDISC` a un valor distinto de cero en `HOWFAR` (véase la sección 2.4). Otro método es hacer el peso de la partícula a 0.0, normalmente en `AUSGAB` bajo ciertas condiciones (i.e. cuando se usa la Ruleta Rusa). Esta técnica es usada en EGS4 al verificar el peso de la partícula cuando está ingresa `HOWFAR` y haciendo `IDISC` distinto de cero si el peso es cero. Esto de alguna forma es un desperdicio puesto que significa que se calcularán varios parámetros de la partícula, a pesar del hecho de que la partícula se va a descartar. En particular, cuando se usa el algoritmo de forzamiento estándar de fotones se ingresa a un bucle infinito.

Lo anterior se corrige al recodificar el macro que maneja el peso 0.0 de una forma distinta. Pero se ahorra más tiempo al añadir una prueba al inicio del bucle de un fotón nuevo o un electrón nuevo según el cual se descarta inmediatamente si el peso es 0.0 por medio de `USER-PHOTON-DISCARD` o `USER-ELECTRON-DISCARD`. Esto genera una llamada a `AUSGAB` con `IARG=3`. Los positrones descartados de esta manera no crean fotones de aniquilación. Nótese que `ELKE` no está disponible con esta llamada puesto que se asume que la partícula se va a deshechar. Aún se tiene `HOWFAR` haciendo `IDISC=1` cuando el peso es 0.0, especialmente si el peso es cero para una partícula que no es nueva.

## 2.8. Generadores de números al azar

El sistema EGSnrc contiene dos generadores de números al azar, RANLUX y RANMAR. El generador RANMAR es usado en las distribuciones unix de EGS4 [57, 58] y aunque se le conocen algunas fallas en pruebas teóricas, en la experiencia no ha causado problemas. El generador RANLUX [59, 60], que es el generador por defecto del sistema EGSnrc, es un generador un poco similar y tiene una variedad de niveles de lujo, que van del 0 al 4 y un período tan grande como  $10^{165}$ . Se ha dejado a RANLUX como el generador por defecto puesto que éste permite pruebas explícitas con secuencias de alta calidad sin dejar duda alguna.

Ambos generadores de números al azar ofrecen características importantes. Primeramente, ambos son completamente portátiles, produciendo las mismas secuencias en máquinas distintas, aunque RANMAR ocasionalmente se sale ligeramente de la secuencia, y algunas veces los optimizadores en una máquina dada causan que las secuencias difieran. No se ha visto este comportamiento con RANLUX. Una característica aún más importante es que cualquiera de los dos generadores puede ser inicializado y garantizan producir una secuencia de números al azar que es independiente de otras secuencias. Esto es muy útil cuando se hacen corridas en varias máquinas o en paralelo.

El generador por defecto está definido en `$HEN_HOUSE/specs/all_commmmon.spec` por la declaración `RANDOM=$(EGS_SOURCEDIR)ranlux`. Esta declaración puede ser cambiada a `ranmar` o, para códigos de usuarios individuales, puede ser cambiado al añadir la declaración `RANDOM=$(EGS_SOURCEDIR)ranmar` en el archivo `user_code.make`, en alguna parte antes de `SOURCES=statements` (si está existe).

Dondequiera que el usuario necesite usar `$RANDOMSET#;`, debe asegurarse que `COMIN/RANDOM/` está presente. Si el usuario está satisfecho con el nivel de lujo 1 y la misma secuencia para cada cálculo, el generador RANLUX se auto-inicializa. Sin embargo, para usar otros niveles de lujo u otras secuencias, el código de usuario debe incluir una declaración del tipo:

```
$INITIALIZE RNG USING luxury_level AND iseed;
```

donde `luxury_level` es un entero entre 0 y 4 e `iseed` es un entero positivo.

Debido a los problemas encontrados usando el nivel de lujo 0, el nivel de lujo 1 se usa por defecto en el sistema EGSnrc. Sin embargo, dado que una nueva codificación de RANMAR para generar grupos de números al azar usando una función de llamada, se ha encontrado que RANMAR es más rápido (alrededor de un 5%).

Cuando se usa el generador RANMAR, la inicialización luce así:

```
$INITIALIZE RNG USING IXX AND JXX;
```

donde `IXX` y `JXX` son dos semillas enteras con:

$$0 < IXX \leq 31328 \text{ y } 0 < JXX \leq 30081$$

Los otros macros son para usarse cuando se quiere guardar el estado del generador de números al azar en el disco y posiblemente reiniciar una corrida u otras tareas guardadas.

Hay dos archivos disponibles para usarse en el código que hacen la correlación del muestreo. Estos archivos son:

```
ranlux.correlations    o    ranmar.correlations
```

Estos archivos definen los macros:

```
$STORE-RNG(#);$RESET-RNG(#);
```

los cuales guardan y reactivan un número arbitrario de estados de números al azar ( $\leq$  `$MXRNGDIM` que es 5 por defecto).

## 2.9. Opciones de reducción de varianza

En el sistema EGSnrc se han implementado directamente tres formas de técnicas de reducción de varianza, para permitir cálculos más eficientes. En los códigos de usuario con el sistema EGS4 estas técnicas se implementaban por medio de llamadas a `AUSGAB` u otros medios, esto llevaba a ineficiencias. En los tres casos, si el usuario no hace nada para activar estas opciones explícitamente, estas no son usadas.

### 2.9.1. Rango de rechazo

Dentro del sistema EGSnrc el rango de un electrón está disponible para cada paso. Este no es el rango verdadero, sino el rango determinado por:

$$\text{E\_RANGE} = \int_{E_{\text{mín}}}^E \frac{dE'}{L(E', AE)}$$

donde  $L(E', AE)$  es el poder de frenado restringido para un valor dado de  $AE$  y  $E_{\text{mín}}$  es la más baja energía a la cual PEGS4 produce un poder de frenado (esá es algo menor que  $AE$  pero no tanto). El valor de  $\text{E\_RANGE}$  es un límite superior en la distancia que puede viajar un electrón en la simulación puesto que los eventos discretos pueden ser mas cortos que la longitud de camino.

El rango de rechazo está implementado por el macro `$RANGE-DISCARD` que comprueba el rango del electrón contra la distancia a la frontera más cercana en cada paso. La historia es terminada cada vez que el rango es más corto que la distancia a la frontera y si es requerido por el usuario. Puesto que el rango y la distancia son calculados para otros propósitos, está comprobación es muy rápida y puede ahorrar mucho tiempo, especialmente en regiones grandes. Puesto que este descarte es controlado por el usuario, se hace por medio de `USER-ELECTRON-DISCARD`, generando una llamada `IARG=3` en `AUSGAB`.

Está técnica involucra una aproximación puesto que el electrón podría emitir un fotón bremsstrahlung que puede escapar de la región, aún si el electrón no lo hace. Para controlar el alcance de esta aproximación, el rango de rechazo se hace solamente si la energía del electrón está por debajo de un energía umbral que puede ser ajustada para cada región.

El rango de rechazo está implementado en una base regional, al ajustar las banderas `i_do_rr(irl)` a 1 para todas las regiones `irl` para las cuales se requiere el rango de rechazo y al asignar valores al arreglo `e_max_rr(irl)`. Notese que si `e_max_rr(irl)` no tiene un valor asignado, su valor por defecto 0.0 desactiva el rango de rechazo, aún si el valor de `i_do_rr(irl)` es 1.

Ambos arreglos están en `COMIN/EGS-VARIANCE-REDUCTION`. Estos necesitan ser ajustados antes de la primera llamada a `SHOWER`. Notése que `e_max_rr(irl)` se refiere a la energía total de los electrones (esto es, se incluye la masa en reposo, como se hace en `ECUT`).

El usuario es libre de implementar otras formas más eficientes de rango de rechazo. Esto se hace definiendo el macro `$USER-RANGE-DISCARD` el cual se llama inmediatamente después del macro de arriba.

### 2.9.2. Partición bremsstrahlung

La partición bremsstrahlung es una técnica que puede proveer un factor de 4 o más en la eficiencia, cuando se modelan haces bremsstrahlung en aceleradores médicos. Cada vez que un electrón emite un fotón, la simulación emite un número arbitrario de fotones bremsstrahlung con su ponderación reducida apropiadamente. La energía del electrón se disminuye por la energía de uno de estos fotones. Esto mantiene la precisión en la pérdida de energía del electrón a expensas de no tener una exacta conservación de la energía para cada historia, aunque la energía se conserva en promedio. La ventaja de hacer esta partición dentro de la subrutina `BREMS` es que se calculan una sola vez varias constantes para la energía del electrón, y por consiguiente, el muestreo es más rápido. Los electrones se encuentran siempre en `NPo1d` en el `STACK` y los fotones no están ordenados por energía.

Para realizar la partición bremsstrahlung, la variable `nbr_split` que está en `COMIN/EGS-VARIANCE-REDUCTION` debe ajustarse al número de fotones bremsstrahlung que se quieran en cada interacción discreta. Véase la sección 1.4.2.4

No hay límites internos en el número de particiones que pueden ser usadas excepto el tamaño de la pila, `$MXSTACK`, que no puede ser excedido. El código de usuario puede sobrescribir el valor de `$MXSTACK` si se necesita de un valor grande.

Notése que una vez ajustado, el sistema EGSnrc hará la partición bremsstrahlung en todas las generaciones. Esto es apropiado cuando la Ruleta Rusa esta siendo jugada puesto que esto significa que la segunda generación de fotones bremsstrahlung tendrá la misma ponderación que la primera generación de fotones.

### 2.9.3. Ruleta Rusa

La Ruleta Rusa es una técnica de reducción de varianza estándar.

La Ruleta Rusa, como está implementada en el sistema EGSnrc, es una opción de usuario que se activa al ajustar la bandera entera `i_play_RR` a 1, y al ajustar la probabilidad `prob_RR` a un valor apropiado. Estos dos parámetros estan en `/COMING/EGS-VARIANCE-REDUCTION`.

Si la Ruleta Rusa se utiliza en conjunto con la partición bremsstrahlung, el valor apropiado de `textttprob_RR` es `1./nbr_split`.

La variable entera `i_survived_RR` esta también en `COMIN/EGS-VARIANCE-REDUCTION`. Está es 0 si la Ruleta Rusa no se juega o si todas las partículas sobreviven cuando se juega la Ruleta Rusa en una interacción previa. De otro modo, su valor dice que tantas particuala fueron descartadas por la Ruleta Rusa en la interacción previa.



# 3. EL PROBLEMA DE LA EFICIENCIA EN UN DETECTOR DE HpGe

## 3.1. Detección de la eficiencia

Todos los detectores de radiación, dan en principio, un pulso de salida por cada cuanto de radiación que interactúa con su volumen activo. Para radiación primaria cargada, tal como partículas alfa o beta, tomará lugar una interacción en forma de ionización o excitación inmediatamente al ingreso de la partícula dentro del volumen activo. Por otro lado, para radiaciones sin carga tales como rayos gamma o neutrones deben primero realizar una significativa interacción en el detector antes que la detección sea posible. Puesto que esta radiación puede viajar grandes distancias entre interacciones, los detectores no son a menudo 100 % eficientes. Esto hace necesario tener una figura precisa para la eficiencia del detector para relacionar el número de pulsos contados con el número de neutrones o fotones incidentes en el detector.

Es conveniente subdividir las eficiencias de conteo en dos clases: *absoluta* e *intrínseca*. La eficiencia absoluta está definida como:

$$\epsilon_{abs} = \frac{\text{número de pulsos detectados}}{\text{número de cuantos de radiación emitidos por la fuente}} \quad (3.1)$$

la cual es dependiente no solo de las propiedades del detector sino también en los detalles de la geometría de conteo (principalmente de la distancia de la fuente al detector). La eficiencia intrínseca está definida como

$$\epsilon_{int} = \frac{\text{número de pulsos detectados}}{\text{número de cuantos de radiación incidentes al detector}} \quad (3.2)$$

que no incluye el ángulo subtendido por el detector como un factor implícito. Las dos eficiencias están relacionadas para fuentes isotrópicas por  $\epsilon_{int} = \epsilon_{abs}(4\pi/\Omega)$ , donde  $\Omega$  es el ángulo subtendido por el detector visto desde la posición actual de la fuente. La eficiencia intrínseca de un detector de forma usual depende principalmente del material del detector, la energía de la radiación, y el espesor físico del detector en la dirección de la radiación incidente.

Permanece una ligera dependencia de la distancia del detector a la fuente, sin embargo, el promedio de la longitud recorrida por la radiación a través del detector cambiara un tanto con su espaciamento.

Un detector con una eficiencia conocida puede ser usado para medir la actividad absoluta de una fuente radiactiva.

### 3.2. Simulación de la eficiencia en un detector de HpGe

#### 3.2.1. PEGS4

Una parte fundamental de los cálculos en la técnica de Monte Carlo, son las secciones eficaces que describen la interacción entre las partículas y la materia. En el sistema EGSnrc estos datos son suministrados por un programa de preparación de datos llamado PEGS4 (Preprocessor for EGS4). En este, el usuario especifica la composición de los materiales a usar y las energías umbrales para la creación de partículas secundarias. Los datos creados para el presente trabajo se guardan en un archivo con extensión `.pegs4dat` que es usado posteriormente por el sistema EGSnrc.

Tabla XI: Descripción de los materiales usados en los cálculos Monte Carlos del sistema EGSnrc.

Material	Densidad [g/cm <sup>3</sup> ]	Composición (fracción por peso) [MeV]	AE [MeV]	AP
Carbono epóxico	1.200	H(0.0055491), C(0.755751), O(0.188758)	0.521	0.005
Aire STP	1.124·10 <sup>-3</sup>	C(0.000124), N(0.755267), O(0.231781) Ar(0.012827)	0.521	0.005
Aluminio	2.699	Al(1.0)	0.521	0.005
Litio	5.340·10 <sup>-1</sup>	Li(1.0)	0.521	0.005
Germanio	5.323	Ge(1.0)	0.521	0.005
Boro	2.370	B(1.0)	0.521	0.005

Figura 13: Ejemplo de un archivo de ingreso para el código DOSRZnrc

```

14/11/05      detector.egsinp      1
TITLE= eficiencia de un detector de Germanio
#####
:start I/O control:
IWATCH= off
STORE INITIAL RANDOM NUMBERS= no
IRESTART= first
STORE DATA ARRAYS= yes
OUTPUT OPTIONS= Long
ELECTRON TRANSPORT= normal
DOSE ZBOUND MIN= 3
DOSE ZBOUND MAX= 4
DOSE RBOUND MIN= 1
DOSE RBOUND MAX= 3

:stop I/O control:
#####
:start Monte Carlo inputs:
NUMBER OF HISTORIES= 10000000
INITIAL RANDOM NO SEEDS= 1, 3
MAX CPU HOURS ALLOWED= 90.000
IFULL= pulse height distribution
STATISTICAL ACCURACY SOUGHT= 0.0000
SCORE KERMA= no

:stop Monte Carlo inputs:
#####
:start pulse height distribution input:
REGION OF SENSITIVE VOLUME= 4, 0, 12, 13
SLOTE= 0.0005
DELTAE= 0.0005

:stop pulse height distribution input:
#####
:start geometrical inputs:
METHOD OF INPUT= individual
Z OF FRONT FACE= 0.
DEPTH BOUNDARIES= 0.05, 0.5, 2.1, 5.3
RADI= 0.45, 0.40, 2.58, 2.7, 2.0, 3.375, 3.525
MEDIA= Carbon-epoxy,
AlreSTP,
Aluminio,
Litio,

file:/home/strange/EGS_HOME/dosrznrc/detector.egsinp

14/11/05      detector.egsinp      2
Germanio,
Boro;
DESCRIPTION BY= planes
MEDNUM= 1, 2, 3, 2, 4, 5, 2, 6, 5
START ZSLAB= 1, 2, 1, 3, 3, 3, 4, 4, 3
STOP ZSLAB= 1, 2, 4, 4, 4, 4, 4, 3
START RING= 1, 1, 7, 6, 5, 3, 1, 2, 1
STOP RING= 6, 6, 7, 6, 5, 4, 1, 2, 2

:stop geometrical inputs:
#####
:start source inputs:
INCIDENT PARTICLE= photon
SOURCE NUMBER= 1
SOURCE OPTIONS= 2.5, 0, 5.825, 0
INCIDENT ENERGY= spectrum
SPEC FILENAME= /home/strange/HEN_HOUSE/spectra/espectro.spectrum
SPEC IOUTSP= include

:stop source inputs:
#####
:start MC transport parameter:
Global ECUT= 0.001
Global PCUT= 0.005
Global SMAX= 1e10
ESTEP= 0.25
XIMax= 0.5
Skin depth for BCA= 0
Boundary crossing algorithm= EXACT
Electron-step algorithm= PRESTA-II
Spin effects= On
Brems angular sampling= KM
Brems cross sections= BH
Bound Compton scattering= On
Pair angular sampling= Simple
Photoelectron angular sampling= On
Rayleigh scattering= On
Atomic relaxations= On
Set PCUTE= 0
Set PCUT start region= 1
Set PCUT stop region= 1
Set ECUTE= 0
Set ECUT start region= 1
Set ECUT stop region= 1
Set SMAX= 0
Set SMAX start region= 1

file:/home/strange/EGS_HOME/dosrznrc/detector.egsinp

14/11/05      detector.egsinp      3
Set SMAX stop region= 1

:stop MC transport parameter:
#####
:start variance reduction:
BREM SPLITTING= off
NUMBER OF BREMS PER EVENT= 1
CHARGED PARTICLE RUSSIAN ROULETTE= off
ELECTRON RANGE REJECTION= off
ESAVEIN= 0.0
RUSSIAN ROULETTE DEPTH= 0.0000
RUSSIAN ROULETTE FRACTION= 0.0000
EXPONENTIAL TRANSFORM c= 0.0000
PHOTON FORCING= on
START FORCING= 1
STOP FORCING AFTER= 1
CS ENHANCEMENT FACTOR= 1
CS ENHANCEMENT START REGION= 3, 7, 10
CS ENHANCEMENT STOP REGION= 3, 7, 11

:stop variance reduction:
#####
:start plot control:
PLOTTING= off

:stop plot control:
#####

file:/home/strange/EGS_HOME/dosrznrc/detector.egsinp

```

En la terminología del sistema EGSnrc, la más baja energía umbral (o de corte), para la creación de partículas secundarias, es AE para electrones y AP para fotones.

Para propósitos del presente trabajo, en la tabla XI se muestran los materiales usados y su composición química, para los cálculos de la simulación de la eficiencia del detector; además de sus correspondientes energías umbrales para la creación de partículas secundarias.

### **3.2.2. DOSRZnrc**

Para simular la eficiencia del detector, se utilizó el código de usuario DOSRZnrc, el cuál, es un código de usuario diseñado para el cálculo de dosis absorbida en geometrías cilíndricas. Este código de usuario es distribuido junto con el sistema EGSnrc.

El usuario ingresa los datos pertinentes a la simulación que se quiere hacer en un archivo, con extensión `.egsinp`. Allí se indican todos los parámetros de la simulación, esto es, geometría y materiales del detector, parámetros de transporte, geometría de la fuente (límitado a fuentes puntuales, haces paralelos y haces en forma de lápiz o pencil beam) y la clase de partícula (fotón, electrón o positrón), número de historias, etc. En la figura 13 se da un ejemplo de un archivo de ingreso.

El archivo de salida generado por el sistema EGSnrc, es un archivo con extensión `.egs1st`, en el cuál se da la distribución de altura de pulsos de la simulación que se le ha pedido al sistema. Los datos en este archivo, son los que se utilizan para encontrar la eficiencia del detector en cuestión. En las figuras 14 y 15 se muestra un extracto del archivo de salida.



Figura 15: (cont.)Ejemplo de un archivo -extracto- de salida del sistema EGSnrc

```

14/11/05      detec.torciner.egsist      5
| MASS 2.800E+01 |
5.3000.....

PULSE HEIGHT DISTRIBUTION IS SCORED IN THOSE REGIONS DENOTED WITH A 1
1(0), 2(0), 3(0), 4(1), 5(0), 6(0), 7(0), 8(1), 9(0), 10(0),
11(0), 12(1), 13(1), 14(0), 15(0), 16(0), 17(0), 18(0), 19(0), 20(0),
21(0), 22(0), 23(0), 24(0), 25(0), 26(0), 27(0), 28(0), 29(0),
[]

Sat Nov 5 21:31:43 2005
*****
EXECUTION INFORMATION AND WARNING MESSAGES
*****
USING DOSRZnrc(EGSnrc) (Rev 1.55 2003-03-12 11:52:05-05)
***** NEW INPUT FILE *****

*****DESIRED STATISTICAL ACCURACY OF 0.000% NOT REACHED*****
STATS IN PEAK DOSE REGION= 0.498 % AFTER ** BATCHES
***** FINAL RANDOM NUMBER STATE: ixj jxx = 78 14 *****
Finished simulations: elapsed,cputime, ratio= 19758.8 17499.3(= 4.86h) 1.13
cputime per history = 0.00023 sec. number of histories per hour = 15429212.
[]
eficiencia de un detector de Germanio
Sun Nov 6 03:01:01 2005

Summary of pulse height distribution
*****
7500000 HISTORIES ANALYSED

1 -LOG 0 TOP PDST CUMULATIVE EBIN
| * 0.0495 0.0218 ( 0.118%) 0.2262 ( 0.032%)
| * 0.0500 0.0217 ( 0.118%) 0.2478 ( 0.030%)
| * 0.1995 0.0152 ( 0.140%) 0.6607 ( 0.012%)
| * 0.2000 0.0151 ( 0.140%) 0.6758 ( 0.011%)
| * 0.2995 0.0106 ( 0.164%) 0.7245 ( 0.010%)
| * 0.3000 0.0105 ( 0.164%) 0.7351 ( 0.009%)
| * 0.3995 0.0080 ( 0.185%) 0.7740 ( 0.008%)
| * 0.4000 0.0080 ( 0.185%) 0.7819 ( 0.008%)

file/home/strange/Documents/detlic def/detec.torciner.egsist

14/11/05      detec.torciner.egsist      6
| * | 0.4995 0.0065 ( 0.203%) 0.8143 ( 0.007%)
| * | 0.5000 0.0064 ( 0.203%) 0.8207 ( 0.007%)
| * | 0.5995 0.0055 ( 0.217%) 0.8404 ( 0.006%)
| * | 0.6000 0.0054 ( 0.217%) 0.8539 ( 0.006%)
| * | 0.6995 0.0047 ( 0.230%) 0.8779 ( 0.006%)
| * | 0.7000 0.0047 ( 0.230%) 0.8826 ( 0.006%)
| * | 0.7995 0.0042 ( 0.241%) 0.9035 ( 0.005%)
| * | 0.8000 0.0042 ( 0.242%) 0.9076 ( 0.005%)
| * | 0.8995 0.0038 ( 0.250%) 0.9258 ( 0.004%)
| * | 0.9000 0.0038 ( 0.251%) 0.9296 ( 0.004%)
| * | 0.9995 0.0034 ( 0.260%) 0.9452 ( 0.004%)
| * | 1.0000 0.0035 ( 0.259%) 0.9486 ( 0.003%)
| * | 1.1005 0.0032 ( 0.268%) 0.9618 ( 0.003%)
| * | 1.1010 0.0032 ( 0.268%) 0.9650 ( 0.003%)
| * | 1.2005 0.0029 ( 0.276%) 0.9755 ( 0.002%)
| * | 1.2010 0.0029 ( 0.276%) 0.9784 ( 0.002%)
| * | 1.2995 0.0027 ( 0.283%) 0.9859 ( 0.002%)
| * | 1.3000 0.0027 ( 0.284%) 0.9886 ( 0.002%)
| * | 1.3995 0.0025 ( 0.291%) 0.9926 ( 0.001%)
| * | 1.4000 0.0025 ( 0.291%) 0.9951 ( 0.001%)
| * | 1.4995 0.0024 ( 0.298%) 0.9976 ( 0.001%)
| * | 1.5000 0.0024 ( 0.297%) 1.0000 ( 0.000%)

PLOT NORMALIZED TO PEAK OF ONE, PDST IS NORMALIZED TO UNIT AREA
SOLID ANGLE SUBTENDED BY DETECTOR HOUSING = 9.536E-02(
0.0%)
FRACTION OF PARTICLES INTO 4-PI WHICH CAUSE A PULSE = 3.297E-03(
0.0%)
FRACTION OF PARTICLES INCIDENT ON HOUSING WHICH CAUSE A PULSE = 4.346E-01(
0.0%)
ENERGY DEPOSITED IN DETECTOR PER INITIAL PARTICLE: 0.0000 MeV (+-99.900%)
[]
eficiencia de un detector de Germanio
Sun Nov 6 03:01:01 2005

file/home/strange/Documents/detlic def/detec.torciner.egsist

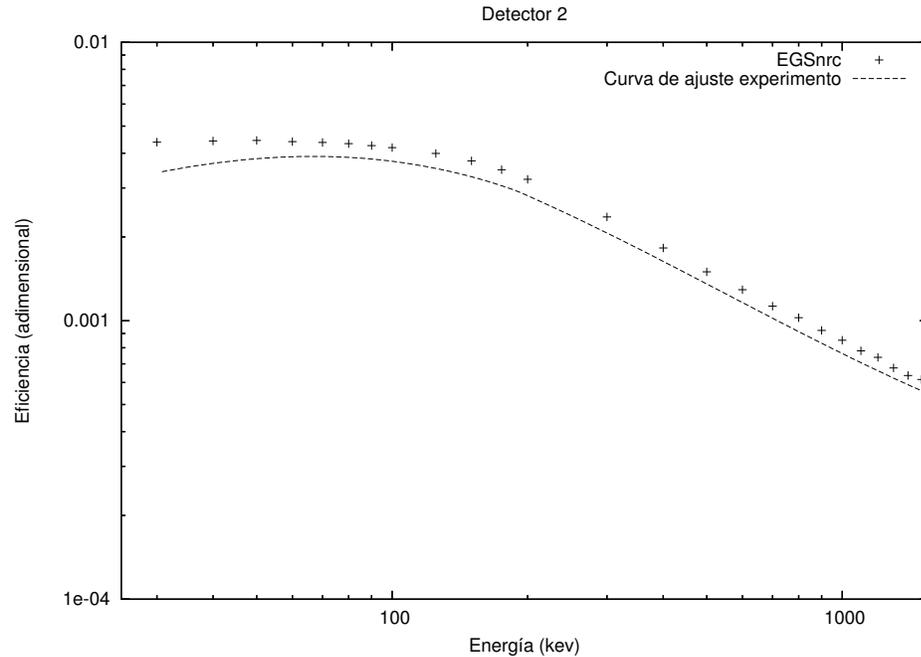
```

### 3.2.3. Resultados y su discusión

En el presente trabajo se simuló la eficiencia para dos detectores de Germanio; el primero (en adelante, detector 1), es un detector marca Canberra, modelo GX2018, con un cristal de germanio de 54mm de diámetro y 48 mm de largo, perteneciente al laboratorio de Radiaciones Ionizantes de la Licenciatura en Física Aplicada . El segundo (en adelante, detector 2, es un detector marca Canberra, con un cristal de germanio de 66mm de diámetro y 48mm de largo, cuyas especificaciones físicas y su eficiencia absoluta experimental, para una fuente puntal a 24.03cm de distancia del detector, se detallan en la referencia [52].

Para el detector 2, se hace una simulación de la eficiencia absoluta, para una fuente puntal a 24.03cm de distancia del detector. Los resultados de la simulación y su comparación con los del experimento se muestran en la figura 16.

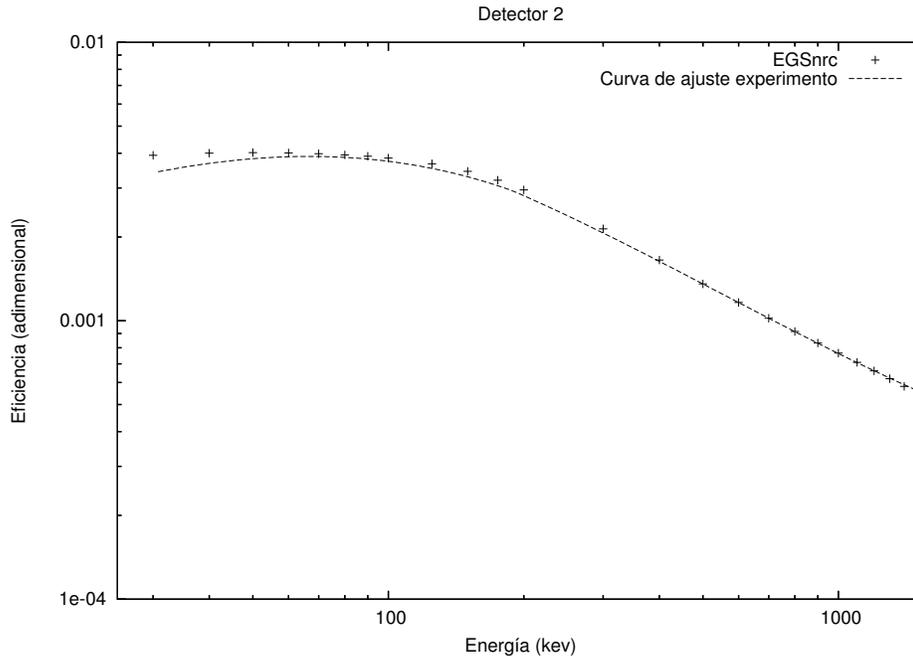
Figura 16: Eficiencia del detector 2. Comparación entre la simulación y el experimento



La discrepancia que se observa en la figura 16, puede ser explicada en términos del artículo de Rogers [53], en este Rogers aborda la problemática de los volúmenes inertes en los detectores de germanio, que son lugares del cristal de germanio que no son sensibles. Esto redundaría en una disminución del volumen efectivo del detector, y, a menos que se conozca con precisión el volumen inerte del mismo, no se podría simular correctamente la eficiencia absoluta del detector, puesto que la misma es dependiente de la geometría del mismo. Sin embargo, estos volúmenes varían entre 0.8mm y 2mm de grosor en una capa cilíndrica externa del cristal de germanio. Lo anterior es aplicado por Rogers [53] y Helt-Hansen [54]. En consecuencia, si se considera una capa inerte de 1mm para el detector 2, e ingresando estos datos en la simulación se obtienen los resultados que se muestran en la figura 17.

Como se puede observar en la figura 17, al tomar en cuenta un volumen inerte en el detector 2, hay un completo acuerdo entre el experimento y la simulación.

Figura 17: Eficiencia del detector 2. Comparación entre la simulación y el experimento

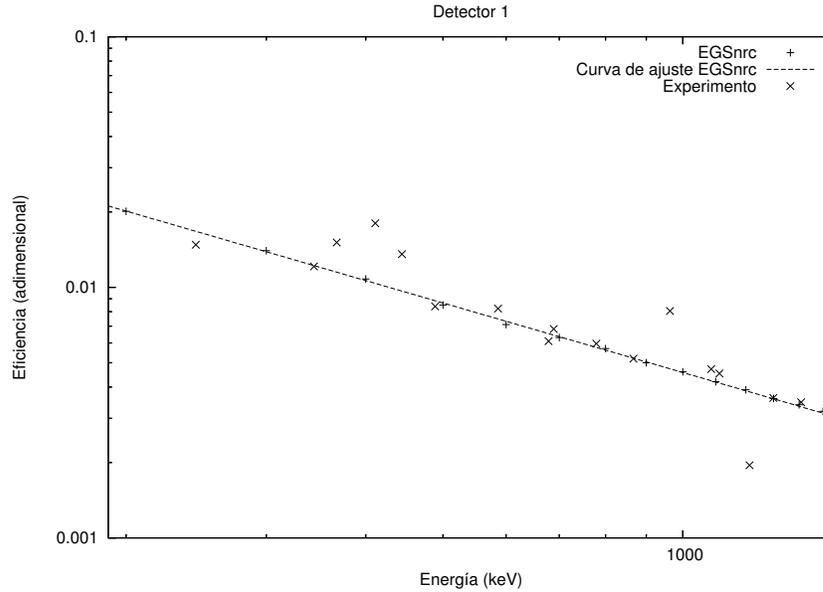


La discrepancia que se observa a bajas energías, se explica debido a que el código EGSnrc es aún ineficiente a muy bajas energías, precisamente en el rango de la discrepancia, véase la sección 1.2.1.2.

Sin embargo, cabe aclarar que la eficiencia relativa del detector, debería ser la misma, no importando si se considera o no un volumen inerte. Este tema será tratado con mayor detalle para el detector 1.

Por otro lado, el detector 1, ha sido usado para hacer espectrometría gamma del suelo de Guatemala [55, 56], aquí conocer la eficiencia del detector es de trascendental importancia, ya que está es utilizada para calcular las actividades de las especies radiactivas, naturales y/o artificiales que se detectan en el mismo.

Figura 18: Eficiencia del detector 1. Comparación entre la simulación y el experimento



Sin embargo, el conteo de pulsos, para realizar la espectrometría gamma, se hizo en recipientes tipo marinelli, y por consiguiente, el cálculo de la eficiencia absoluta experimental se hace con una fuente líquida de  $^{152}\text{Eu}$  contenida en uno de estos recipientes. La simulación de una fuente con esta geometría, es una tarea titánica, y el sistema EGSnrc no lo hace. Pero, Moens y otros [57], han demostrado que una fuente con forma de disco es una buena aproximación.

En consecuencia, se hizo una simulación, para una fuente con forma de disco circular, del diámetro de los recipientes mencionados anteriormente, los resultados de la simulación y los del experimento se muestran en la figura 18. La curva de ajuste para la simulación está definida por la siguiente ecuación:

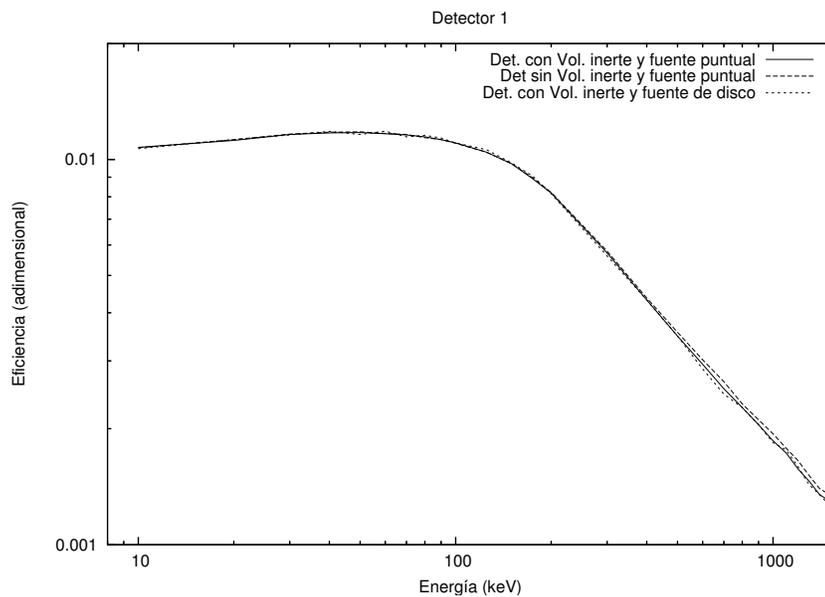
$$\varepsilon_{sim}(E) = \left(\frac{2,8916}{E}\right)^{0,9216} + 2e^{-E} + e^{-1,001E} \quad (3.3)$$

donde  $\varepsilon_{sim}(E)$  es la eficiencia absoluta de la simulación y  $E$  es la energía.

Como puede observarse, la mayoría de puntos encontrados experimentalmente, coinciden en buena manera con la curva de eficiencia de la simulación, excepto por cinco de ellos, la característica principal de estos puntos es que, son los que tienen menor intensidad dentro del espectro de  $^{152}\text{Eu}$ . Idealmente un experimento, para calibrar la eficiencia de un detector, debería hacerse con fuentes con poca actividad y por períodos largos de tiempo; en el experimento, la calibración de la eficiencia se hizo con una fuente con actividad alta, debido a que en el laboratorio no se cuenta con fuentes de baja intensidad.

Por otro lado, se espera que la eficiencia relativa del detector, que es dependiente de la distancia de la fuente al detector, sea constante, ya sea, que se considere el volumen inerte o no, y para distintas configuraciones de la fuente. En efecto, se hace la simulación para una fuente a 20 cm del detector 1, considerando una fuente puntual y una fuente en forma de disco, como se muestra en la figura 19 hay una gran similitud para las tres configuraciones consideradas, con una ligera diferencia en las energías más altas, pero que no va más allá del 1 %.

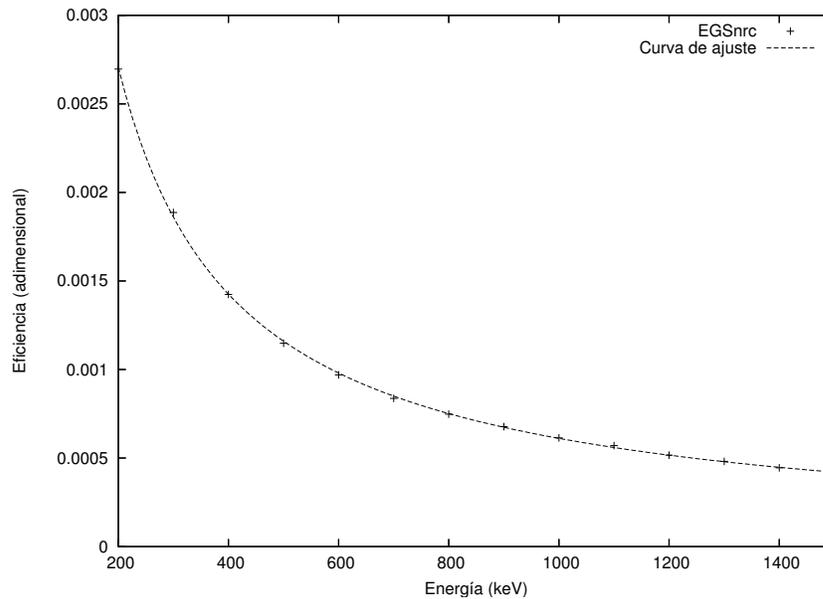
Figura 19: Eficiencia relativa del detector 1, para distintas configuraciones de la fuente, distancia de la fuente al detector 20cm



Por último, se hace una simulación para una fuente puntual a 20 cm. de distancia del detector. En la figura 20, se muestra la curva de ajuste de la eficiencia para esa configuración. La ecuación para la curva de eficiencia es:

$$\varepsilon_{sim}(E) = \left(\frac{0,334004}{E}\right)^{0,9245} + 3e^{-E} \quad (3.4)$$

Figura 20: Eficiencia absoluta del detector 1, para una fuente puntual, distancia de la fuente al detector 20cm



Para comprobar la exactitud de esta simulación, se hará uso de las eficiencias obtenidas al utilizar la ecuación 3.4, para calcular la actividad de dos fuentes, una de  $^{60}\text{Co}$  y la otra de  $^{137}\text{Cs}$ . Las dos fuentes se ubicarán a una distancia de 20 cm del detector. Los resultados de la simulación, concuerdan con los del experimento, y están dentro del rango de incerteza de los mismos y se muestran en las figuras 21 y 22

Figura 21: Actividad de la fuente de  $^{60}\text{Co}$

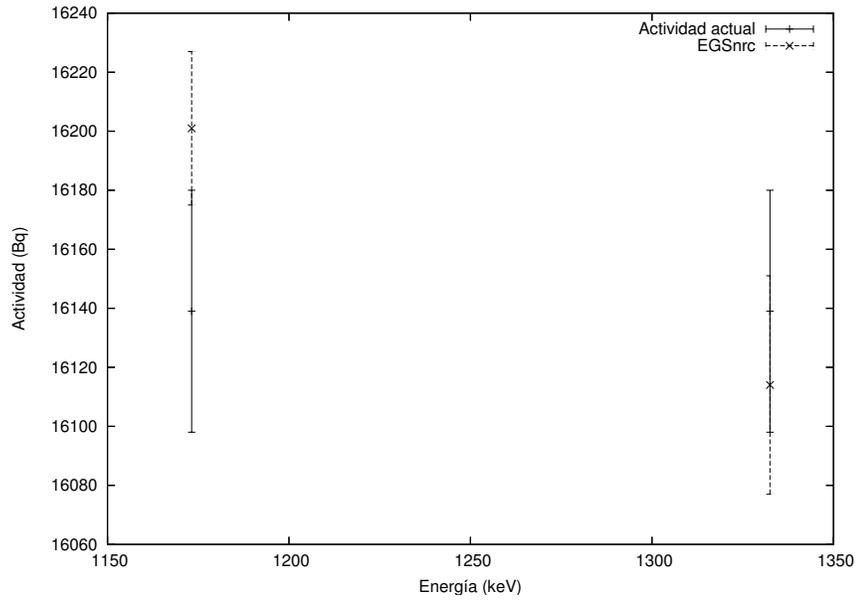
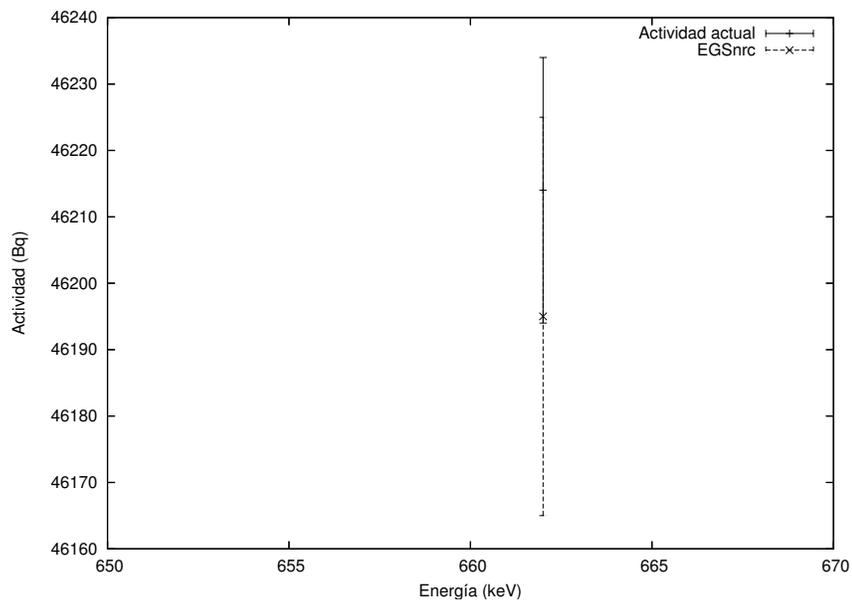


Figura 22: Actividad de la fuente de  $^{137}\text{Cs}$



## CONCLUSIONES

1. El proceso de la simulación de la eficiencia absoluta de un detector coaxial de HpGe con el sistema EGSnrc, al considerar un volumen inerte, reproduce el experimento con una diferencia que no va más allá del 2%.
2. La simulación de la eficiencia del detector coaxial de HpGE, del laboratorio de Radiaciones Ionizantes de la Licenciatura en Física Aplicada, verifica y avala el resultado del experimento en la referencia [55]; y, puede ser utilizado para confrontar mediciones posteriores.
3. La eficiencia relativa de un detector de germanio, a una misma distancia y para el mismo espectro de radiación gamma, no cambia al variar la geometría del detector, es decir, al considerar un volumen inerte o no, y la geometría de la fuente.



## RECOMENDACIONES

1. Hacer estudios de intercomparación del presente trabajo, con otros códigos de simulación, por ejemplo, GEANT4 -CERN-, y MCNP5 -Los Alamos National Laboratory-.
2. Aplicar los códigos de simulación, para la verificación de la calibración de unidades de cobaltoterapia y aceleradores lineales en términos de dosis absorbida en agua.
3. Realizar estudios con códigos de simulación, para tratamientos de radioterapia conformada.



# BIBLIOGRAFÍA

- [1] MacPherson, M. S. *et. al* **A technique for accurate measurement of electron stopping powers.** Med. Phys. (E.E.U.U.)(22): 950. 1995
- [2] MacPherson, M. S. *et. al* **Measured electron stopping powers for elemental absorbers.** Med. Phys. (E.E.U.U.)(23): 797. 1996.
- [3] Kawrahaw I. y A.F. Bielajew. **On the representation of electron multiple elastic-scattering distributions for Monte Carlo Calculations.** Nuclear Instruments and Methods. (Holanda)(134B): 325-336. 1998.
- [4] Kawrakow, I. y A.F. Bielajew. **On the condensed history technique for electron transport.** Nuclear Instruments and Methods. (Holanda)(142B): 253-280. 1998
- [5] Kawrakow, I. **Accurate condensed history Monte Carlo simulation of electron transport. I. EGSnrc, the new EGS4 version.** Med. Phys. (E.E.U.U.)(27): 485-498. 2000.
- [6] Kawrakow, I. **Accurate condensed history Monte Carlo simulation of electron transport. II. Application to ion chamber response simulations.** Med. Phys. (E.E.U.U.)(27) 499-513. 2000.
- [7] Namito Y. *et. al.* **Improvements of low-energy photon transport in EGS4.** Radiation Phys. Chem. (E.E.U.U.)(53): 283-294. 1998.
- [8] Kawrakow, I. *et. al.* **EGSnrcMP: the multi-platform environment for EGSnrc.** Technical Report PIRS-877. National Research Council of Canada. (Canada). 2003.
- [9] Nelson, W.R. *et. al.* **The EGS4 Code System.** Report SLAC-265. Stanford Linear Accelerator Center. (Stanford, California, E.E.U.U.). 1985.

- [10] Berger, M.J. **Monte Carlo Calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles** Methods in Comput. Physics (1) 135-215.1963.
- [11] Bielajew A. F. y otros **Improved bremsstrahlung photon angular sampling in the EGS4 code system**. Report PIRS-0203. National Research Council of Canada. (Canada). 1989
- [12] Motz, J.V. *et. al.* **Pair production by photons**. Rev. Mod. Phys. (E.E.U.U.)(41): 581-639. 1969.
- [13] Davies, H. *et. al.* **Theory of bremsstrahlung and pair production. II. Integral cross section for pair production**. Rev. Mod. Phys. (E.E.U.U.)(93): 788. 1954.
- [14] Storm E. y H.I. Israel. **Photon cross sections from 1 keV to 100 MeV for elements  $Z = 1$  to  $Z = 100$** . Atomic Data and Nuclear Data Tables. (E.E.U.U.)(7): 565-681. 1970.
- [15] Tsai, Y.S. **Pair production and bremsstrahlung of charged leptons**. Rev. Mod. Phys.(E.E.U.U.)(41): 815. 1974.
- [16] Butcher, J.C. y H. Messel. **Electron number distribution in electron-photons showers in air and aluminum absorbers**, Nucl. Phys. (Hollandia)(20): 15-128. 1960.
- [17] Bielajew, A.F. **Improved angular sampling for pair production in the EGS4 code system**. NRCC Report: PIRS-0287R. (Canada). 1994.
- [18] Klein, O. y Nishina Y. **Uber die streuung von strahlung durch freie elektronen nach der neuen relativistischen quantendynamik von Dirac**. A. fur Physik. (Alemania)(52):853-868. 1929.
- [19] Ribberfors, R. y K. Bergen. **Incoherent-x-ray-scattering functions and cross sections  $(d\sigma/d\Omega)_{incoh}$  by means of a pocket calculator**. Phys. Rev. A. (E.E.U.U.)(26): 3325. 1982.

- [20] Biggs, F. *et. al.* **Hartree-Fock Compton profiles for the elements.** Atomic Data and Nuclear Data Tables. (E.E.U.U.)(16): 201. 1975.
- [21] Brusa, D. *et. al.* **Fast sampling algorithm for the simulation of photon Compton scattering.** Nuclear Instruments and Methods. (Holanda)(379A): 167-175. 1996.
- [22] Lederer, C. y V.S. **Table of Isotope.** 7a. ed. New York, E.E.U.U.: Wiley. 1978.
- [23] Abramowitz M. e I. A. Stegun. **Handbook of mathematical functions with formulae, graphs and mathematical tables.** Applied Mathematics. (E.E.U.U.)(55). 1964.
- [24] Berger, M. J. y J.H. Hubbel. **XCOM: Photon cross sections on a personal computer.** Report NBSIR87-3597, NIST. (E.E.U.U.). 1987.
- [25] Lewis, E. E. y W. F. Miller. **Computational methods of Neuron Transport.** 1ra. ed. New York, E.E.U.U.: John Wiley and Sons. 1984.
- [26] Sauter, F. **Uber den atomaren photoeffekt in der K-shale nach der relativistischen wellenmechanik Diracs.** Ann. Physick. (Alemania)(11): 454-488. 1931.
- [27] Bielajew, A. F. y D.W.O. Rogers. **Photoelectron angular distribution in the EGS4 code system.** Report PIRS-0058. National Research Council of Canada. (Canada). 1986.
- [28] Hubbel, J.H. e I. Øverbø. **Relativistics atomic form factors and photon coherent scattering cross sections.** J. Phys. Chem. Ref. Data (E.E.U.U.)(9): 69. 1979.
- [29] Koch, H. W. y J.W. Motz. **Bremsstrahlung cross-section formulas and related data** Rev. Mod. Phys. (E.E.U.U.)(31): 920-955. 1985
- [30] Seltzer, S. M. y M. J. Berger. **Bremsstrahlung spectra from electron interactions with screened atomic nuclei and orbital electrons.** Nucl. Inst. Meth. Phys. (Holanda)(12B): 95-134.1985.

- [31] Seltzer, S. M. y M. J. Berger. **Bremsstrahlung energy spectra from electrons with kinetic energy from 1 keV to 10 GeV incident on screened nuclei and orbital electrons of neutral atoms with  $Z=1-100$**  Atomic Data and Nuclear Data Tables. (E.E.U.U.)(35) 345-418. 1986.
- [32] ICRU. **Stopping powers for electrons and positrons** ICRU Report 37 (Washington) 1984.
- [33] Rogers, D.W.O. y otros **Use of ICRU-37/NBS radiative stopping powers in the EGS4 system.** Report PIRS-0177. National Research Council of Canada. (Canada) 1989
- [34] Berger, M.J. y S.M. Seltzer. **Tables of energy losses and ranges of electrons and positrons** NASA Report SP-3012. Washington D.C. 1964
- [35] Bethe, H.A. **Theory of passage of swift corpuscular rays through matter.** Ann. Physik. (Alemania)(5) 325. 1930
- [36] Bethe, H.A. **Scattering of electrons** Z. fur Physic. (Alemania)(76) 293. 1932.
- [37] Bloch, F. **Stopping power of atoms with several electrons** Z. fur Physic. (Alemania)(81) 363. 1933.
- [38] Molière, G.Z. **Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen. II. Mehrfach und Vielfachstreuung** Z. Naturforsch. (Alemania) (3a) 78-97. 1948.
- [39] Molière, G. Z. **Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen. I. Einzelstreuung am abgeschirmtem Coulom-Field** Z. Naturforsch. (Alemania) (2a) 133-145. 1947.
- [40] Li, X.A. y D.W.O. Rogers **Electron mass scattering powers: Monte Carlo and analytical calculations.** Med. Phys. (E.E.U.U.)(22): 531-541. 1995.
- [41] Motz, J.W. y otros. **Electron scattering with atomic or nuclear excitation.** Rev. Mod. Phys. (Amsterdam)(36) 881-928. 1964.

- [42] Kawrakow, I. **Improved modeling of multiple scattering in the Voxel Monte Carlo Model.** Med. Phys. (E.E.U.U.) (24) 505-517. 1997.
- [43] Goudsmit, S.A. y J.L. Sauderson. **Multiple scattering of electrons** Phys. Rev. (Amsterdam)(57) 24-29. 1940.
- [44] Goudsmit, S.A. y J.L. Sauderson. **Multiple scattering of electrons. II** Phys. Rev. (Amsterdam)(58) 36-42. 1940.
- [45] Larsen, E. W. **A theoretical derivation of the condensed history algorithm.** Ann. Nucl. Energy. (19) 701-714. 1995.
- [46] Kawrakow, I. **Electron transport: longitudinal and lateral correlation algorithm.** Nuclear Instruments and Methods. (Amsterdam)(B114) 307-326. 1996.
- [47] Lewis, H. W. **Multiple scattering in a infinite medium.** Phys. Rev. (Amsterdam)(78) 526-529. 1950
- [48] Bielajew, A.F. y otros. **Monte Carlos simulation of ion chamber response to  $^{60}\text{Co}$  - Resolution of anomalies associated with interfaces.** Phys. Med. Biol. (30) 419-428. 1985.
- [49] Foote, B.J. y V. G. Smyth. **The modelling of electron multiple-scattering in EGS4/PRESTA and its effect on ionization-chamber response.** Nuclear Instruments and Methods. (Amsterdam)(B100) 22-30. 1995
- [50] Rogers, D.W.O. **Low energy electron transport with EGS.** Nuclear Instruments and Methods. (Amsterdam)(227) 535-548. 1984
- [51] Ma, C.M. y A.E. Nahum. **A new algorithm for EGS4 low-energy electron transport to account for the change in discrete interaction cross-section with energy** Nuclear Instruments and Methods. (Amsterdam)(B72). 319-330. 1992

- [52] Hossain, Syed Mohammad. A critical comparison and evaluation of methods for the annual radiation dose determination in the luminescence dating of sediments. Ph.D. in Science Thesis. Universiteit Gent, Institute for Nuclear Sciences. 2003. 209pp.
- [53] Rogers D.W.O. **More realistic Monte Carlo calculations of photon detector response functions** Nuclear Instruments and Methods (Amsterdam)(199) 531-548. 1982.
- [54] Helt-Hansen, Jakob. Development of a Portable Triple Silicon Detector Telescope for Beta Spectroscopy and Skin Dosimetry. Ph.D. Thesis. University of Copenhagen, Denmark. Riso National Laboratory. 2000. 154pp.
- [55] Pérez Figueroa, Héctor. Caracterización del contenido radiactivo gamma del suelo de la costa sur de Guatemala. Tesis Lic. en Física Aplicada. Universidad de San Carlos de Guatemala, Facultad de Ingeniería, 2001. 56pp.
- [56] Gómez Vargas, José Diego. Mapeo radiactivo gamma del suelo de la región volcánica de Guatemala. Tesis Lic. en Física Aplicada. Universidad de San Carlos de Guatemala, Facultad de Ingeniería, 2005. 78pp.
- [57] Moens, L. y otros. **Calculations of the absolute peak efficiency of gamma-ray detectors for different counting geometries** Nuclear Instruments and Methods (Amsterdam)(187) 451-472. 1981.
- [58] Marsaglia G. y otros **Toward a universal random number generator.** Stats. and Prob. Let. (8): 35-39. 1990.
- [59] Lsher, M. **A portable high quality random number generator for lattice field theory simulations** Computer Phys. Commun. (79): 100-110. 1994.
- [60] James, F. **RANLUX: A Fortran implementation of the high-quality pseudorandom number generator of Lsher** Computer Phys. Commun. (79):111-114. 1994.