

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

SIMULACIÓN DEL PASO DE FOTONES CON ENERGIAS ≤ 1,0 MeV A TRAVÉS DE LA MATERIA EN FÍSICA MÉDICA

José Luis Álvarez González

Asesorado por el Lic. Ramiro Amahán Sánchez Álvarez

Guatemala, noviembre de 2014

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



FACULTAD DE INGENIERÍA

SIMULACIÓN DEL PASO DE FOTONES CON ENERGIAS ≤ 1,0 MeV A TRAVÉS DE LA MATERIA EN FÍSICA MÉDICA

TRABAJO DE GRADUACIÓN

PRESENTADO A LA JUNTA DIRECTIVA DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA POR

JOSÉ LUIS ÁLVAREZ GONZÁLEZ

ASESORADO POR EL LIC. RAMIRO AMAHÁN SÁNCHEZ ÁLVAREZ

AL CONFERÍRSELE EL TÍTULO DE

LICENCIADO EN FÍSICA APLICADA

GUATEMALA, NOVIEMBRE DE 2014

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA FACULTAD DE INGENIERÍA



NÓMINA DE JUNTA DIRECTIVA

| DECANO | Ing. Murphy Olympo Paiz Recinos |
|------------|-------------------------------------|
| VOCAL I | Ing. Alfredo Enrique Beber Aceituno |
| VOCAL II | Ing. Pedro Antonio Aguilar Polanco |
| VOCAL III | Inga. Elvia Miriam Ruballos Samayoa |
| VOCAL IV | Br. Narda Lucía Pacay Barrientos |
| VOCAL V | Br. Walter Rafael Véliz Muñoz |
| SECRETARIO | Ing. Hugo Humberto Rivera Pérez |

TRIBUNAL QUE PRACTICÓ EL EXAMEN GENERAL PRIVADO

| DECANO | Ing. Murphy Olympo Paiz Recinos |
|------------|--|
| EXAMINADOR | Ing. José Rodolfo Samayoa Dardón |
| EXAMINADOR | Ing. Walter Giovanni Álvarez Marroquín |
| EXAMINADOR | Lic. Ramiro Amahán Sánchez Álvarez |
| SECRETARIO | Ing. Hugo Humberto Rivera Pérez |

HONORABLE TRIBUNAL EXAMINADOR

En cumplimiento 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 DEL PASO DE FOTONES CON ENERGIAS ≤ 1.0 MeV A TRAVÉS DE LA MATERIA EN FÍSICA MÉDICA

Tema que me fuera asignado por la Dirección de la Escuela de Ciencias, con fecha 22 de noviembre de 2013.

José Luis Álvarez González



Guatemala, 03 de noviembre del 2014.

Ing. Edwin Adalberto Bracamonte DIRECTOR, ESCUELA DE CIENCIAS FACULTAD DE INGENIERIA USAC, Ciudad

Estimado Ingeniero Bracamonte:

Me dirijo a usted para informarle que he realizado la revisión de la tesis del trabajo de graduación "SIMULACIÓN DEL PASO DE FOTONES CON ENERGIAS ≤ 1.0 MeV A TRAVÉS DE LA MATERIA EN FÍSICA MÉDICA", presentado por el estudiante José Luis Álvarez González; con carné No. 199811773; y considerando que cumple con los objetivos de la carrera de Licenciatura en Física Aplicada, le doy mi aprobación como asesor de dicha tesis.

> Muy Atentamente, "ID Y ENSEÑAD A TODOS"

aham Sanchez Alwarez

Lic. Ramiro Amáhan Sánchez Álvarez Asesor de tesis

c.c. Archivo



Guatemala, 17 de noviembre del 2014.

Ing. Edwin Adalberto Bracamonte DIRECTOR, ESCUELA DE CIENCIAS FACULTAD DE INGENIERIA USAC, Ciudad

Estimado Ingeniero Bracamonte:

Me dirijo a usted para informarle que he realizado la revisión de la tesis del trabajo de graduación "SIMULACIÓN DEL PASO DE FOTONES CON ENERGIAS ≤ 1.0 MeV A TRAVÉS DE LA MATERIA EN FÍSICA MÉDICA", presentado por el estudiante José Luis Álvarez González; con carné No. 199811773; y considerando que cumple con los objetivos de la carrera de Licenciatura en Física Aplicada, le doy mi aprobación como coordinador de dicha carrera.

Muy Atentamente,

"ID Y ENSEÑAD A TODOS"



Lic. Ricardo Contreras

Coordinador de la Carrera de Licenciatura en Física

c.c. Archivo

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



FACULTAD DE INGENIERÍA ESCUELA DE CIENCIAS Ref. E.C. 104-2014

El Director de la Escuela de Ciencias de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala, después de conocer el dictamen del asesor, con el visto bueno del Coordinador de la Carrera de Licenciatura en Física Aplicada al trabajo de graduación del estudiante *José Luis Álvarez González*, titulado "SIMULACIÓN DEL PASO DE FOTONES CON ENERGÍAS \leq 1.0 MeV A TRAVÉS DE LA MATERIA EN FÍSICA MÉDICA", procede a la autorización del mismo.

Ing. Edwin Adalberto Bracamonte Orozco Director Escuela de Ciencias



Guatemala, 24 de noviembre de 2014 EABOP/scvs

Áreas: Departamento de Matemática, Departamento de Física, Área Social Humanística, Área Técnica Complementaria, Área Idioma Técnico, Área Química General, Área Estadística, Área de Deportes. Carreras: Ingeniería Química, Ingeniería Industrial, Ingeniería Mecánica, Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Mecánica Eléctrica, Ingeniería Electrónica, Ingeniería en Ciencias y Sistemas, Ingeniería Civil, Licenciatura en Matemática Aplicada, Licenciatura en Física Aplicada, Ingeniería Ambiental. Edificio T-4 Ciudad Universitaria, Zona 12, Guatemala, Centroamérica Universidad de San Carlos de Guatemala



Facultad de Ingeniería Decanato

Ref.DTG.688.2013

El Decano de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer la aprobación por parte del Director de la Escuela de Ciencias, al trabajo de graduación titulado: SIMULACIÓN DEL PASO DE FOTONES CON ENERGÍAS ≤ 1,0 MeV A TRAVÉS DE LA MATERIA EN FÍSICA MÉDICA, presentado por el estudiante universitario: José Luis Álvarez González y después de haber culminado las revisiones previas bajo la responsabilidad de las instancias correspondientes, se autoriza la impresión del mismo.

STOLIAD CARD

IMPRÍMASE. O DE SAN CARLOS DE Ing. Murphy Dlympo Pai cinos DECAN Decano TAD DE INGEN

Guatemala, noviembre de 2014

/cc

ACTO QUE DEDICO A:

| Dios | Por todo su amor, complacencia e inspiración en mi carrera, entre otras infinitas cosas. |
|------------------|--|
| La Virgen María | Por todo su amor y por interceder en mis proyectos. |
| San Judas Tadeo | Por interceder y ayudarme a alcanzar mis metas. |
| Mi madre | María Catalina González Marín, por su amor e inculcarme los estudios con esfuerzo y sacrificio. |
| Mi novia | Estela Piedad Pérez Rojas, por su amor, apoyo y por ser una importante influencia y motivación en mi carrera, entre otras cosas. |
| Mis hermanos | Edgar y Héctor Álvarez González, por su amor y ejemplo. |
| Todos los que no | |
| creyeron | |

AGRADECIMIENTOS A:

| La Universidad de San Carlos de Guatemala | Por ser una importante influencia en mi carrera, entre otras cosas. |
|---|---|
| Facultad de Ingeniería | Por ser una motivación en mi carrera. |
| Lic. Amahán Sánchez | Por amistad e invaluable apoyo estudiantil. |
| Los bodegueros de los laboratorios de física | Por su amistad y por mantener los laboratorios de física en las mejores condiciones. |
| Lic. Fernando Arqueros | Por compartir sus conocimientos sin egoísmo con un estudiante extranjero y desconocido. |
| Ing. Murphy Paiz | Por su amistad y sus proyectos en la Facultad. |
| Ing. Dilma Mejicanos | Por su dedicación y apoyo altruista a todos los estudiantes. |
| Ing. Rodolfo Samayoa | Por sus clases magistrales llenas de una excelente calidad y vocación. |
| Lic. William Polanco | Porque un día me dio un consejo al inicio de mis estudios. |
| Todos | Aquellos que por falta de espacio no menciono. |

ÍNDICE GENERAL

| ÍNDI | CE DE IL | USTRACI | ONES | V |
|------|----------|-----------|--|------|
| LIST | A DE SÍN | MBOLOS | | IX |
| GLO | SARIO | | | XI |
| RES | UMEN | | | XIII |
| OBJ | ETIVOS. | | | XV |
| INTF | RODUCC | IÓN | | XVII |
| | _ | _ | | |
| 1. | FÍSICA | MÉDICA. | | 1 |
| | 1.1. | Breve hi | storia de la física | 1 |
| | | 1.1.1. | Teorías centrales de la física | 6 |
| | 1.2. | La radia | ción | 7 |
| | 1.3. | Radiacti | vidad | 9 |
| | 1.4. | La ioniza | ación | 13 |
| | 1.5. | Efectos | de la radiación en los seres vivos | 14 |
| | 1.6. | Tópicos | de la física médica | 17 |
| | | 1.6.1. | El cáncer | 17 |
| | | 1.6.2. | Radioterapia | 20 |
| | | 1.6.3. | Tipos de radioterapia | 22 |
| | | 1.6.4. | Dosimetría | 25 |
| | | 1.6.5. | Tolerancia radiación-tumor | 28 |
| | | 1.6.6. | Magnitudes y unidades en física médica | 28 |
| | | 1.6.7. | Efectos biológicos: dosis equivalente y efectiva | 29 |
| | | 1.6.8. | Medidas dosimétricas | 30 |

| FÍSICA | DE RADIA | CIONES | 33 |
|--------|---|--|---|
| 2.1. | Interacció | on de la radiación con la materia | 33 |
| 2.2. | Clasificad | ión de las radiaciones ionizantes | 34 |
| 2.3. | Estructura | a atómica básica | 34 |
| 2.4. | Interacció | on entre un átomo y la radiación incidente | 39 |
| 2.5. | Sección e | eficaz | 41 |
| 2.6. | Interacció | on de los fotones con la materia | 42 |
| | 2.6.1. | Efecto fotoeléctrico | 43 |
| | 2.6.2. | La aproximación de Born (no relativista) del | |
| | | efecto fotoeléctrico | 44 |
| | 2.6.3. | Dispersión coherente o Rayleigh | 45 |
| | 2.6.4. | Dispersión coherente en la aproximación del | |
| | | factor de forma | 46 |
| | 2.6.5. | Dispersión incoherente o Compton | 50 |
| | 2.6.6. | Creación de pares | 52 |
| | 2.6.7. | Reacciones fotonucleares | 54 |
| MÉTOD | OS DE MO | ONTE CARLO (MC) | 57 |
| 3.1. | Introducc | ión al uso de métodos de Monte Carlo en física | |
| | médica | | 57 |
| | 3.1.1. | Conceptos básicos | 57 |
| 3.2. | Hardware | para simulaciones | 60 |
| 3.3. | Algoritmo | s de Monte Carlo | 61 |
| 3.4. | Aplicacio | nes físicas de Monte Carlo | 61 |
| 3.5. | Número o | le historias (pistas o <i>tracks</i>) | 63 |
| 3.6. | Tipos de | software de Monte Carlo | 65 |
| IMPLEN | 1ENTACIÓ | N DE UN ALGORITMO SIMPLE CON MC | 69 |
| 4.1. | Física de | problema | 69 |
| | FÍSICA 2.1. 2.2. 2.3. 2.4. 2.5. 2.6. MÉTOD 3.1. 3.2. 3.3. 3.4. 3.5. 3.6. IMPLEN 4.1. | FÍSICA DE RADIA 2.1. Interacció 2.2. Clasificad 2.3. Estructura 2.4. Interacció 2.5. Sección e 2.6. Interacció 2.6.1. 2.6.1. 2.6.2. 2.6.3. 2.6.4. 2.6.5. 2.6.5. 2.6.6. 2.6.7. 2.6.7. MÉTODOS DE MO 3.1. 3.1. Introducc médica 3.1.1. 3.2. Hardware 3.3. Algoritmo 3.4. Aplicacion 3.5. Número do 3.6. Tipos de IMPLEMENTACIÓ Física de | FÍSICA DE RADIACIONES. 2.1. Interacción de la radiación con la materia 2.2. Clasificación de las radiaciones ionizantes 2.3. Estructura atómica básica 2.4. Interacción entre un átomo y la radiación incidente 2.5. Sección eficaz 2.6. Interacción de los fotones con la materia 2.6.1. Efecto fotoeléctrico 2.6.2. La aproximación de Born (no relativista) del efecto fotoeléctrico 2.6.3. Dispersión coherente o Rayleigh. 2.6.4. Dispersión coherente en la aproximación del factor de forma 2.6.5. Dispersión incoherente o Compton 2.6.6. Creación de pares 2.6.7. Reacciones fotonucleares MÉTODOS DE MONTE CARLO (MC) 3.1. Introducción al uso de métodos de Monte Carlo en física médica. 3.1.1. Conceptos básicos 3.2. Hardware para simulaciones 3.3. Algoritmos de Monte Carlo 3.4. Aplicaciones físicas de Monte Carlo 3.5. Número de historias (pistas o <i>tracks</i>) 3.6. Tipos de software de Monte Carlo MENTACIÓN DE UN ALGORITMO SIMPLE CON MC. 4.1. Física del problema |

| | 4.2. | Implement | tación del métod | o de MC | C al al | goritmo simp | ole | . 80 |
|-----|---------|-------------|---------------------|-----------|---------|--------------|---------|------|
| | | 4.2.1. | Método directo. | | | | | . 80 |
| | | 4.2.2. | Método de rech | azo | | | | . 81 |
| | 4.3. | Simulació | n del paso de fot | ones de | e baja | energía a tr | avés de | |
| | | la materia | con el método d | e Monte | e Carl | 0 | | . 82 |
| | 4.4. | El algoritm | no simple de Mor | nte Carlo | 0 | | | . 87 |
| | | | | | | | | |
| 5. | RESUL | FADOS | | | | | | . 95 |
| | 5.1. | Resultado | s generados | con | el | algoritmo | simple | |
| | | implement | tado en este trab | ajo | | | | . 96 |
| | 5.2. | Comparac | ción de los resulta | ados ob | tenido | os con EGS4 | ŧ | 115 |
| | | | | | | | | |
| CON | CLUSION | ES | | | | | | 123 |
| REC | OMENDA | CIONES | | | | | | 125 |

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

FIGURAS

| 1. | Pioneros en los estudios de la radiactividad | 11 |
|-----|---|----|
| 2. | La radiación mata células sanas adyacentes a los tumores | 15 |
| 3. | Detectores de radiación | 15 |
| 4. | Cuantificación de la energía depositada en un medio material | 16 |
| 5. | Leucemia linfocítica aguda: muestra las células linfáticas teñidas de | ; |
| | oscuro que aparecen en la leucemia | 18 |
| 6. | Sarcoma de la vena cava inferior | 19 |
| 7. | Carcinoma de pulmón | 19 |
| 8. | Tomógrafo para imágenes médicas | 23 |
| 9. | Simulador de tratamientos con radioterapia | 24 |
| 10. | Unidades de Co-60 y aceleradores lineales | 24 |
| 11. | Dosimetría física: controles de calidad | 26 |
| 12. | Dosimetría clínica: planificadores | 27 |
| 13. | Sistema de planificación por campos | 27 |
| 14. | Irradiación de órganos humanos | 30 |
| 15. | Curvas de isodosis en tórax | 31 |
| 16. | Definición de área cerebral a irradiar | 32 |
| 17. | Energías de ionización experimentales de las capas K , L1 – L3 y | / |
| | M1 – M5 de los átomos neutros | 39 |
| 18. | Efecto fotoeléctrico | 43 |
| 19. | Dispersión Rayleigh | 46 |
| 20. | Factores de forma atómicos de C, Cu y Pb | 48 |
| 21. | Secciones eficaces Rayleigh de C, Cu y Pb | 49 |

| 22. | Efecto Compton | 50 |
|-----|--|----|
| 23. | Creación de pares | 52 |
| 24. | Secciones eficaces de creación de pares y tripletes | 54 |
| 25. | Planificación de tratamiento con Monte Carlo | 59 |
| 26. | Clusters de computadoras | 60 |
| 27. | Simulaciones de un haz de radiación con Monte Carlo | 62 |
| 28. | Simulación gráfica de una interacción radiación-materia | 64 |
| 29. | Publicaciones en diversas categorías de MC, 2008 | 67 |
| 30. | Hidrógeno Z = 1 | 70 |
| 31. | Oxígeno Z = 8 | 70 |
| 32. | Aluminio Z = 13 | 71 |
| 33. | Plomo Z = 82 | 71 |
| 34. | Regiones de dominio del efecto Compton, del efecto fotoeléctrico | у |
| | de la creación de pares | 73 |
| 35. | Sección eficaz diferencial del efecto Compton | 75 |
| 36. | Representación esquemática de un track para un SRL | 85 |
| 37. | Diagrama de flujo del algoritmo simple con Monte Carlo | 86 |
| 38. | Representación de haces de radiación | 88 |
| 39. | Representación esquemática de la distribución angular de fotone | S |
| | transmitido o reflejados | 89 |
| 40. | Representación esquemática de la distribución energética de | е |
| | fotones transmitido o reflejados | 90 |
| 41. | Representación esquemática del espectro de energía absorbida | 91 |
| 42. | Editor de texto plano Notepadd++ | 92 |
| 43. | Plantilla de inicio del software en MATLAB | 93 |
| 44. | Esquema de fotones a través de la materia | 95 |
| 45. | Geometría plana para un haz de fotones a través del aluminio d | е |
| | $0,2\lambda$ (gráfica de trayectorias) | 97 |

| 46. | Geometría plana para un haz de fotones a través del aluminio de |
|-----|---|
| | $0,2\lambda$ (gráfica de puntos) |
| 47. | Geometría plana para un haz de fotones a través del aluminio de |
| | 1λ (gráfica de trayectorias) |
| 48. | Geometría plana para un haz de fotones a través del aluminio de |
| | 1λ (gráfica de puntos) |
| 49. | Geometría plana para un haz de fotones a través del aluminio de |
| | 5λ (gráfica de trayectorias) |
| 50. | Geometría plana para un haz de fotones a través del aluminio de |
| | 5λ (gráfica de puntos) |
| 51. | Distribución angular de fotones transmitidos, $0,2\lambda$ |
| 52. | Distribución angular de fotones transmitidos, 1λ |
| 53. | Distribución angular de fotones transmitidos, 5λ |
| 54. | Distribución angular de fotones reflejados, $0,2\lambda$ |
| 55. | Distribución angular de fotones reflejados, 1λ |
| 56. | Distribución angular de fotones reflejados, 5λ |
| 57. | Distribución energética de fotones transmitidos, $0,2\lambda$ |
| 58. | Distribución energética de fotones transmitidos, 1λ |
| 59. | Distribución energética de fotones transmitidos, 5λ |
| 60. | Distribución energética de fotones reflejados, 0,22 110 |
| 61. | Distribución energética de fotones reflejados, 1λ 111 |
| 62. | Distribución energética de fotones reflejados, 5λ |
| 63. | Dosis de energía absorbida, $0,2\lambda$ |
| 64. | Dosis de energía absorbida, 1 λ |
| 65. | Dosis de energía absorbida, 5λ |
| 66. | Espectro de energía absorbida, $0,2\lambda$ |
| 67. | Espectro de energía absorbida, 1λ |
| 68. | Espectro de energía absorbida, 5λ |
| 69. | Aluminio Z = 13, E = 1,0 MeV, 0,2λ |

| 70. | Aluminio Z = 13, E = 1,0 MeV, 1λ | 119 |
|-----|--|-----|
| 71. | Aluminio Z = 13, E = 1,0 MeV, 5λ | 120 |
| 72. | Agua, E = 1,0 MeV, 50 centímetros | 121 |

TABLAS

| I. | Tolerancia de tejidos y órganos expuestos a la radiación | .21 |
|-----|--|-----|
| II. | Datos de Messel y Crawford | .78 |

LISTA DE SÍMBOLOS

| Símbolo | Significado |
|---------|---|
| | |
| MeV | 10° eV |
| m Rad | 1/100 Gy |
| theta | $oldsymbol{	heta}$ (Unidad de ángulo plano, en grados) |
| Röntgen | $1R = 2,58 \cdot 10^{-4}$ C/kg (donde C: Coulomb kg: kilogramo) |
| cm | Centímetro |
| str | Estereorradián |
| Gy | Gray |
| KeV/u | kilo-eV por unidad de masa atómica |
| Sv | Sievert |

GLOSARIO

- Algoritmo Porción de código estructurado, sinónimo de software.
- Cáncer Enfermedad celular.
- Dosimetría Es el cálculo de la dosis absorbida en tejidos y materia, como resultado de la exposición a la radiación ionizante, tanto de manera directa como indirecta, la dosimetría puede ser física y clínica.
- Estocástico Es un sistema cuyo comportamiento es no determinista en la medida que el subsiguiente estado del sistema está determinado, tanto por las acciones predecibles del proceso como por elementos aleatorios.
- Física médicaEs una rama de la física, es multidisciplinaria, pues
aplica conceptos y técnicas básicas y específicas de
la física, biología al área médica.
- FotopicoEs un máximo en el espectro situado en la energíaincidente de los fotones.

Hardware Se refiere a todas las partes tangibles de un sistema informático; sus componentes físicos, eléctricos, electrónicos, y mecánicos.

Historias También llamadas pistas o *tracks* en los métodos de Monte Carlo, y es la unidad de un proceso que pasa por distintos estados dentro de un sistema de estudio.

Ionización Fenómeno químico o físico mediante el cual se producen iones, estos son átomos o moléculas cargadas eléctricamente debido al exceso o falta de electrones respecto a un átomo o molécula neutra.

- Métodos de MonteTambién Ilamado técnicas de Monte Carlo, sonCarlotécnicas numéricas de simulación que utiliza la
aplicación de números aleatorios a un problema, por
lo general estocástico y probabilístico.
- Simulación Técnica numérica para conducir experimentos en una computadora utilizando algoritmos.

Software Porción de código conocido como programa informático, que permite realizar tareas específicas con las computadoras.

Radiactividad Fenómeno físico por el cual los núcleos de algunos elementos químicos, llamados radiactivos, emiten radiaciones.

XII

RESUMEN

Cuando un haz de fotones interacciona con un medio material, normalmente el número de procesos que tienen lugar es tan elevado que es imposible predecir los resultados de tal interacción. Esto conduce a la necesidad de realizar simulaciones numéricas del proceso de interacción. La forma más precisa de realizar estas simulaciones es utilizar el llamado método de Monte Carlo, que permite resolver problemas matemáticos mediante la simulación de variables aleatorias.

Este método proporciona toda la información posible a partir de la cual se pueden obtener valores medios y fluctuaciones, entre otros. El método de Monte Carlo para la simulación de procesos físicos es perfectamente conocido desde hace mucho tiempo, pero dado que es necesario simular un gran número de casos para conseguir resultados con significancia estadística, su uso es efectivo cuando se utiliza un computador. Su potencia se muestra en aquellos problemas que no pueden tratarse analíticamente o cuyo tratamiento es demasiado complicado.

En este trabajo se implementa "un algoritmo simple de Monte Carlo" al que se denominará dentro del trabajo el "algoritmo simple de MC", para la simulación del paso de fotones de baja energía a través de cualquier material homogéneo con un tipo de geometría plana. Este algoritmo se ha implementado mediante un programa de ordenador llamado MATLAB, que permite visualizar el paso de la radiación a través de distintos materiales y obtener datos y gráficas correspondientes a la simulación realizada.

XIII

OBJETIVOS

General

Simular por computadora el paso de fotones con energías \leq 1,0 MeV a través de la materia utilizando los métodos de Monte Carlo.

Específicos

- Determinar los procesos energéticos que tienen lugar en la interacción materia-energía a energías ≤ 1,0 MeV.
- 2. Determinar la distribución de energía de los fotones transmitidos a la materia.

INTRODUCCIÓN

El estudio e investigación del paso de fotones a través de la materia tiene interés en varios campos y aplicaciones del saber humano, en la física tiene particular interés en varios campos como: astrofísica, biofísica, física de partículas, física de altas energías, física nuclear, física médica; en este último caso y en particular en radioterapia, radioprotección y radiodiagnóstico, es sumamente importante conocer la cantidad de energía depositada en el medio (tejido humano). El rango de energía en torno a 1,0 MeV es típico de la mayor parte de las fuentes radiactivas naturales de uso médico.

Cuando un haz de fotones interacciona con un medio material, normalmente el número de procesos que tienen lugar es tan elevado que es imposible predecir los resultados de tal interacción. Esto conduce a la necesidad de realizar simulaciones numéricas del proceso de interacción. La forma más precisa de realizar estas simulaciones es utilizar el llamado método de Monte Carlo, que permite resolver problemas matemáticos mediante la simulación de variables aleatorias por computadora.

Existen potentes programas (de computadora) para la simulación del paso de radiación ionizante a través de la materia que se usan profesionalmente en diferentes campos de la física, por ejemplo EGS4 entre muchos otros que hay en el mercado con distintos fines, los resultados con estos programas son de gran exactitud y precisión. Estos programas son muy complejos, lo que hace que su manejo no sea inmediato por parte de un usuario no iniciado e incluso su implementación no siempre es factible por falta de recursos económicos.

XVII

Para una energía de los fotones menor que 1,02 MeV la creación de pares no puede ocurrir. Este hecho junto con otros que se comentarán a lo largo del trabajo simplifica en gran medida el algoritmo simple que se implementa en este documento, de modo que se desarrolló teniendo en cuenta solo el efecto fotoeléctrico y el efecto Compton.

Este trabajo inicia con algunos tópicos de la física médica, pues el desarrollo de este trabajo está orientado a esta disciplina, los tópicos serán una muy breve introducción, pues en ningún momento se pretende ahondar en todo su que hacer, también es necesario por no decir obligatorio, dar un muy breve repaso histórico de la física y que llevo a desarrollar esta extraordinaria disciplina.

Todo esto está contenido en el capítulo 1 de este trabajo, por dos propósitos significativos se ha incluido, el primero es dar el respectivo reconocimiento, valor y humilde homenaje a todos aquellos físicos, matemáticos, científicos, filósofos, catedráticos, investigadores y otros especialistas en los saberes del ser humano, que de manera directa o indirecta e incluso accidental (sin hacer uso del método científico) contribuido con su trabajo, ingenio, sacrificio, disciplina y hasta con sus vidas a la construcción del saber humano y en especial de la física.

Y segundo, por orientar con una guía al lector de este trabajo a navegar por el inmenso número de disciplinas que se desprenden de la maravillosa ciencia que es la física, que también se complementan unas con otras para la construcción de nuevos conocimientos y que han contribuido a la física médica, y cuya historia también es fascinante; y de paso cubrir con este capítulo algunas terminologías importantes para el mejor entendimiento de los siguientes capítulos.

XVIII

En el capítulo 2 se desarrolla la física de radiaciones. En el capítulo 3 se describe en qué consisten los métodos de Monte Carlo, las justificaciones a las diversas aproximaciones que se han realizado, y en el capítulo 4 la implementación del algoritmo simple con Monte Carlo.

"Aquí tengo un ramillete de flores escogidas; nada mío hay en él, sino el cordón que las ata". Montaigne

> "...hágase conmigo conforme a tu palabra" Lucas 1:38

"Los sueños que no se cumplen no es porque sean imposibles, sino porque las personas deja de creer en ellos" Anónimo

> "Porque no me escogiste tú a mí, sino que yo a tí" Juan 15:16

> > "Al final Dios redime todas las cosas" j_lag

> > > "La luz es la sombra de Dios" Albert Einstein

"La verdad siempre se halla en la simplicidad y no en la multiplicidad" Sir Isaac Newton

> "Hazlo tan simple como sea posible pero no más" Albert Einstein

XXII

1. FÍSICA MÉDICA

1.1. Breve historia de la física

La física (del latín *physica*, y este del griego. τάφυσικά, neutro plural de φυσικός, "naturaleza") es la ciencia natural que estudia las propiedades y el comportamiento de la energía y la materia (como también cualquier cambio en ella que no altere la naturaleza de la misma), así como al tiempo, espacio y las interacciones de estos cuatro conceptos entre sí.

La física es una de las más antiguas disciplinas académicas. En los últimos dos milenios, la física fue considerada dentro de lo que ahora se llama filosofía, química, y ciertas ramas de la matemática y la biología, pero durante la Revolución Científica en el siglo XVII surgió para convertirse en una ciencia moderna, única por derecho propio. Sin embargo, en algunas esferas como la física matemática y la química cuántica, los límites de la física siguen siendo difíciles de distinguir.

La física no es solo una ciencia teórica; es sobre todo una ciencia experimental, en su intento de describir los fenómenos naturales con exactitud y veracidad, ha llegado a límites impensables, el conocimiento actual abarca la descripción de partículas fundamentales microscópicas, el nacimiento de las estrellas en el universo macroscópico e incluso conocer con una gran probabilidad lo que aconteció en los primeros instantes del nacimiento del universo, por citar unos pocos campos.

1

Esta tarea comenzó hace más de 2 000 mil años con los primeros trabajos de filósofos griegos como Demócrito, Eratóstenes, Aristarco, Epicuro o Aristóteles, y fue continuada después por científicos como Galileo Galilei, Isaac Newton, Leonhard Euler, Joseph-Louis de Lagrange, Michael Faraday, Gauss, William Rowan Hamilton, Rudolf Clausius, James Clerk Maxwell, Hendrik Antoon Lorentz, Albert Einstein, Niels Bohr, Max Planck, Werner Heisenberg, Paul Dirac, Richard Feynman, entre muchos otros, y solo por mencionar a algunos.

Se conoce que la mayoría de las civilizaciones de la antigüedad trataron desde un principio de explicar el funcionamiento de su entorno; miraban las estrellas y pensaban cómo ellas podían regir su mundo. Esto llevó a muchas interpretaciones de carácter más filosófico que físico; no en vano en esos momentos a la física se le llamaba Filosofía Natural. Muchos filósofos se encontraron en el desarrollo primigenio de la física, como Aristóteles, Tales de Mileto o Demócrito, por ser los primeros en tratar de buscar algún tipo de explicación a los fenómenos que les rodeaban. A pesar de que las teorías descriptivas del universo que dejaron estos pensadores eran erradas, estas tuvieron validez por mucho tiempo, casi 2 000 mil años, en parte por la aceptación de la iglesia católica de varios de sus preceptos, como la teoría

Esta etapa denominada oscurantismo en la ciencia de Europa, termina cuando el canónigo y científico Nicolás Copérnico, considerado padre de la astronomía moderna y es otro personaje al cual se le considera el padre de la física como se conoce ahora. Después un catedrático de matemáticas de la Universidad de Pisa a finales del siglo XVI cambiaría la historia de la ciencia, empleando por primera vez experimentos para comprobar sus aseveraciones: Galileo Galilei, mediante el uso del telescopio para observar el firmamento y sus

2

trabajos en planos inclinados, Galileo empleó por primera vez el Método Científico y llegó a conclusiones capaces de ser verificadas. A sus trabajos se les unieron grandes contribuciones por parte de otros científicos como Johannes Kepler, Blaise Pascal y Christian Huygens.

Posteriormente, en el siglo XVII, un científico inglés reúne las ideas de Galileo y Kepler en un solo trabajo, unifica las ideas del movimiento celeste y las de los movimientos en la Tierra, a lo que él llamó gravedad. En 1687, Isaac Newton, en su obra *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica*, formuló los tres principios del movimiento y una cuarta Ley de la Gravitación Universal, que transformaron por completo el mundo físico; todos los fenómenos podían ser vistos de una manera mecánica.

El trabajo de Newton en este campo perdura hasta la actualidad; todos los fenómenos macroscópicos pueden ser descritos de acuerdo a sus tres leyes, surgiendo así las teorías de la mecánica clásica afinada por Joseph-Louis Lagrange, en lo que se conoce como mecánica Lagrangiana. Por eso durante el resto de ese siglo y el posterior siglo XVIII, todas las investigaciones se basaron en sus ideas.

De ahí que se desarrollaron otras disciplinas, como la termodinámica, óptica, mecánica de fluidos y mecánica estadística. Los conocidos trabajos en estos campos de estudio de Daniel Bernoulli, Robert Boyle y Robert Hooke, entre otros, pertenecen a esta época.

En el siglo XIX se producen avances fundamentales en la electricidad y el magnetismo, principalmente de la mano de Charles Augustin de Coulomb, Luigi Galvani, Michael Faraday y Georg Simon Ohm, que culminaron en el trabajo de James Clerk Maxwell de 1855, que logró la unificación de ambas ramas en el
llamado: electromagnetismo. Además, se producen los primeros descubrimientos sobre radiactividad (de aquí el valor de hacer este breve repaso de la física) y el descubrimiento del electrón por parte de Joseph John Thomson en 1897.

Durante el siglo XX, la Física se desarrolló plenamente. En 1904, Hantarō Nagaoka había propuesto el primer modelo del átomo, el cual fue confirmado en parte por Ernest Rutherford en 1911, aunque ambos planteamientos serían después sustituidos por el modelo atómico de Bohr de 1913. En 1905, Einstein formuló la teoría de la relatividad especial, la cual coincide con las leyes de Newton cuando los fenómenos se desarrollan a velocidades pequeñas comparadas con la velocidad de la luz.

En 1915 extendió la teoría de la relatividad especial, formulando la teoría de la relatividad general, la cual sustituye a la Ley de gravitación de Newton y la comprende en los casos de masas pequeñas. Max Planck, Albert Einstein, Niels Bohr y otros, desarrollaron la teoría cuántica, a fin de explicar resultados experimentales anómalos sobre la radiación de los cuerpos. En 1911, Ernest Rutherford dedujo la existencia de un núcleo atómico cargado positivamente, a partir de experiencias de dispersión de partículas. En 1925 Werner Heisenberg, y en 1926 Erwin Schrödinger y Paul Adrien Maurice Dirac, formularon la mecánica cuántica, la cual comprende las teorías cuánticas precedentes y suministra las herramientas teóricas para la Física de la materia condensada.

Posteriormente se formuló la teoría cuántica de campos, para extender la mecánica cuántica de acuerdo con la Teoría de la Relatividad Especial, alcanzando su forma moderna a finales de los años 40, gracias al trabajo de Richard Feynman, Julian Schwinger, Tomonaga y Freeman Dyson, que formularon la teoría de la electrodinámica cuántica. Esta teoría formó la base

para el desarrollo de la física de partículas. En 1954, Chen Ning Yang y Robert Mills desarrollaron las bases del modelo estándar. Este se completó en los años 70, y con él fue posible predecir las propiedades de partículas no observadas previamente, pero que fueron descubiertas sucesivamente, siendo la última de ellas el *quark top*.

Los intentos de unificar las cuatro interacciones fundamentales: nuclear fuerte, nuclear débil, electromagnética y gravitatoria, han llevado a los físicos a nuevos campos impensables. Las dos teorías más aceptadas; la mecánica cuántica y la relatividad general, que son capaces de describir con gran exactitud el macro y el micromundo, parecen incompatibles cuando se las quiere ver desde un mismo punto de vista. Por eso se han formulado nuevas teorías, como la supergravedad o la teoría de cuerdas, donde se centran las investigaciones a inicios del siglo XXI.

La lista de físicos, matemáticos, científicos, filósofos, catedráticos que han contribuido a la construcción de nuevos conocimientos es más grande que este breve repaso histórico y se necesitaría una obra dedicada y de varios volúmenes para mencionarlos a todos, pero con esto se tiene lo suficiente para hacerse una idea que el conocimiento evoluciona paso a paso sin extravíos; y donde los límites de la inteligencia humana no son predecible ni medibles, pero opera bajo la premisa de que siempre hay una inteligencia superior e inalcanzable: "Dios".

1.1.1. Teorías centrales de la física

Ahora con este panorama histórico se puede decir que la física tiene ciertas tendencias de estudio, en su búsqueda de describir la verdad última de la naturaleza, tiene varias bifurcaciones, las cuales podrían agruparse en 5 teorías principales: la mecánica clásica; que describe el movimiento electromagnetismo; describe fenómenos macroscópico, el que los electromagnéticos como la luz, la relatividad; formulada por Einstein, que describe el espacio-tiempo y la interacción gravitatoria, la termodinámica y mecánica estadística; que describe los fenómenos moleculares y de intercambio de calor y finalmente, la mecánica cuántica; que describe el comportamiento del mundo atómico.

Se puede hacer una clasificación de la física en función de los campos de estudio; algunos ejemplos de esta clasificación son: mecánica clásica, cuántica, teoría cuántica de campos, teoría de la relatividad, mecánica estadística, termodinámica, mecánica de medios continuos, mecánica de fluidos, electromagnetismo, electrónica, astrofísica, geofísica, biofísica, física atómica, física nuclear, entre otros.

Algunas de las áreas de investigación modernas de la física son: física teórica, materia condensada, física atómica y molecular, astrofísica, biofísica, física de partículas o de altas energías y física nuclear, física médica, entre otros.

La física nuclear en especial es interesante en este trabajo, ya que es de donde se derivan los campos de aplicaciones con la física médica, en general la física nuclear es el campo de la física que estudia los constituyentes del núcleo atómico y sus interacciones. Las aplicaciones más conocidas de la física

nuclear, son la tecnología de generación de energía, las aplicaciones en la industria, y fabricación de armamento, pero este campo ha dado lugar a aplicaciones nuevas en diversos campos, incluyendo la medicina nuclear, estudio de las imágenes por resonancia magnética, ingeniería de implantación de iones en materiales y datación por radiocarbono en geología y arqueología, y también tiene aplicación en la agroindustria y la farmacología, que se utiliza en quimioterapia (medicamentos radiactivos). Y del estudio de la física nuclear surge el estudio de la radiación.

1.2. La radiación

En 1896 Henri Becquerel descubrió que ciertas sales de uranio emiten radiaciones espontáneamente al observar que velaban las placas fotográficas envueltas en papel negro. Hizo ensayos con el mineral en caliente, en frío, pulverizado, disuelto en ácidos y la intensidad de la misteriosa radiación era siempre la misma. Por tanto, esta nueva propiedad de la materia, que recibió el nombre de radiactividad no dependía de la forma física o química en la que se encontraban los átomos del cuerpo radiactivo, sino que era una propiedad que radicaba en el interior mismo del átomo.

El estudio del nuevo fenómeno y su desarrollo posterior, se debe casi exclusivamente al matrimonio de los científicos y físicos Marie y Pierre Curie, quienes encontraron otras sustancias radiactivas: el torio, el polonio y el radio. La intensidad de la radiación emitida era proporcional a la cantidad de uranio presente, por lo que Marie Curie dedujo que la radiactividad es una propiedad atómica. El fenómeno de la radiactividad se origina exclusivamente en el núcleo de los átomos radiactivos. Al estudiar la radiación emitida por el radio, se comprobó que era compleja, pues al aplicarle un campo magnético parte de ella se desviaba de su trayectoria y otra parte no.

Es de mencionar que los Curie desconocían los efectos nocivos de la radioactividad en los seres vivos y ambos fueron afectados en su salud hasta la muerte por la investigación en este campo que realizaban con elementos radiactivos, aún hoy las libretas donde ellos tomaban notas en el laboratorio están aisladas por el alto grado de radioactividad que emiten.

Pronto se descubrió que todas estas reacciones provienen del núcleo atómico que describió Ernest Rutherford en 1911, quien también demostró que las radiaciones emitidas por las sales de uranio pueden ionizar el aire y producir la descarga de cuerpos cargados eléctricamente.

Con el uso del neutrón, partícula teorizada en 1920 por Ernest Rutherford, se consiguió describir la radiación beta. En 1932, James Chadwick descubrió la existencia del neutrón que Rutherford quien había predicho en 1920, e inmediatamente después Enrico Fermi descubrió que ciertas radiaciones emitidas en fenómenos no muy comunes de desintegración, son en realidad neutrones (otro tipo de radiactividad).

El fenómeno de la radiación consiste en la propagación de energía en forma de ondas electromagnéticas o partículas subatómicas a través del vacío o de un medio material.

La radiación propagada en forma de ondas electromagnéticas (rayos UV, rayos gamma, rayos X, entre otros) se llama radiación electromagnética, mientras que la llamada radiación corpuscular es la radiación transmitida en forma de partículas subatómicas (partículas α , partículas β , neutrones, entre otras) que se mueven a gran velocidad, con un apreciable transporte de energía.

1.3. Radiactividad

Algunas substancias químicas están formadas por elementos químicos, cuyos núcleos atómicos son inestables. Como consecuencia de esa inestabilidad, sus átomos emiten partículas subatómicas de forma intermitente y aleatoria. En general son radiactivas las sustancias que presentan un exceso de protones o neutrones. Cuando el número de neutrones difiere del número de protones, se hace más difícil que la fuerza nuclear fuerte debida al efecto del intercambio de piones pueda mantenerlos unidos.

Eventualmente el desequilibrio se corrige mediante la liberación del exceso de neutrones o protones en forma de partículas α , que son realmente núcleos de helio, partículas β que pueden ser electrones o positrones. Estas emisiones llevan a dos tipos de radiactividad: radiación α , que aligera los núcleos atómicos en 4 unidades básicas y cambia el número atómico en dos unidades. Radiación β , que no cambia la masa del núcleo, ya que implica la conversión de un protón en un neutrón o viceversa, y cambia el número atómico en una sola unidad (positiva o negativa, según la partícula emitida sea un electrón o un positrón).

Además existe un tercer tipo de radiación en el que simplemente se emiten fotones de alta frecuencia, llamada radiación gamma (radiación γ). En este tipo de radicación lo que sucede es que el núcleo pasa de un estado excitado de mayor energía a otro de menor energía, que puede seguir siendo inestable y dar lugar a la emisión de más radiación de tipo α , β o γ . La radiación γ es un tipo de radiación electromagnética muy penetrante debido a que los fotones no tienen carga eléctrica. En 1934 Fermi se encontraba en un experimento bombardeando núcleos de uranio con los neutrones recién descubiertos. En 1938 en Alemania, Lise Meitner, Otto Hahn y Fritz Strassmann verificaron los experimentos de Fermi. En 1939 demostraron que una parte de los productos que aparecían al llevar a cabo estos experimentos era bario. Muy pronto confirmaron que era resultado de la división de los núcleos de uranio: la primera observación experimental de la fisión. En Francia, Jean Frédéric Joliot-Curie descubrió que, además del bario, se emiten neutrones secundarios en esa reacción, lo que hace factible la reacción en cadena.

También en 1932, Mark Lawrence Elwin Oliphant teorizó sobre la fusión de núcleos ligeros (de hidrógeno), y poco después Hans Bethe describió el funcionamiento de las estrellas con base en este mecanismo.

El estudio de la radiactividad permitió un mayor conocimiento de la estructura del núcleo atómico y de las partículas subatómicas. Se abrió la posibilidad de convertir unos elementos en otros. Incluso se hizo realidad el ancestral sueño de los alquimistas de crear oro a partir de otros elementos, como por ejemplo átomos de mercurio, aunque en términos prácticos el proceso de convertir mercurio en oro no resulta rentable, debido a que el proceso requiere demasiada energía.

Figura 1. Pioneros en los estudios de la radiactividad



Física 1903



Wilhelm Roentgen (1845-1923). Descubridor de los rayos X. Primer Premio Nobel de Física 1901



(1867-1934). Pionera en el estudio de la radioactividad. Premio Nobel de Física 1903 y Química 1911

Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

La radiactividad a nivel atómico es una propiedad de los isótopos que son inestables, es decir; que se mantienen en un estado excitado en sus capas electrónicas o nucleares, con lo que, para alcanzar su estado fundamental, deben perder energía. Lo hacen en emisiones electromagnéticas o en emisiones de partículas con una determinada energía cinética. Esto se produce variando la energía de sus electrones (emitiendo rayos X) o de sus nucleones (rayos gamma) o variando el isótopo (al emitir desde el núcleo electrones, positrones, neutrones, protones o partículas más pesadas, como ya se mencionó) en varios pasos sucesivos, con lo que un isótopo pesado puede terminar convirtiéndose en uno mucho más ligero, como el uranio que con el transcurrir de los siglos, acaba convirtiéndose en plomo.

Existen otros procesos de emisión de energía radiactiva, como por ejemplo el debido a una lámpara, un calentador (llamado radiador precisamente por radiar calor o radiación infrarroja), o la emisión de radioondas en radiodifusión, que reciben el nombre genérico de radiaciones.

Los tipos de radiación en función de su poder de acción u origen son:

- Radiación electromagnética
- Radiación ionizante
- Radiación térmica
- Radiación de Cerenkov
- Radiación corpuscular
- Radiación solar
- Radiación nuclear
- Radiación de cuerpo negro
- Radiación no ionizante
- Radiación cósmica
- Radiación de fondo

Las radiaciones ionizantes que son el tipo de radiación que interesa en este trabajo, son aquellas radiaciones con energía suficiente para ionizar la materia, es decir que extraen los electrones de sus estados ligados al átomo o moléculas.

El 15 de marzo de 1994, la Agencia Internacional de la Energía Atómica (AIEA) dio a conocer un nuevo símbolo de advertencia de radiactividad con validez internacional y actualmente existen protocolos internacionales de Protección Radiológica, que se deben cumplir para poder operar con fuentes radioactivas y se necesitan permisos del gobierno de cada país para poder realizar experimentación y desarrollo que involucre el uso de fuentes de radiación: natural o artificial.

1.4. La ionización

Es el fenómeno químico o físico mediante el cual se producen iones, estos son átomos o moléculas cargadas eléctricamente debido al exceso o falta de electrones respecto a un átomo o molécula neutra. A la especie química con más electrones que el átomo o molécula neutros se le llama anión, y posee una carga neta negativa, y a la que tiene menos electrones: catión, teniendo una carga neta positiva. Hay varias maneras por las que se pueden formar iones de átomos o moléculas.

Si la radiación transporta energía suficiente como para provocar ionización en el medio que atraviesa, se dice que es una radiación ionizante. En caso contrario se habla de radiación no ionizante. El carácter ionizante o no ionizante de la radiación es independiente de su naturaleza corpuscular u ondulatoria.

Son radiaciones ionizantes los rayos X, γ , partículas α y parte del espectro de la radiación UV entre otros. Por otro lado, radiaciones como los rayos UV y las ondas de radio, TV o de telefonía móvil, son algunos ejemplos de radiaciones no ionizantes.

Las radiaciones ionizantes tienen aplicaciones muy importantes en ciencias, industrias y medicina. En la industria, las radiaciones ionizantes pueden ser útiles para la producción de energía, la esterilización de alimentos, conocer la composición interna de diversos materiales y detectar errores de fabricación y ensamblaje. En el campo de la medicina, las radiaciones ionizantes también cuentan con numerosas aplicaciones beneficiosas para el

ser humano. Con ellas se pueden realizar una gran variedad de estudios, tratamientos y diagnósticos.

1.5. Efectos de la radiación en los seres vivos

Según la intensidad de la radiación y en qué parte del cuerpo se produjo la irradiación, el enfermo puede llegar a morir en el plazo de unas horas a varias semanas. Los efectos nocivos de la radiactividad se acumulan hasta que una exposición mínima se convierte en peligrosa después de cierto tiempo.

Son utilizadas desde su descubrimiento por Wilhelm Conrad Roentgen en 1895, en aplicaciones médicas e industriales, siendo la aplicación más conocida los aparatos de rayos X, o el uso de fuentes de radiación en el ámbito médico, tanto en diagnóstico (gammagrafía), resonancia magnética, tomografía, ultrasonidos, así como en los tratamientos, por ejemplo en radioterapia, braquiterapia en oncología, mediante el uso de fuentes radiactivas (por ejemplo cobaltoterapia) o aceleradores de partículas (aceleradores lineales).

Las radiaciones ionizantes interaccionan con la materia viva, produciendo diversos efectos. Del estudio de esta interacción y de sus efectos se encarga la radiobiología y la física médica.

Figura 2. La radiación mata células sanas adyacentes a los tumores



Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

Es importante mencionar que los seres humanos no poseen ningún sentido que perciba las radiaciones ionizantes. Sin embargo, existen diversos tipos de instrumentos que pueden captar y medir la cantidad de radiación ionizante que absorbe la materia, como ejemplo: los contadores Geiger, detectores de ionización gaseosa, centelleadores o ciertos semiconductores.

Figura 3. Detectores de radiación



Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

Existen varias unidades de medida de la radiación ionizante, unas tradicionales y otras del Sistema Internacional de unidades (SI). Las unidades tradicionales son el Röntgen, el Rad, el REM, MeV. Las unidades del sistema internacional más utilizadas el Culombio/kg, el Gray (Gy) y el Sievert (Sv), como se ilustra en la siguiente figura, donde se utilizan líneas para representar el porcentaje de distribución de energía distribuido en un medio material.

Figura 4. Cuantificación de la energía depositada en un medio material



Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

La radiactividad artificial, también llamada radiactividad inducida, que como ya se indicó tiene uso médico en equipos de tratamiento y diagnóstico, se produce cuando se bombardean ciertos núcleos estables con partículas apropiadas. Si la energía de estas partículas tiene un valor adecuado, penetran el núcleo bombardeado y forman un nuevo núcleo que, en caso de ser inestable, se desintegra después radiactivamente.

Fue descubierta por la pareja Jean Frédéric Joliot-Curie e Irène Joliot-Curie como se mencionó anteriormente, ellos bombardeando núcleos de boro y aluminio con partículas alfa. Observaron que las sustancias bombardeadas emitían radiaciones (neutrones libres) después de retirar el cuerpo radiactivo emisor de las partículas de bombardeo. Es importante mencionar que el plomo es la sustancia que mayor fuerza de impenetración posee por parte de los rayos X y gamma.

1.6. Tópicos de la física médica

La física en conjunto con la biología contribuyen con las ciencias de la salud para ofrecer tratamientos médicos, a continuación se describen algunos de los tópicos más relevantes de la física médica.

1.6.1. El cáncer

El cáncer dentro del campo de la medicina se le define como una enfermedad celular, que puede decirse que es un tipo de tumor maligno y se origina y crece en un tejido normal, invadiendo y sustituyendo progresivamente las células normales por células tumorales, y a largo plazo provocando la metástasis e invadiendo tejidos y órganos sanos.

Los tumores cuyo crecimiento depende de la tasa de división de las células que proliferan, de la fracción de crecimiento y del grado de pérdida de células por el tumor, se clasifican en 4 grandes categorías según la ubicación, tejidos, y células que lo forman:

 Leucemias: grupo de enfermedades de la médula ósea que implican un aumento incontrolado de glóbulos blancos (leucocitos).

- Linfomas: es un cáncer de una parte del sistema inmunológico (sistema linfático). Lo que ocurre a grandes rasgos, es que un tipo de glóbulos blancos, células B, se vuelven anormales y pueden diseminarse a casi todas las demás partes del cuerpo. Ver figura 5.
- Sarcomas: son tumores malignos que se originan en los tejidos conectivos como huesos, músculos, cartílagos, tejido fibroso o grasa. Ver figura 6.
- Carcinomas: son tumores malignos que se originan en los tejidos que recubren los órganos del cuerpo. El 80 por ciento de los cánceres son carcinomas. Ver figura 7.

Figura 5. Leucemia linfocítica aguda: muestra las células linfáticas teñidas de oscuro que aparecen en la leucemia



Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

Figura 6. Sarcoma de la vena cava inferior



Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.



Figura 7. Carcinoma de pulmón

Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

1.6.2. Radioterapia

El tratamiento de estos tumores con radiación se le llama: radioterapia, supone la administración de altas dosis de radiación durante ciertos períodos de tiempo a la zona localizada del organismo donde se encuentra el tumor. A pesar de las grandes cantidades de radiación que se recibe del orden de 4 000 a los 6 000 rads, cómo la zona irradiada es pequeña y localizada volumen de tratamiento y la dosis total se va administrando en pequeñas dosis diarias, no se producen síndromes de radiación ni muertes. Existen otras técnicas y tratamientos médicos menos invasivos para tratar a los tumores, por ejemplo la cirugía, la quimioterapia entre otros y que dependen del diagnóstico y evolución de la enfermedad y que no se tratan en este trabajo.

Las altas dosis suministradas son necesarias para cumplir el objetivo de la radioterapia, que es la destrucción y esterilización del tumor, dañando lo menos posible el tejido sano que lo rodea. La finalidad de un tratamiento radioterapéutico puede ser diversa al objetivo general que la radioterapia tiene en sí, dependiendo del estado en que se encuentre el tumor. Las terapias se diferencian según su función:

- Radical: la radiación se utiliza para la eliminación completa del tumor.
- Complementaria: utiliza otros métodos terapéuticos, como la cirugía o la quimioterapia como complemento a la radioterapia.
- Paliativa: su intención es mejorar la calidad de vida del paciente (al que denominan dentro del ámbito médico como paciente terminal).

El principal problema que la radioterapia encuentra es que el volumen de tratamiento abarca no solo el tumor, sino también el tejido normal que lo rodea. Además, la radiación administrada a través de fuentes externas al organismo,

es absorbida por los tejidos que se encuentran en su recorrido hasta el tumor, por lo que el tratamiento con radioterapia es invasivo y tiene efectos secundarios.

Como la probabilidad de que la radiación interaccione con las células tumorales es la misma que la probabilidad de que la interacción se produzca en células normales, se producirán lesiones en los tejidos sanos al igual que se producen en el tumor; todos los tejidos sanos tienen un límite en cuanto a la cantidad de radiación que pueden recibir manteniendo al mismo tiempo su función. Por esta razón la radiación que se utiliza para tratar un determinado tumor está limitada por la tolerancia del tejido normal que lo rodea.

| Dosis Total | Órganos que presentan complicaciones |
|----------------------------|--|
| Baja: 1 000-2 000 rads | Ovarios, testículos, mamas, huesos, cartílagos, médula ósea, cristalino, estómago, intestinos, colon. |
| Moderada: 2 000-4 500 rads | Hígado (3500-4500), riñón(> 2500), pulmón (> 2500), corazón (> 4500), glándulas tiroides y pituitaria, músculos en desarrollo, ganglios linfáticos. |
| Alta: 5 000-7 000 rads | Estructurad epiteliales (piel), cavidad oral, esófago, recto, glándulas salivales, páncreas, vejiga, huesos y cartílagos adultos, ojo, oído, SNC (cerebro y médula espinal), glándulas suprarrenales. |
| Muy alta:>7 500 rads | Uréteres, vagina, uretra, mamas adultas, músculo, sangre, conductos biliares |

| Tabla I. | Tolerancia de tejidos y órganos expuestos a la radiación |
|----------|--|
| | |

Fuente: CUNNINGHAM J. R. The Physics of Radiology. p. 12.

El inconveniente que se da a la hora de dar un tratamiento con radiación, es que las diferencias entre un tejido normal y un tumor que se origine a partir de él no son de suficiente magnitud como para tratarlos con radiaciones diferentes. Hay que utilizar técnicas que obtengan ventajas notables de esas diferencias, como la técnica de fraccionamiento de dosis.

1.6.3. Tipos de radioterapia

La efectividad de un tratamiento radica en depositar en la zona afectada la cantidad de energía suficiente para destruir las células tumorales. Para lograr los mejores resultados existen diferentes tipos de administración de las radiaciones que depende del tipo, la extensión y el lugar del cáncer.

La radiación puede provenir de una máquina colocada fuera del cuerpo (radiación externa), puede colocarse dentro del cuerpo (radiación interna) o pueden usarse materiales radiactivos no sellados que viajan por el cuerpo (radioterapia sistémica).

En tratamientos con fuentes emisoras de partículas β , o debido a la escasa penetración de los electrones, los tratamientos se hacen con un solo haz, y si en un mismo paciente es necesario irradiar varios volúmenes se utilizan varios campos. Estos tratamientos se realizan a la distancia fuente isocentro, y se recomienda no utilizar otra distancia a no ser que sea estrictamente necesario, ya que la tasa de dosis no disminuye de acuerdo con la ley del inverso del cuadrado de la distancia como en el caso de los fotones. También los rayos γ se administran con la misma técnica, pero razones de dosis controladas.

Para poder aplicar cualquier tipo de radiación a un paciente, se necesita no solo del equipo de irradiación bien calibrado, sino que además es necesario contar con sistemas de planificación (software), para realizar los cálculos de tiempos de exposición y dosis de radiación a administrar. En las figuras 8, 9 y 10 se presentan algunos ejemplos de equipos típicos de uso médico para los tratamientos de radioterapia utilizados para la toma de imágenes (tomógrafo), marcar aéreas del cuerpo humano a irradiar (simulador), emisor de radiación (unidades de Co-60, aceleradores lineales).



Figura 8. Tomógrafo para imágenes médicas

Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

Figura 9. Simulador de tratamientos con radioterapia



Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

Figura 10. Unidades de Co-60 y aceleradores lineales



Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

1.6.4. Dosimetría

Aunque este trabajo no está orientado a profundizar en todos los temas de la física médica, sino más bien a la implementación de un software utilizando los métodos de Monte Carlo aplicado a la física médica, es importante conocer como se trata la radiación a nivel biológico y es parte de lo que trata la dosimetría, sin embargo este tema se menciona de manera somera solo como un complemento, ya que no está dentro de los objetivos de este trabajo hacer un análisis a profundidad del que hacer de la dosimetría en la física médica.

En las zonas a tratar de un paciente la dosis total se administra fraccionada. La dosis total, la dosis de cada fracción, el número de fracciones y el tiempo a lo largo del cual se administra el tratamiento, se determinan en función del tipo del tumor tratado y de la tolerancia del tejido normal que lo rodea.

Biológicamente las dosis fraccionadas son menos eficaces que las dosis únicas, en cuanto a producción de muerte celular; a pesar de esto se ha comprobado que aunque parezca que permiten el crecimiento del tumor al administrarlas así, son más eficaces que la misma cantidad de dosis administrada en una sola vez, causando además un daño mínimo en los tejidos cercanos. Como se ha comentado anteriormente en la radioterapia, la determinación precisa de la dosis administrada al tumor y la los tejidos sanos alrededor de la lesión es primordial para el resultado de un buen tratamiento y es el trabajo conjunto entre oncólogos radioterapeutas y físicos médicos.

Por ello es importante conocer como la cantidad de dosis absorbida por un tumor influye en la probabilidad de control tumoral. La respuesta del tumor a la dosis se relaciona con los niveles de dosis absorbida.

La dosimetría en función de su campo de acción puede ser:

- Dosimetría física, en la cual se toman en cuenta los controles de calidad y calibración de los equipos de uso médico. Ver figura 11.
- Dosimetría clínica, encargada de la planificación de tratamientos utilizando software y técnicas de marcación de pacientes para delimitar áreas, definir campos de irradiación en los pacientes. Ver figuras 12 y 13.



Figura 11. Dosimetría física: controles de calidad

Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

Figura 12. Dosimetría clínica: planificadores





Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

Figura 13. Sistema de planificación por campos



Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

1.6.5. Tolerancia radiación-tumor

En los primeros años de tratamientos se utilizaron diferentes programas de fraccionamiento de dosis, con distintas dosis totales, que en ese tiempo se llamaban relaciones tiempo-dosis. Con la intención de relacionar distintos resultados, el médico Magnus Strandqvist estudió diversos casos de cáncer con un seguimiento de 5 años, representando la dosis total y el tiempo de tratamiento global, obtuvo una serie de líneas denominadas curvas de iso-efectos, que relacionan el programa de tratamiento con los resultados clínicos. Observó que ciertas relaciones tiempo-dosis, aunque curaban la enfermedad, también producían complicaciones tardías graves, mientras que otras no producían daños graves pero no controlaban el tumor.

1.6.6. Magnitudes y unidades en física médica

Para caracterizar de forma cualitativa y cuantitativa la radiación y sus efectos se define una serie de magnitudes con sus correspondientes unidades. Los organismos que definen estas unidades son la Oficina Internacional de Pesas y Medidas, la Comisión Internacional en Unidades y Medidas de la Radiación (ICRU) y la Comisión Internacional de Protección Radiológica (ICRP). Algunos términos importantes de estas unidades son:

- Exposición: caracteriza el poder ionizante en aire de rayos X o gamma.
- Kerma: se define cómo la energía cinética transferida al medio (principalmente electrones) por la radiación (fotones o neutrones) por unidad de masa en un punto.

- Dosis absorbida: debe tenerse en cuenta que es una magnitud puntual.
 Cuando se habla de dosis absorbida.
 - Dosis absorbida y exposición: la dosis absorbida en un material expuesto a un haz de fotones se puede determinar a partir de la exposición.
 - Dosis absorbida y Kerma: hay que tener en cuenta que no toda la energía transferida en un volumen V es absorbida en dicho volumen.

1.6.7. Efectos biológicos: dosis equivalente y efectiva

El efecto biológico sobre un tejido irradiado depende del tipo y energía de la radiación y del tejido considerado. Es necesario definir un factor que pondere los efectos en función de la radiación, ya que por ejemplo 1 Gy de partículas α produce unos efectos biológicos 20 veces superiores a los producidos por 1 Gy de Rayos X. Así, la dosis equivalente expresa en una escala común el daño producido a personas expuestas a distintas radiaciones. La dosis efectiva sirve para comparar el riesgo total por una radiación no uniforme del cuerpo con el riesgo producido por una irradiación uniforme, y es la suma ponderada de las dosis equivalentes recibidas en los distintos órganos o tejidos. Dependiendo del tipo de fuente de radiación esta puede irradiarse hacia fuera del centro de emisión, absorberse cerca del centro de emisión. Ver figura 14.



Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

1.6.8. Medidas dosimétricas

Antes de medir la dosis absorbida en un paciente, es necesario definir algunas cantidades básicas que serán necesarias para la introducción de datos a la hora de planificar un tratamiento por medio de algún programa de computadora. La dosimetría básica consiste en obtener una gran cantidad de distribuciones de dosis modificando los haces y utilizando todas las energías posibles del acelerador, para poder obtener las mejores combinaciones. Las distribuciones de dosis son obtenidas usando una cámara de ionización sobre un maniquí de agua. Todas las medidas de distribución de dosis son relativas y el paso de distribuciones relativas a absolutas se hace usando factores de campos relativos a las condiciones de referencia.

Una de las primeras cantidades básicas que se usan son el porcentaje de la dosis en profundidad (PDD). La distancia SDD que es la distancia entre la fuente de radiación y la superficie del paciente, o en este caso del agua. La razón tejido máximo: *Tissue-Phantom Ratio (TRP)*, se define como el cociente de la dosis en un punto dado a lo largo del eje central del haz y la dosis en el mismo punto con una referencia diferente. Por último, una de las cantidades más importantes y usadas en dosimetría es el factor de calidad Q. Está relacionado directamente con la energía del haz.

Para una interpretación general de los datos obtenidos en un plano de interés, es necesario representar las curvas de isodosis de la zona a estudiar, ver figuras 15 y 16 estas curvas son líneas gráficas que unen puntos de igual dosis y habitualmente se representan en algún plano paralelo al haz y que pase por su eje. Un conjunto de curvas de isodosis se denomina: distribución de dosis, donde el valor asignado a cada curva suele ser un porcentaje con respecto al valor de referencia.





Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

Figura 16. Definición de área cerebral a irradiar



Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

2. FÍSICA DE RADIACIONES

2.1. Interacción de la radiación con la materia

Se denominan radiaciones ionizantes aquellas que son capaces de liberar electrones ligados en orbitales atómicos o moleculares, para lo que se requieren energías superiores a unos 10 eV. En el caso de electrones, positrones y fotones se necesitan energías entre decenas de eV y centenares de MeV, mientras que para partículas cargadas pesadas, se consideran energías específicas comprendidas entre decenas de keV/u y centenares de MeV/u. Estos intervalos cubren holgadamente las energías empleadas en física médica, tanto en diagnóstico como en terapia, así como las de interés en radio protección.

La propagación e interacción de dichas radiaciones ionizantes con medios materiales constituidos por un número de átomos o moléculas por unidad de volumen igual a:

$$\mathcal{N} = N_A \rho / A_W \tag{1}$$

Siendo ρ la densidad másica, $A_W = Am_u N_W$ la masa atómica o molecular y A el número másico; N_A es la constante de Avogadro y $Am_u N_W = 1$ g/mol.

Las ecuaciones en física atómica están escritas en el sistema CGS, como es habitual. Sin embargo, para realizar los cálculos es conveniente emplear el sistema de unidades atómicas.

2.2. Clasificación de las radiaciones ionizantes

Las radiaciones ionizantes se clasifican atendiendo en primer lugar a la carga eléctrica de las partículas (neutras o cargadas). La segunda característica relevante es la masa de las mismas:

partículas neutras
$$\begin{cases} \text{fotones} & \text{x}, \gamma \\ \text{neutrones} \end{cases}$$
$$partículas cargadas \begin{cases} \text{ligeras} (M = m_e) & e^-, e^+ \\ \text{pesadas} (M \gg m_e) \begin{cases} \text{iones ligeros} & \text{H}, \dots, \text{Ne} \\ \text{iones pesados} & \text{Na}, \dots, \text{fragmentos de fisión} \\ \text{"exóticas"} & \mu^{\pm}, \pi^{\pm}, \bar{p}, \dots \end{cases}$$

A la radiación formada por partículas cargadas se la califica como directamente ionizante, mientras que se la denomina indirectamente ionizante si se trata de partículas neutras. La razón de esta nomenclatura reside en que la carga eléctrica determina el modo en que la radiación interacciona con los átomos.

2.3. Estructura atómica básica

Como es bien sabido, el mundo atómico y subatómico se rige por las leyes de la mecánica cuántica. Para una partícula no relativista de masa M que se mueve en un potencial central V(r). La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo,

$$\left[\frac{\vec{\mathbf{p}}}{2M} + V(r)\right]\psi(\vec{\mathbf{r}}) = \varepsilon\psi(\vec{\mathbf{r}})$$
(2)

Permite que la función de onda de la partícula se pueda factorizar en la forma:

$$\psi_{\varepsilon\ell m_{\ell}}(\vec{\mathbf{r}}) = \frac{P(r)}{r} Y_{\ell m_{\ell}}(\hat{\mathbf{r}})$$
(3)

Donde $Y_{\ell m_{\ell}}(\hat{\mathbf{r}})$ son los armónicos esféricos. Las funciones radiales reducidas $P(\mathbf{r})$ poseen expresiones analíticas si el potencial es de Coulomb, pero en general han de obtenerse resolviendo numéricamente la ecuación de Schrödinger radial

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\hbar^2}{2M}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r)\right]P(r) = \varepsilon P(r) \tag{4}$$

Si el potencial es atractivo, esta ecuación admite soluciones con autovalores $\varepsilon_{n_{\ell}}$ negativos discretos (*n* es el número cuántico principal), que representan estados ligados. Las correspondientes funciones radiales reducidas $P_{n_{\ell}}(\mathbf{r})$ están normalizadas a la unidad,

$$\int_0^\infty P_{n_\ell}^2(r) \mathrm{d}r = 1 \tag{5}$$

donde los polinomios de Legendre también son ortogonales, por otra parte, la ecuación de Schrödinger radial también posee soluciones con autovalores positivos, que describen partículas libres con energía cinética no relativista $\varepsilon = \frac{1}{2}Mv^2$ (espectro continuo). La normalización de las funciones del continuo $P(\mathbf{r})$ es arbitraria. Además las $P_{\varepsilon\ell}(r)$ presentan un comportamiento asintótico de tipo

$$P_{\varepsilon\ell}(r) \sim \sin(kr - \ell \frac{\pi}{2} - \eta \ln(2kr) + \delta_{\ell}(\varepsilon)) \text{ cuandor} \to \infty$$
 (6)

donde $k = \sqrt{2M\varepsilon}/\hbar$ es el número de ondas y δ_{ℓ} el desfase, $\eta \equiv Z_{\infty}e^2/\hbar v$ es el parámetro de Sommerfeld, siendo $V(r) \rightarrow -Z_{\infty}e^2/r$ el comportamiento asintótico del potencial ($Z_{\infty} = 0$ para potenciales de corto alcance, $Z_{\infty} \neq 0$ para iones). Cuando V(r) = 0, además de $\eta = 0$ se tiene que $\delta_{\ell} = 0$, $\forall \ell$ y entonces las funciones de onda del continuo se reducen a las ondas planas

$$\psi(\vec{\mathbf{r}}) = (2\pi)^{-3/2} \exp\left(i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{r}}\right)$$
(7)

En mecánica cuántica relativista, la ecuación de Schrödinger debe sustituirse por la ecuación de Klein–Gordon si la partícula tiene espín 0 o la ecuación de Dirac si su espín es 1/2. La ecuación de Dirac independiente del tiempo es:

$$r[c\vec{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\vec{\boldsymbol{p}}+(\beta-1)Mc^2+V(r)]\psi(\vec{\boldsymbol{r}})=\varepsilon\psi(\vec{\boldsymbol{r}})$$
(8)

Donde $\vec{\alpha}$ y β son las matrices de Dirac. Los autovalores y funciones de onda radiales reducidas se etiquetan con el número cuántico de momento angular relativista k = $(\ell - j)(2j + 1)$, con $j = \ell + \frac{1}{2}$.

Considerando ahora el conjunto de los *N* electrones (masa m_e , carga -e) de un átomo de número atómico Z_2 . La función de onda atómica es $\Psi(q_1, \ldots, q_N)$, donde la notación q_j indica las variables de posición $\vec{\mathbf{r}}_j$ y el espín $m_{s,j}$ de cada electrón. La función de onda satisface la ecuación de ondas independiente del tiempo

$$\mathcal{H}_A(q_1,\ldots,q_N)\Psi(q_1,\ldots,q_N) = E\Psi(q_1,\ldots,q_N)$$
(9)

Donde el hamiltoniano atómico \mathcal{H}_A contiene, además de las energías cinéticas (no relativistas) de los electrones, las energías potenciales electrostáticas atractivas electrón-núcleo y repulsivas electrón-electrón, es decir:

$$\mathcal{H}_{A} = \sum_{j=1}^{N} \frac{\vec{\mathbf{p}}_{j}^{2}}{2m_{e}} + \sum_{j=1}^{N} \left(-\frac{Z_{2}e^{2}}{r_{j}} \right) + \sum_{i < j} -\frac{e^{2}}{r_{ij}}$$
(10)

La ecuación 9 con el hamiltoniano ecuación 10 no tiene solución exacta, y es necesario recurrir a aproximaciones que permitan simplificarla. Así en el modelo de electrones independientes en un campo central se supone que todos los electrones se mueven en un potencial atómico promedio V(r), elegido de modo que sea una buena aproximación a los potenciales electrostáticos de la ecuación 10, y entonces

$$\mathcal{H}_A = \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{\vec{\mathbf{p}}_j^2}{2m_e} + V(r_j) \right]$$
(11)

o bien, si se parte de una formulación relativista,

$$\mathcal{H}_{A} = \sum_{j=1}^{N} \left[c \vec{\boldsymbol{\alpha}}_{j} \cdot \vec{\mathbf{p}}_{j} + \left(\beta_{j} - 1 \right) m_{e} c^{2} + V(r_{j}) \right]$$
(12)

En este contexto, los potenciales auto consistentes de tipo Hartree–Fock– Slater o Dirac–Hartree–Fock–Slater constituyen un punto de partida razonable. Al haber reemplazado el hamiltoniano original por otro aproximado, pero separable la función de onda atómica se escribirá como un determinante de Slater construido con *N* orbitales de espín monoparticulares ψ_j ,

$$\Psi(q_1,\ldots,q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{bmatrix} \psi_1(q_1) & \cdots & \psi_1(q_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(q_1) & \cdots & \psi_N(q_N) \end{bmatrix},$$
(13)

de modo que Ψ es una función de onda antisimétrica, como corresponde a un sistema de fermiones.

Que las funciones de onda atómicas se expresen como determinantes de Slater simplifica enormemente la evaluación (analítica o numérica) de elementos de matriz. Así en el caso de operadores a un cuerpo $\mathcal{F} = \sum_{j=1}^{N} f(\mathbf{r}_j)$ como los que se encontraran más adelante resulta que $\langle \Psi' | \mathcal{F} | \Psi \rangle$ se reduce a calcular elementos de matriz mono particulares $\langle \psi' | \mathcal{F} | \psi \rangle$.

En particular $\langle \psi' | \mathcal{F} | \psi \rangle = 0$ si Ψ y Ψ' difieren en dos o más orbitales de espín monoparticulares.

Además como V(r) es un potencial de campo central, $\psi \neq \psi'$ factorizan en una parte radial y una parte angular, véase la ecuación 3. Esta propiedad simplifica a su vez el cálculo de $\langle \psi' | \mathcal{F} | \psi \rangle$, que se reduce a únicamente integrales radiales. La figura 17 muestra la energía de ligadura experimental U_{mk} las capas K, L1 – L3 y M1 – M5 de los átomos neutros. Una peculiaridad interesante de los potenciales auto consistentes tipo Dirac–Hartree–Fock–Slater es que $|\varepsilon_{nk}| \approx U_{mk}$.





Fuente: Francesc Salvat, Et. Al., PENELOPE. p. 56.

2.4. Interacción entre un átomo y la radiación incidente

Cuando un átomo se ve sometido a la influencia de la radiación incidente, deben incluirse en \mathcal{H} términos adicionales con las energías de interacción entre el proyectil y los electrones atómicos. La correspondiente ecuación de Schrödinger (o Dirac) es difícil o imposible de resolver exactamente, por lo que se puede recurrir a métodos aproximados. Con el fin de emplear teoría de perturbaciones, se descompone el hamiltoniano en dos sumandos, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$, siendo la ecuación de Schrödinger con \mathcal{H}_0 resoluble y \mathcal{H}' la perturbación (frecuentemente se incluyen en \mathcal{H}_0 aquellos términos que no dependen del proyectil, mientras que \mathcal{H}' contiene las energías de interacción entre el proyectil y los electrones atómicos, pero existen otras maneras de descomponer \mathcal{H} que no son tratadas aquí), para \mathcal{H}_0 se tiene:

$$\boldsymbol{\mathcal{H}}_{0} = \boldsymbol{\mathcal{H}}_{A} + \boldsymbol{\mathcal{H}}_{F} \tag{14}$$
Donde el hamiltoniano del átomo, HA, está dado por las ecuaciones 11 o 12, y

$$\boldsymbol{\mathcal{H}}_{\mathrm{F}} = \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} b_{\lambda}^{\dagger} b_{\lambda}$$
(15)

es el hamiltoniano del campo de fotones libres. Cada modo λ corresponde a un vector de ondas \mathbf{k}_{λ} y un vector (unitario) de polarización $\hat{\pi}_{\lambda}$. Los operadores b_{λ}^{\dagger} y b_{λ} actúan sobre los estados $b_{\lambda}^{\dagger}b_{\lambda}|...,n_{\lambda},...\rangle$ que describen el campo electromagnético libre en la representación de números de ocupación (espacio de Fock); se denominan operadores de creación y aniquilación, respectivamente, puesto que

$$b_{\lambda}^{\dagger}b_{\lambda}|...,n_{\lambda},...\rangle = \sqrt{n_{\lambda}+1}|...,n_{\lambda}+1,...\rangle,$$
(16)

$$b_{\lambda}|...,n_{\lambda},...\rangle = \sqrt{n_{\lambda}}|...,n_{\lambda}-1,...\rangle$$
(17)

El efecto de \mathcal{H}' es inducir transiciones entre estados propios del hamiltoniano \mathcal{H}_0 . En el caso de fotones incidentes, el potencial vector asociado es:

$$\vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{r}}) \propto \sum_{\lambda} \left(\vec{\mathbf{A}}_{\lambda} b_{\lambda} + \vec{\mathbf{A}}_{\lambda}^{*} b_{\lambda}^{\dagger} \right), \qquad \qquad \vec{\mathbf{A}}_{\lambda} \propto \hat{\pi}_{\lambda} e^{i\vec{\mathbf{k}}_{\lambda} \cdot \vec{\mathbf{r}}}$$
(18)

Efectuando el acoplamiento mínimo (Que consiste en reemplazar $\vec{\mathbf{p}}$ por $\vec{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\vec{\mathbf{p}}$ y \mathcal{H}_A por $\mathcal{H}_A - q\varphi$ (en este caso q = -e y $\varphi = 0$) en la ecuación 11 se puede escribir

$$\mathcal{H}'_{\rm ph} = \sum_{j=1}^{N} \frac{e}{m_e c} \vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{r}}_j) \cdot \vec{\mathbf{p}}_j + \sum_{j=1}^{N} \frac{e^2}{2m_e c} A^2(\vec{\mathbf{r}}_j) \equiv \mathcal{H}'_{\rm ph,1} + \mathcal{H}'_{\rm ph,2}$$
(19)

2.5. Sección eficaz

Si se considera un experimento de dispersión en el que se hace incidir sobre un blanco una densidad de flujo (tasa de fluencia) de partículas $\dot{\Phi}$. Un detector analiza las \dot{N} partículas, que por unidad de tiempo han sido desviadas dentro del ángulo sólido d Ω del detector (determinado por los ángulos polar θ y acimutal ϕ y llegan con energía entre E' y E' + dE'. La sección eficaz diferencial de este proceso de colisión es entonces:

$$\frac{\mathrm{d}^2\sigma}{\mathrm{d}E'\mathrm{d}\Omega} = \frac{1}{\dot{\Phi}}\frac{\dot{N}}{\mathrm{d}E'\mathrm{d}\Omega} \tag{20}$$

El último factor está directamente relacionado con la probabilidad de transición por unidad de tiempo dada por la regla de oro de Fermi, ecuación 22. Si se integra respecto del ángulo sólido y las energías se obtiene la sección eficaz total:

$$\sigma = \int dE' \int d\Omega \frac{d^2 \sigma}{dE' d\Omega'}$$
(21)

que tiene dimensiones de superficie. Se puede interpretar la sección eficaz diferencial como una densidad de probabilidad a partir de la relación

$$p(E',\theta) = \frac{1}{\sigma} 2\pi \sin\theta \frac{d^2\sigma}{dE'd\Omega}$$
(22)

Obsérvese que la sección eficaz diferencial depende del ángulo de dispersión polar θ , pero no del ángulo de dispersion acimutal ϕ , debido a la simetría cilíndrica del problema.

En un medio condensado (sólido o líquido) la probabilidad de interacción por unidad de longitud se define mediante:

$$\lambda^{-1} = \mathcal{N}\sigma,\tag{23}$$

siendo λ el recorrido libre medio entre colisiones. El producto $\mathcal{N}\sigma$ recibe a veces el nombre de sección eficaz macroscópica o, en el caso de fotones; coeficiente de atenuación lineal.

Las consideraciones anteriores son directamente generalizables si hay diversos mecanismos de interacción *i*. Así se tiene que

$$\sigma_{\rm T} = \sum_{i} \sigma_i \quad \lambda_{\rm T}^{-1} = \sum_{i} \lambda_i^{-1} \tag{24}$$

2.6. Interacción de los fotones con la materia

Los fotones carecen de masa en reposo y carga eléctrica. Por tanto su interacción con el material atravesado no es tan intensa como en el caso de partículas cargadas. Si se considera la interacción de fotones no polarizados de energía *E* con átomos neutros, cuyo número atómico se denotan por *Z* en esta sección al no haber posibilidad de confusión. En el intervalo de energías de interés, entre aproximadamente 0,1 keV y 1,0 GeV, los procesos de colisión dominantes son el efecto fotoeléctrico, la dispersión Rayleigh, el efecto Compton y la creación de pares electrón-positrón. Otros modos de interacción, tales como las reacciones fotonucleares, ocurren con probabilidades mucho menores y son ignorados en numerosas situaciones prácticas.

En lo que sigue κ indicará la energía del fotón en unidades de $m_e c^2 \approx$ 511 keV (la energía en reposo del electrón),

$$\kappa = \frac{E}{m_e c^{2'}}$$
(25)

2.6.1. Efecto fotoeléctrico

En este proceso el fotón es absorbido completamente y transmite toda su energía cinética al material. No hay radiación dispersa, por lo que tiene un alto contraste en la imagen radiológica.





Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

En el efecto fotoeléctrico el fotón es absorbido por el átomo blanco y un electrón de la capa atómica *i*-ésima es emitido hacia el ángulo sólido $d\Omega_e$,

caracterizado por el ángulo polar θ_e , con energía cinética $\varepsilon_e = E - U_e$, siendo U_i la energía de ionización de dicha capa. El proceso de fotoabsorción sólo es posible si $E > U_i$. En consecuencia la sección eficaz del efecto fotoeléctrico presenta marcados bordes de absorción, pues cada vez que *E* supera una energía U_i se abre un nuevo canal de absorción.

2.6.2. La aproximación de Born (no relativista) del efecto fotoeléctrico

La aproximación de Born (no relativista) considera la perturbación $\mathcal{H}'_{\rm ph,1}$, ecuación 19, a primer orden con la simplificación adicional de reemplazar la función de onda del fotoelectrón por una onda plana. Esta aproximación dará secciones eficaces razonables, sólo si $\varepsilon_e \gg U_i$ de modo que se pueda despreciar la interacción culombiana del fotoelectrón con el ión residual.

La sección eficaz diferencial del efecto fotoeléctrico del átomo de hidrógeno (y de iones hidrogenoides) en la aproximación de Born puede ser evaluada analíticamente. La expresión que se obtiene en el caso de fotones no polarizados es:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_e} = 2^{3/2} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \kappa^{-7/2} \frac{\sin^2 \theta_e}{[1 - (\nu_e/c)\cos \theta_e]} \approx \frac{2^{3/2}}{3} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \kappa^{-7/2} \sin^2 \theta_e, \quad (26)$$

donde $\alpha \equiv e^2/\hbar c \approx 1/137$ es la constante de estructura fina de Sommerfeld.

La proporcionalidad con $\sin^2 \theta_e$ indica que el fotoelectrón tiende a emitirse perpendicularmente a la dirección del fotón incidente. La sección eficaz total se obtiene integrando la sección eficaz diferencial (26) sobre todas las direcciones de emisión,

$$\sigma(E) = \int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_e} 2\pi \mathrm{d}(\cos\theta_e) = \frac{2^{9/2}}{3} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \kappa^{-7/2},$$
(27)

Esta fórmula resulta ser aplicable no sólo para fotoionización de átomos hidrogenoides, sino que también describe de forma aproximada la ionización de la capa K de átomos o iones por rayos x y γ . Obsérvese que la sección eficaz es proporcional a Z^5 y a $E^{-7/2}$, creciendo rápidamente al aumentar el número atómico y disminuir la energía.

Para átomos multielectrónicos, se puede generalizar el tratamiento anterior sobre la base del modelo de electrones independientes en un campo central. Sin embargo los cálculos han de realizarse numéricamente. También está otro tipo de aproximación, la dipolar eléctrica (no relativista), que no es necesario tratarla en este trabajo.

2.6.3. Dispersión coherente o Rayleigh

La dispersión coherente o Rayleigh es el proceso por el cual un fotón es dispersado elásticamente por los electrones atómicos ligados, es decir; sin que el átomo blanco sea excitado. En consecuencia $\Psi_f = \Psi_i$ y las energías de los fotones incidente y dispersado son iguales. Este proceso se denomina coherente porque aparecen efectos de interferencia entre las ondas dispersadas por diferentes partes de la distribución de carga atómica.

Figura 19. **Dispersión Rayleigh**



Fuente: SALVAT, Francesc; et al. PENELOPE. p. 54.

2.6.4. Dispersión coherente en la aproximación del factor de forma

Este formalismo (esencialmente no relativista) trata el hamiltoniano $\mathcal{H}'_{\rm ph,2}$, ecuación 19, de la interacción entre la radiación electromagnética y el átomo como una perturbación a primer orden, mientras que desprecia la contribución de $\mathcal{H}'_{\rm ph,1}$ a segundo orden. Desarrollando los correspondientes elementos de matriz $\langle f | \mathcal{H}'_{\rm ph,2} | i \rangle$, la sección eficaz diferencial (por átomo) para dispersión coherente está dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{\rm T}}{d\Omega} [F(q, Z)]^2,$$
(28)

donde:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{T}}}{\mathrm{d}\Omega} = r_e^2 \frac{1 + \cos^2\theta}{2},\tag{29}$$

La sección eficaz total (por átomo) de dispersión Rayleigh es:

$$\sigma(E) = \pi r_e^2 \int_{-1}^{1} (1 - \cos^2 \theta) \,\mathrm{d}(\cos \theta_e)$$
(30)

La sección eficaz diferencial de Thomson para la dispersión por un electrón libre y en reposo (que se obtiene también a partir de argumentos clásicos), θ es el ángulo de dispersión polar (por ejemplo, el ángulo entre las direcciones de propagación del fotón antes y después de la interacción), $r_e = e^2/m_ec^2 \approx 2,818 \times 10^{-13}$ centímetros que es el denominado radio clásico del electrón, y

$$F(q,Z) = \left(\Psi_0 \middle| \sum_{j=1}^{Z} \exp(i\vec{\mathbf{q}} \cdot \vec{\mathbf{r}}_j / \hbar) \middle| \Psi_0 \right)$$
(31)

Es el factor de forma atómico. Aquí Ψ_0 denota la función de onda atómica del estado fundamental y la suma recorre los *Z* electrones atómicos; \vec{q} es el vector transferencia de momento, cuyo módulo es:

$$q = 2(E/c)\sin(\pi/2).$$
 (32)

El factor de forma atómico puede ser expresado como la transformada de Fourier de la densidad electrónica $\rho(\vec{\mathbf{r}})$ del átomo, la cual teniendo en cuenta la simetría esférica, se simplifica a:

$$F(q,Z) = \int_0^\infty \rho(r) \frac{\sin qr/\hbar}{qr/\hbar} 4\pi r^2 \mathrm{d}r.$$
 (33)

F(q,Z) es una función monótona decreciente en q que varía desde F(q,Z) = Z a $F(\infty,Z) = 0$, por lo que la presencia de F^2 en la sección eficaz diferencial, ecuación 28, favorece la dispersión Rayleigh hacia ángulos pequeños.

En el caso del átomo de hidrógeno no relativista, el factor de forma atómico se puede evaluar analíticamente,

$$F_{\rm H}(q,Z) = \left[1 + \left(\frac{qa_{0/\hbar}}{2z}\right)^2\right]^{-2}$$

Expresión que se conoce como fórmula de Pirenne. Por el contrario, los factores de forma de átomos con más de un electrón han de ser calculados numéricamente. Suelen estar disponibles en forma de extensas tablas como las de Hubbell y colaboradores, obtenidas a partir de densidades atómicas. En la figura 20 se muestran ejemplos de los factores de forma correspondiente a los átomos de C, Cu y Pb.





Fuente: SALVAT, Francesc; et al. PENELOPE. p. 61.

La sección eficaz total (por átomo) de dispersión Rayleigh es:

$$\sigma(E) = \pi_e^2 \int_{-1}^{1} (1 + \cos^2 \theta) \, [F(q, Z)]^2 \mathrm{d}(\cos \theta). \tag{34}$$

Para energías bajas, el factor de forma en el subintegrando no difiere demasiado de F(0, Z) = Z y la dispersión coherente se reduce a la dispersión Thomson. Por consiguiente:

$$\sigma \simeq \pi r_e^2 Z^2. \tag{35}$$

En cambio, en el límite de alta energía es:

$$\sigma \propto E^{-2}.$$
 (36)

Estos comportamientos asintóticos se ven claramente en la figura 21, donde se han representado ejemplos de las secciones eficaces totales Rayleigh de C, Cu y Pb.

Figura 21. Secciones eficaces Rayleigh de C, Cu y Pb



Fuente: SALVAT, Francesc; et al. PENELOPE. p. 66.

2.6.5. Dispersión incoherente o Compton

El fotón sufre una colisión inelástica con un electrón cediéndole parte de su energía. El electrón se desvía de su trayectoria y aparece una radiación dispersa. Esta radiación dispersa provoca ruido de fondo y deteriora el contraste en las imágenes radiológicas.



Figura 22. Efecto Compton

Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

En la dispersión incoherente de fotones (efecto Compton), un fotón de energía $E = \kappa m_e c^2$ interacciona inelásticamente con un electrón atómico que lo absorbe y reemite un fotón secundario con energía $E \equiv \tau E < E$ en la dirección θ relativa a la dirección del fotón incidente, donde τ se deduce en la ecuación 39. Tras la colisión, el electrón retrocede con una energía cinética en la dirección ε_e . Si el electrón blanco está inicialmente libre y en reposo es: $\varepsilon_e = (1 - \tau)E$. La conservación de energía y momento lineal conduce a las relaciones:

$$\cos\theta = \frac{1}{\kappa} \left(\kappa + 1 - \frac{1}{\tau} \right) \tag{37}$$

y

$$\cos\theta = (\kappa+1) \left(\frac{1-\tau}{\kappa[2+\kappa(1-\tau)]}\right)^{1/2}$$
(38)

De la ecuación 37 se sigue que:

$$\tau = \frac{1}{\kappa + 1(1 - \cos\theta)},\tag{39}$$

es decir,

$$E' = \frac{E}{1 + \frac{E}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)} \equiv E_c \tag{40}$$

Los valores mínimo y máximo de τ son

$$\tau_{min} = \frac{1}{1+2\kappa} y \quad \tau_{max} = 1, \tag{41}$$

que corresponden a dispersión hacia atrás ($\theta = \pi$) y hacia adelante ($\theta = 0$), respectivamente.

Si se supone que los electrones del blanco están libres y en reposo, la sección eficaz diferencial angular (por electrón) para fotones no polarizados viene dada por la fórmula de Klein–Nishina, utilizando esta fórmula, es posible describir la sección eficaz por átomo, la fórmula de Klein–Nishina se describirá más adelante, cuando se implemente el algoritmo, también es importante indicar que existen modelos teóricos más elaborados para describir la

dispersión incoherente de fotones, teniendo en cuenta que el electrón activo está ligado y en movimiento antes de la colisión, los cuales no serán tratados en este trabajo, puesto que lo que se busca es la implementación de un algoritmo simple.

2.6.6. Creación de pares

El fotón desaparece y cede toda su energía produciendo un par electrón positrón. El positrón se aniquila produciendo dos fotones secundarios. Esta producción se logra sólo a altas energías (>15 MeV en agua).



Figura 23. Creación de pares

Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

En la creación de pares el fotón desaparece y su energía es invertida en crear un electrón y su antipartícula, el positrón. Si se indican las energías cinéticas de estas dos partículas cargadas como E_{\pm} , la conservación de la energía exige que sea $E = E_{-} + E_{+} + 2m_ec^2$. Se ve que la creación de pares sólo será posible si $E > 2m_ec^2 \approx 1,022$ MeV. Por otra parte, la conservación de

la cantidad de movimiento obliga a que el proceso tenga lugar cerca de una partícula cargada masiva que absorba una pequeña cantidad de movimiento y una fracción despreciable de energía. Esa partícula masiva podrá ser tanto un núcleo como alguno de los electrones atómicos. En este último caso, que solo puede suceder si $E > 4m_ec^2$, el proceso se denomina creación de tripletes, pues el electrón que absorbe la cantidad de movimiento es arrancado del átomo.

El cálculo de las secciones eficaces del proceso de creación de pares es complicado, pues se debe recurrir a la electrodinámica cuántica. Empleando este formalismo y suponiendo que las partículas cargadas emergentes son lo bastante rápidas como para poder ser descritas mediante ondas planas (aproximación de Born), Bethe y Heitler, obtuvieron una expresión para la sección eficaz diferencial en la energía cinética del electrón creado,

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{BH}}}{\mathrm{d}E_{-}} = Z(Z+1)f(z,E;E_{-}), \tag{42}$$

que se conoce como fórmula de Bethe–Heitler. Vale saber que la función $f(z, E; E_-)$ depende a su vez del factor de forma atómico. En cambio vale la pena destacar que, aparecen dos contribuciones, una proporcional a Z^2 ; que da cuenta de la creación de pares en el campo del núcleo y otra proporcional a Z que se debe a la contribución de los Z electrones atómicos al proceso (creación de tripletes).

El ángulo polar promedio de emisión del electrón y del positrón está dado por:

$$\langle \theta_{\pm} \rangle \approx \left(1 + \frac{E}{m_e c^2} \right)^{-1}.$$
 (43)

La sección eficaz total de creación de pares se obtiene al integrar $d\sigma_{BH}/dE_{-}$ respecto de E_{-} . En la figura 24 se observa cómo varían las secciones eficaces de creación de pares y tripletes en C, Cu y Pb con la energía del fotón.

Figura 24. Secciones eficaces de creación de pares y tripletes



Fuente: SALVAT, Francesc; et al. PENELOPE. p. 64.

2.6.7. Reacciones fotonucleares

Cuando el fotón tiene una energía superior a algunos MeV, aparece la posibilidad de que interaccione directamente con el núcleo atómico. Este tipo de reacciones y la creación de pares comentada en el apartado anterior no serán tratadas en este trabajo, ya que están fuera de los límites de energía propuestos.

Existen otros tipos de reacciones radiación materia, a modo de ejemplos se listan algunas a continuación, ya que no son tratados en este trabajo.

- Interacción de las partículas cargadas con la materia
 - Dispersión elástica de electrones y positrones
 - Colisiones inelásticas
 - Emisión de radiación de frenado
 - Aniquilación del positrón
 - Dispersión elástica múltiple de electrones y positrones
 - Dispersión inelástica múltiple
- Radiación fluorescente
 - Rayos x característicos
 - Electrones Auger
- Interacción de los neutrones con la materia
 - Dispersión elástica
 - o Dispersión inelástica. Reacciones nucleares y captura radioactiva

3. MÉTODOS DE MONTE CARLO (MC)

3.1. Introducción al uso de métodos de Monte Carlo en física médica

A continuación se presenta una introducción al uso de métodos de Monte Carlo en física médica.

3.1.1. Conceptos básicos

El nombre Monte Carlo fue acuñado en la década de 1940 por científicos que trabajan en el proyecto de armas nucleares en Los Álamos (USA) para designar una clase de métodos numéricos, basados en la uso de números aleatorios. Hoy en día los métodos de Monte Carlo son ampliamente utilizados para resolver problemas físicos y matemáticos complejos, en particular aquellos que involucren variables múltiples independientes, y donde los métodos numéricos más convencionales exigirían cantidades desmesuradas de memoria de la computadora.

En las simulaciones del transporte de radiación con el método de Monte Carlo al recorrido de una partícula a través de cualquier medio, se le conoce como histórico (pista o *track*) de la partícula y es visto como una secuencia aleatoria de vuelos libres que termina con una interacción del evento (partícula en movimiento), donde la partícula pude sufrir una o varias de las siguientes características: cambia su dirección de movimiento, perder energía y dependiendo de la naturaleza de la partícula y del tipo de colisiones producidos en ocasiones, produce partículas secundarias. La simulación con Monte Carlo de un experimento dado (por ejemplo, un haz de electrones o fotones

57

procedente de una fuente de irradiación y que incide sobre un medio material, consiste en la generación numérica de historias aleatorias.

Para simular estas historias se necesita de un modelo de interacción, es decir, un conjunto de diferenciales de secciones transversales (DST) para el relevante mecanismos de interacción. La DST determina las funciones de distribución de probabilidad (FDP) de las variables aleatorias, que caracterizan una pista que pueden ser:

- Camino libre entre sucesivas eventos de interacción.
- Tipo de interacción o proceso que tiene lugar.
- La pérdida de energía y dirección angular en un evento particular (y el estado inicial de partículas secundarias que emiten, si se da caso).

Una vez conocidas las FDP, las historias aleatorias se pueden generar mediante el uso apropiado de métodos de muestreo por computadora. Si el número de historias generadas es cuantitativamente lo suficientemente grande, la información sobre el proceso de transporte puede obtenerse a través de simples promedios sobre las historias simuladas.

Desde que las radiaciones ionizantes se convirtieron en una aplicación terapéutica, el cálculo de distribución de dosis ha sido un problema, debido a la complejidad de la planificación de tratamientos. Para la planificación de tratamientos en radioterapia se utilizan potentes algoritmos que emplean métodos de convolución y superposición de dosis, calculadas previamente con métodos de Monte Carlo (MC) abreviados, y que en general son válidos para la mayoría de las circunstancias; en cambio, cuando en un tratamiento aparecen gradientes de dosis o distribuciones complejas (en IMRT o en radiocirugía) o

58

cuando el tejido a irradiar es muy heterogéneo, estos algoritmos pueden dar valores fuera de los márgenes permitidos para la salud.

Todos los algoritmos cuentan con una gran colección de medidas experimentales, realizadas en medios homogéneos equivalentes a agua para ajustar sus resultados y caracterizar a los sistemas de radiación en los que se van a utilizar. Por ello casi todos basan sus resultados en la densidad electrónica del medio que deben atravesar las radiaciones, como si todo fuese agua de diferentes densidades. Debido a esto, los mejores resultados se obtienen en medios homogéneos, bastante lejos de la realidad del sistema heterogéneo que caracteriza al paciente.

Para paliar este problema, se ha comenzado a introducir en parte de los cálculos de algunos sistemas de planificación, métodos de MC en localizaciones complejas como los pulmones (por su interface tejido-aire), ya que hasta ahora se ha demostrado que los métodos MC aplicados al transporte de radiaciones ionizantes, es el mejor método de cálculo de dosis en cualquier tipo de medio y geometrías complejas, contemplando toda la física implicada en el problema. En la figura 25 se puede observar un ejemplo de un sistema de planificación en acción.





Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

3.2. Hardware para simulaciones

La parte negativa del método de MC es la gran potencia de cálculo que se necesita, lo que se traduce en un largo tiempo de computación si se quieren obtener resultados con incertidumbres relativamente pequeñas. La solución a este problema es la instalación de *Clusters* (agrupaciones de computadoras) o redes de distribución (GRID) en hospitales, que permitan disminuir el tiempo de cálculo. A pesar de estas circunstancias, los MC son una excelente herramienta y representan un ahorro significativo de costos de operación para la implementación de cualquier proceso, sean estos en la industria o la garantía en una planificación de tratamientos médicos.

Figura 26. Clusters de computadoras



Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

3.3. Algoritmos de Monte Carlo

El uso real del método de Monte Carlo como una herramienta en la investigación, comenzó con el desarrollo de la bomba atómica en la Segunda Guerra Mundial. Este trabajo involucró una simulación directa de los problemas probabilísticos relacionados con la difusión de neutrones en un material. La posibilidad de aplicar el método de Monte Carlo a los problemas determinísticos y estocásticos fue corroborada por Fermi, Metrópoli y Ulan, cuando obtuvieron estimaciones con este método para los autovalores de la ecuación de Schrödinger.

Actualmente, el Código Monte Carlo N-Particle (MCNP), desarrollado en el laboratorio de Los Alamos, es el programa de computación más completo y complejo basado en MC. El software se utiliza en numerosas y diferentes aplicaciones; como el desarrollo de reactores nucleares, cromodinámica cuántica, radioterapia, evolución estelar, predicciones económicas, flujos de tráfico o radiación en la atmosfera terrestre, entre otros. Existen en el mercado otros Códigos de Monte Carlo con aplicaciones específicas como se detalla más adelante.

3.4. Aplicaciones físicas de Monte Carlo

Como es sabido, las soluciones numéricas de un sistema físico se basan en un modelo matemático, a partir del cual se obtienen y resuelven las ecuaciones que describen un estado de dicho sistema. En general, dichos modelos son sencillos, porque los sistemas no son muy complejos. El problema aparece cuando se quiere estudiar sistemas como las interacciones nucleares, que no pueden ser resueltos con modelos sencillos.

61

La simulación de Monte Carlo es una técnica cuantitativa y cualitativa, que utiliza la estadística y la computación aplicada (física computacional, esta es otra disciplina moderna de la física) para imitar mediante modelos matemáticos, el comportamiento aleatorio de sistemas reales; así los procesos físicos son simulados teóricamente sin necesidad de resolver completamente las ecuaciones del sistema.

Figura 27. Simulaciones de un haz de radiación con Monte Carlo



Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

En esencia, el Código de MC construye un modelo estocástico (ya que no se puede prever qué tipo de interacción se producirá en cada momento y lugar, sino que solo se puede asignar una probabilidad a cada uno de los posibles sucesos), que basándose en las distribuciones de probabilidad (calculadas previamente a partir de las conocidas secciones eficaces de las diversas interacciones), modela eventos individuales de una variable aleatoria.

Para cualquier evento, el código genera un número aleatorio de funciones de densidad de probabilidad (distribución de probabilidad de un suceso), que definen el tipo de interacción y otros parámetros. Posteriormente se calcula el valor esperado de todos los eventos, que es equivalente al valor de una cantidad física en el sistema estudiado. Es decir, teóricamente se siguen todas las interacciones (absorción, dispersión, entre otras) que sufre una partícula desde su origen hasta su condición final; lo mismo se aplica a todas las partículas creadas en el proceso. Todos los datos físicos que van a determinar las interacciones están incluidos en el código, de forma que mediante estas secuencias de números aleatorios se puede simular lo que ocurre en la naturaleza.

3.5. Número de historias (pistas o *tracks*)

Una historia (o pista) comienza calculando mediante procesos aleatorios la probabilidad de crear una partícula, y de forma análoga se obtiene la energía, posición y dirección inicial de dicha partícula, teniendo en cuenta que cada dato es independiente de los demás.

Después se simula la distancia libre media que recorrerá la partícula antes de interaccionar, y el tipo de colisión que sufrirá. La energía y dirección de las partículas dispersadas y de las partículas secundarias, son variables aleatorias que también se tienen en cuenta en la simulación. Este proceso continua para cada partícula que se va generando hasta que se alcanza la condición final.

63

Así, es evidente que el análisis será mucho más preciso a medida que se aumenta el número de historias simuladas. El límite del número de historias a considerar está determinado sobre todo por el tiempo del que se disponga para cada simulación y el grado precisión esperado. En la figura 28 se ilustra de forma esquemática una historia aleatoria de eventos que sufre un fotón al incidir sobre un material.

Figura 28. Simulación gráfica de una interacción radiación-materia



Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

Debido al desarrollo de la teoría cuántica y gracias a la cual se han podido conocer las distintas secciones eficaces de interacción de las partículas en diversos materiales, como se describió en el capítulo: física de radiaciones, y al avance de las computadoras cada vez más rápidas y potentes, y a la posibilidad de tratar el problema de la de la radiación con métodos estadísticos, el desarrollo y aplicación del método de Monte Carlo aplicado al estudio de la radiación ionizante en la materia, se ha convertido en algo imprescindible.

3.6. Tipos de software de Monte Carlo

Para el uso de métodos de MC, solo los hospitales más nuevos y avanzados cuentan con redes de datos de alta capacidad, en este punto es donde encuentran su lugar los sistemas de cálculo profesional, que aprovechan dicha potencia, programas de libre distribución, que permiten la instalación de máquinas virtuales donde se puede instalar todo lo necesario sin interferir en el uso habitual del sistema.

El problema real aparece cuando se quiere realizar una planificación empleando en los cálculos sólo métodos de MC, ya que para alcanzar la potencia de cálculo necesaria habría que incrementar en gran cantidad el número de unidades de procesamiento de datos (cpu) de computadoras en los hospitales. Una alternativa a este problema son los proyectos GRID, en los que un conjunto de instituciones ponen al servicio del resto unidades de cálculo que en suma forman una máquina capaz de procesar la información necesaria en pocos segundos.

La radioterapia es un campo donde los Códigos de MC con programas de computadora como EGS4, MCNP4C contribuyen enormemente en la determinación de datos básicos de dosimetría. Esto es algo necesario, ya que los algoritmos determinanticos que se utilizaban en la planificación de tratamientos, eran sistemas que se basaban en aproximaciones analíticas sin restricciones para la radioterapia, obteniendo así errores de hasta el 50 por ciento para los haces de electrones y del 30 por ciento para problemas que envolvían el transporte de fotones y electrones cerca de heterogeneidades.

En la actualidad, los métodos de MC son también la base de sofisticados métodos de planificación de tratamientos, debido a la aparición de paquetes

65

específicos de geometrías, como BEAM y de paquetes como DPM o VMC, que implementan una gran mejora en el método MC.

El programa que se implementa a lo largo de este trabajo son una adaptación de unos ficheros (subrutinas de código) desarrollados por el Ms. Fernando A. Martínez, y que se modificaron para poder adaptarlos a este trabajo. A continuación se detallan y muestran las características más relevantes de algunos software con Códigos de Monte Carlo utilizado para distintos fines no solo médicos y de uso comercial y profesional.

- EGS4: paquete para simulaciones MC de transporte de parejas electrónfotón. Rango de energía considerado 1 keV - 10 GeV.
- BEAMnrc: es un sistema de simulación general de MC para modelos generales basado en EGSnrcMP.
- MCNP: con propósito general trabaja energías continuas, geometrías generalizadas, dependencia temporal, transporte MC de parejas neutrónfotón-electrón.
- MCNPX: significa extensión de Monte Carlo N-partículas. Aumenta las capacidades de MCNP4C3 a casi todos los tipos de partículas, a casi todas las energías, y casi todas las aplicaciones, iones pesados y transporte.
- GEANT4: es un conjunto de herramientas para la simulación de paso de partículas a través de la materia. En sus aplicaciones se incluyen física de altas energías, nuclear y aceleradores.

- PENELOPE: utiliza simulaciones MC para el transporte electrones y fotones en materiales arbitrarios y geometrías cuadráticas.
- FLUKA: es una integración del método MC a la física de partículas. Tiene muchas aplicaciones en la física experimental de altas energías, ingeniería, estudios de rayos cósmicos y dosimetría.

Debido a que la mayoría de los programas están siendo desarrollados con lenguajes y paquetes de libre distribución, la implementación de sistemas de este tipo sería relativamente económica, ya que se podrían aprovechar los hospitales actuales y a infraestructuras dedicadas a otros tipos de proyectos de desarrollo. En la figura 29 se puede observar la utilización de los diversos códigos en diferentes aplicaciones.



Figura 29. Publicaciones en diversas categorías de MC, 2008



La diferencia entre códigos tiene que ver sobre todo en el tiempo de ejecución que llevan y el error cometido en los cálculos a través de los diferentes parámetros de entrada. Así como la curva de aprendizaje de cada uno.

4. IMPLEMENTACIÓN DE UN ALGORITMO SIMPLE CON MC

4.1. Física del problema

Como ya se ha mencionado el problema físico que ocupa, es el del paso de fotones a través de la materia. Como ya se detalló los procesos que ocurren son: el efecto fotoeléctrico, la dispersión inelástica / incoherente (que se verá que puede tratarse mediante el efecto Compton), la dispersión elástica con todo el átomo (dispersión Rayleigh / dispersión coherente) y la creación de pares electrón-positrón. La importancia relativa de los diversos procesos depende fundamentalmente de la energía de la radiación incidente, aunque también es muy importante el material con el que se produce la interacción.

En general se pueden establecer unos intervalos aproximados de energías de modo, que en cada uno de ellos unos procesos dominan sobre otros. A energías del fotón incidente sensiblemente superiores a 1,0 MeV el proceso dominante es la creación de pares. A energías del orden de 1,0 MeV domina la dispersión incoherente. Por último a energías sensiblemente menores que 1,0 MeV los procesos dominantes son el efecto fotoeléctrico y la dispersión coherente. En las figuras 32 a la 35 se representan en función de la energía, las secciones eficaces de los distintos procesos para varios materiales. En ellas se puede observar el comportamiento con la energía descrito anteriormente (el hidrógeno es atípico en el comportamiento general).





Fuente: E. Storm and H. I. Israel, Photon cross sections from 1 KeV to 100 MeV for elements Z=1 to Z=100, Nuclear Data Tables. p. 34.

Oxígeno Z = 8

Figura 31.



Fuente: E. Storm and H. I. Israel, Photon cross sections from 1 KeV to 100 MeV for elements Z=1 to Z=100, Nuclear Data Tables. p. 34.





Fuente: E. Storm and H. I. Israel, Photon cross sections from 1 KeV to 100 MeV for elements Z=1 to Z=100, Nuclear Data Tables. p. 36.





Fuente: E. Storm and H. I. Israel, Photon cross sections from 1 KeV to 100 MeV for elements Z=1 to Z=100, Nuclear Data Tables. p. 36.

En cuanto a la dependencia de la importancia relativa de los distintos procesos con el material (para una energía del fotón fija), el efecto fotoeléctrico es más importante a medida que aumenta el número atómico del medio. Si la energía del fotón está en el rango en el que se produce creación de pares dicho proceso, también aumenta su importancia al incrementar el número atómico. Es decir, cuanto más pesado sea el material más importantes son el efecto fotoeléctrico fotoeléctrico y la creación de pares y menos el efecto Compton.

Este comportamiento se desprende de las figuras 32 a la 35 así como de la figura 30 en la que se representa las regiones de dominio de los tres procesos en función del número atómico del material y de la energía del fotón. Teniendo en cuenta este comportamiento, si se restringe el problema a rayos γ de baja energía (E = 1,0 MeV) la producción de pares no ocurre (la energía mínima para que sea posible la producción de pares es ($E = 2m_e =$ 1,022 MeV). Además como puede verse en las figuras indicadas anteriormente a las energías, a las que la dispersión coherente es significativa, el efecto fotoeléctrico es dominante.

Por tanto se puede simplificar el problema considerando sólo la dispersión incoherente y el efecto fotoeléctrico (en la figura 30 se observa que, para materiales ligeros, la creación de pares sólo domina a partir de energías sensiblemente superiores a 1,0 MeV (≈10 MeV) de modo, que hasta esas energías se pueden mantener la simplificación del problema considerando que no hay producción de pares).

72





Fuente: SALVAT, Francesc; et al. PENELOPE. p. 114.

Como ya se mencionó en el capítulo anterior la dispersión incoherente, consiste en la colisión inelástica de un fotón con un electrón atómico. A energías incidentes del fotón del orden de 1,0 MeV todos los electrones atómicos pueden considerarse como si fueran libres, de modo que se puede asumir que la dispersión incoherente está bien descrita por el efecto Compton (colisión inelástica de un fotón con un electrón libre).

Para determinar completamente lo que ocurre en dicho proceso hay que calcular varias cantidades: la probabilidad de que ocurra la interacción en función de la energía del fotón incidente y las nuevas direcciones y energías del fotón y del electrón tras la colisión.

La nueva dirección del fotón se calculará con la sección eficaz diferencial del efecto Compton, que viene dada por la fórmula de Klein-Nishina:

$$\frac{d\sigma_c}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \frac{1}{[1 + \gamma(1 + \cos\theta)]^2} \left[1 + \cos^2\theta + \frac{\gamma^2(1 - \cos\theta)^2}{1 + \gamma(1 - \cos\theta)} \right],$$
(44)

donde σ_c es la sección eficaz por electrón, Ω es el ángulo sólido, r_e es el radio clásico del electrón, γ es la energía del fotón incidente en unidades de la masa del electrón ($m_e c^2$) y θ es el ángulo de dispersión del fotón. En la figura 31 se representa en un diagrama polar la sección eficaz diferencial dada por la ecuación 44 en función del ángulo de dispersión θ . En la figura 31 el parámetro α corresponde con el parámetro γ de la ecuación 44.

Integrando la ecuación 44 para todo el ángulo sólido se obtiene la sección eficaz total del proceso, que da la probabilidad de que ocurra un efecto Compton en función de la energía del fotón incidente:

$$\sigma_c = 2\pi r_e^2 \left[\frac{1+\gamma}{\gamma^2} \left(\frac{2(1+\gamma)}{1+2\gamma} - \frac{\ln(1+2\gamma)}{\gamma} \right) + \frac{\ln(1+2\gamma)}{2\gamma} - \frac{1+3\gamma}{1+\gamma} \right].$$
 (45)



Figura 35. Sección eficaz diferencial del efecto Compton

Fuente: SALVAT, Francesc; et al. PENELOPE. p. 221.

La relación entre las direcciones del fotón y del electrón después de la interacción se obtiene imponiendo la conservación de la energía y el momento. Conocida la dirección del fotón después de la colisión a partir de la fórmula de Klein-Nishina, la nueva dirección del electrón viene dada por:

$$\cot \varphi = (1 + \gamma) \tan(\theta/2), \tag{46}$$

donde φ es el ángulo con el que se dispersa el electrón.
La conservación de la energía y el momento también permite obtener la relación entre las energías del fotón antes, E_0 , y después de la colisión, E:

$$E = \frac{E_0}{1 + \gamma (1 - \cos \theta)}.$$
(47)

Con la fórmula anterior se puede determinar cuál es la energía transferida por el fotón al electrón que, como se explica posteriormente; es la energía que el fotón deposita en el medio.

Cuando el fotón interacciona con el medio, va perdiendo energía de modo que llega un momento en que la energía de ligadura de los electrones atómicos no es despreciable frente a la energía del fotón. En este caso el efecto Compton no describe correctamente la dispersión incoherente y el tratamiento riguroso del problema conduce a la necesidad de introducir unas correcciones a las secciones eficaces que predice la fórmula de Klein-Nishina.

Estas correcciones se introducen mediante unos factores de forma que dependen del átomo considerado y del ángulo con el que se dispersa el fotón, siendo más importantes a medida que aumenta el número atómico y para ángulos de dispersión pequeños. No obstante, como se puede observarse en las figuras 32 a la 35, a las energías a las que estas correcciones son importantes, el efecto fotoeléctrico domina claramente sobre la dispersión incoherente. En consecuencia el uso de la fórmula de Klein-Nishina, sin correcciones en todo el rango de energía de interés no introduce ningún error apreciable en los resultados de la simulación.

A diferencia del efecto Compton, en el efecto fotoeléctrico no se puede encontrar fórmulas simples que describan el proceso. El tratamiento riguroso produce resultados que no pueden expresarse como funciones analíticas.

Entre los valores más precisos de que se disponen de las secciones eficaces fotoeléctricas están los obtenidos numéricamente por Storm e Israel. Estas secciones eficaces están dadas en forma de tablas de datos para cada *Z* y cada energía del fotón, y son las que se utilizan en los programas profesionales de simulación como EGS4. Para poder usar estas secciones eficaces es necesario un fichero de datos distinto para cada elemento químico, lo que complica la realización del programa.

En este trabajo lo que se buscó fue implementar un algoritmo sencillo; por este motivo no se usarán las secciones eficaces de Storm e Israel, sino una aproximación propuesta por Messel y Crawford. Con esta aproximación la sección eficaz fotoeléctrica puede escribirse como:

$$\phi = \phi_0 \left(b_0 + \frac{b_1}{\gamma} + \frac{b_2}{\gamma^2} \right) f(\alpha Z), \tag{48}$$

donde ϕ es la sección eficaz, γ es la energía del fotón en unidades de $m_e c^2$, α es la constante de estructura fina, $\phi_0 = 4\pi r_0^2 (\alpha Z)^4 (Z/\gamma)$, r_0 es el radio clásico del electrón y b_0 , b_1, b_2 , y $f(\alpha Z)$ son funciones tabuladas, como se ve en la siguiente tabla.

| αΖ | b_0 | b ₁ | b ₂ | $f(\alpha Z)$ |
|------|-------|-----------------------|-----------------------|---------------|
| 0 | 1.008 | 1.926 | 2.107 | 1.079 |
| 0.1 | 0.704 | 1.647 | 1.592 | 1.079 |
| 0.15 | 0.604 | 1.547 | 1.411 | 1.092 |
| 0.2 | 0.522 | 1.46 | 1.258 | 1.092 |
| 0.25 | 0.455 | 1.392 | 1.114 | 1.102 |
| 0.3 | 0.402 | 1.339 | 0.985 | 1.102 |
| 0.35 | 0.358 | 1.297 | 0.866 | 1.115 |
| 0.4 | 0.323 | 1.265 | 0.753 | 1.115 |
| 0.45 | 0.293 | 1.247 | 0.636 | 1.134 |
| 0.5 | 0.268 | 1.234 | 0.528 | 1.134 |
| 0.55 | 0.248 | 1.234 | 0.407 | 1.162 |
| 0.6 | 0.232 | 1.234 | 0.278 | 1.162 |
| 0.65 | 0.218 | 1.263 | 0.134 | 1.201 |
| 0.70 | 0.207 | 1.293 | -0.04 | 1.201 |

Tabla II. Datos de Messel y Crawford

Fuente: H. Messel and D. F. Crawford, Electron-photon shower distribution function tables for Lead. Apéndice.

En este caso también se necesita un fichero de datos de entrada, pero es válido para todos los materiales.

Existe una aproximación más sencilla que la de Messel y Crawford debida a Davisson, en la que la sección eficaz fotoeléctrica viene dada por una fórmula aplicable a todos los materiales, pero que sólo es válida en un rango muy restringido de energía del fotón incidente $E_K \ll E \ll m_e c^2$. Por este motivo en el algoritmo propuesto se utilizará la aproximación más completa de Messel y Crawford. Las secciones eficaces de Storm e Israel han sido contrastadas experimentalmente, y en las figuras 32 a la 35 corresponden a las curvas etiquetadas como fotoeléctrico. Se puede por tanto en esas figuras comparar ambas secciones eficaces: Storm-Israel (curva azul) y Messel-Crawford (curva naranja). Hay que tener en cuenta que tanto en el efecto Compton como en el fotoeléctrico tras producirse la interacción, un electrón se transporta por el material frenándose y depositando energía hasta que es absorbido completamente por el medio. Dado que el alcance de los electrones es menor que el de los fotones en varios órdenes de magnitud a la escala espacial del problema que se trata en este trabajo, se puede considerar que el electrón es completamente absorbido en el mismo punto donde se produce la interacción, lo que simplifica en gran manera el problema.

En pocas palabras, se trata el problema considerando únicamente dos procesos: efecto Compton y fotoeléctrico. Ya se ha descrito qué es lo que ocurre cuando un fotón sufre una interacción dentro de un material. También se necesita saber qué ocurre entre dos interacciones. Entre interacciones sucesivas el fotón se propaga libremente y la distancia media recorrida viene dada por el recorrido libre medio λ :

$$\lambda = \frac{1}{N\sigma'} \tag{49}$$

donde *N* es la densidad de átomos en el medio y σ es la sección eficaz total por átomo, es decir la suma de las secciones eficaces de todos los procesos que pueden tener lugar en la interacción del fotón con la materia. En este caso el efecto Compton y fotoeléctrico: $\sigma = \phi + Z\sigma_c$.

En el algoritmo simple implementado en este trabajo, cuando un fotón entra en el medio, experimenta sucesivas dispersiones Compton hasta que escapa del material o bien es absorbido por efecto fotoeléctrico (incluyendo la posibilidad de que el rayo γ primario sea absorbido en la primera interacción). La física del problema está completamente descrita conociendo las propiedades

del medio (densidad, número atómico, masa atómica), las características del fotón (energía y dirección) y las características de las interacciones (secciones eficaces).

4.2. Implementación del método de MC al algoritmo simple

En el algoritmo de Monte Carlo que se implementa para la simulación, se necesita generar números aleatorios (piedra angular de los métodos de Monte Carlo) que sigan una cierta distribución de probabilidad en general no uniforme. Dado que la mayoría de lenguajes de programación disponen de un generador uniforme de números pseudoaleatorios en el intervalo [0,1], sería útil disponer de algún método que permitiera generar números aleatorios, que respondan a cualquier distribución a partir del generador uniforme. Para ello se utilizan dos métodos: el directo y el de rechazo.

4.2.1. Método directo

Sea χ una variable aleatoria cuya densidad de probabilidad viene dada por la función p(x) y su dominio de definición es el intervalo [a, b]. Entonces la probabilidad de que la variable χ tome un valor entre x y x + dx es:

$$P(x < \chi < dx) = p(x)dx.$$
(50)

Construyendo la variable aleatoria r de la siguiente forma:

$$r = \int_{a}^{\chi} p(x) dx \tag{51}$$

Entonces, se puede demostrar que r es una variable aleatoria uniforme entre 0 y 1. Por tanto, si se quiere generar una variable aleatoria χ con densidad de probabilidad p(x) a partir de un generador de números uniforme r, se despeja χ de la ecuación anterior, de modo que por cada número rproporcionado por el generador uniforme, se obtiene un número χ según la ecuación 51.

Para que este método sea aplicable, es necesario que la integral tenga una primitiva analítica y que, además sea lo suficientemente sencilla como para poder despejar χ en función de r. Si alguna de estas dos condiciones no se cumplen, se recurre al método de rechazo.

4.2.2. Método de rechazo

Para poder aplicar este método es necesario que la densidad de probabilidad de la variable que se quiere generar esté acotada. El método consiste en lo siguiente: se escoge una cota superior K de p(x) y se generan dos números aleatorios uniformes r y s, donde r debe estar dentro del dominio de definición de p(x) y s debe cumplir s < K. Se evalúa p(x) en el punto r obteniéndose un valor s'. Si s < s' entonces el valor r se toma como bueno, si no, se repite el procedimiento hasta que se verifique s < s'.

Este método tiene menos limitaciones que el anterior, pero es siempre menos eficiente aleatoriamente hablando. En concreto para distribuciones de probabilidad cuyo comportamiento no sea suave, hay que tener muy en cuenta el problema de la eficiencia.

4.3. Simulación del paso de fotones de baja energía a través de la materia con el método de Monte Carlo

Existen innumerables formas de aplicar los métodos de MC, básicamente el problema que se trata en este trabajo con el método de Monte Carlo es el siguiente: un fotón entra en el material, experimenta sucesivas dispersiones debidas al efecto Compton, en las que va perdiendo energía y variando su trayectoria, hasta que sale del material o es absorbido por efecto fotoeléctrico. La distancia media recorrida entre dos interacciones sucesivas es el recorrido libre medio λ .

Por tanto, el mecanismo de simulación será el siguiente: se determina la energía del fotón cuya dirección incidente será siempre normal al material, se le hace avanzar una distancia aleatoria de acuerdo con la probabilidad de interacción y se determina qué proceso ha ocurrido. A continuación se calculan los ángulos de dispersión para la nueva energía del fotón y se repite el proceso hasta que el fotón abandona el material o es absorbido por el medio (por efecto fotoeléctrico o porque la energía del fotón sea menor que un cierto umbral que se tomara como 0,01 MeV).

La probabilidad de que un fotón recorra una longitud x sin interaccionar y que lo haga en el siguiente dx es:

$$p(x)dx = N\sigma e^{-N\sigma x}dx,$$
(52)

donde*N* es el número de partículas por unidad de volumen en el medio y σ es la sección eficaz total.

Por definición el recorrido libre medio es $\lambda = \langle x \rangle$. Entonces se tiene que:

$$\lambda = \frac{\int_0^\infty x e^{-N\sigma x} dx}{\int_0^\infty x e^{-N\sigma x} dx} = \frac{1}{N\sigma}.$$
(53)

Por tanto, se puede escribir la ecuación 52 como:

$$p(x)dx = \frac{1}{\lambda}e^{-x/\lambda}dx.$$
 (54)

Con esta distribución de probabilidad es con la que se tiene que generar el espacio recorrido entre dos interacciones sucesivas. Aplicando el método directo se obtiene:

$$s = \frac{\ln r}{N\sigma'}$$
(55)

donde r es un número aleatorio distribuido uniformemente en el intervalo [0,1]. A partir de la fórmula anterior, se calcula la distancia que recorre el fotón desde que entra en el material hasta el punto donde sufre la primera interacción. A continuación se determina qué proceso ha tenido lugar: efecto Compton o fotoeléctrico. Para ello se calcula el cociente entre las secciones eficaces Compton y fotoeléctrica, se divide el intervalo [0,1] en dos subintervalos, cuyo cociente sea igual al calculado con las secciones eficaces y se elige un número aleatorio distribuido uniformemente en ese intervalo.

Dependiendo de a qué subintervalo pertenezca dicho número, el fotón sufrirá un efecto Compton o un efecto fotoeléctrico. Si lo que ocurre es un efecto Compton, el fotón es dispersado de modo que después de la colisión su

energía y su dirección habrán cambiado. La dirección vendrá determinada en coordenadas esféricas, en el sistema de referencia del fotón, por el ángulo cenital θ y el ángulo azimutal ϕ . Estos ángulos se obtienen a partir de la sección eficaz diferencial dada por la fórmula de Klein-Nishina, la cual es dada en la ecuación 44. Como el problema tiene simetría cilíndrica, la sección eficaz diferencial no depende de ϕ y, por tanto dicho ángulo es equiprobable, es decir; su distribución de probabilidad es una constante. Según el método directo ϕ vendrá dado por:

$$\phi = 2\pi r,\tag{56}$$

donde r es un número aleatorio distribuido uniformemente entre 0 y 1. Para el cálculo del ángulo θ se utiliza el método de rechazo, ya que aunque la fórmula de Klein-Nishina es integrable, no se puede despejar θ según el método directo.

De esta forma se calculan los ángulos θ y ϕ con los que se desvía el fotón. Estos ángulos están referidos al sistema de referencia del fotón antes de la dispersión. Para poder implementar el algoritmo se debe referir todo a un Sistema de Referencia fijo del Laboratorio (SRL) figura 36, --la Mecánica newtoniana en acción--.

Sean (θ_1, ϕ_1) los ángulos que determinan la dirección del fotón antes del choque y (θ_2, ϕ_2) , los que determinan la dirección después del choque en el SRL. La relación entre estos ángulos y los medidos en el sistema de referencia del fotón antes de la dispersión $(\theta \ y \ \phi)$, se obtiene de las siguientes expresiones:

$$\cos\theta_2 = \cos\theta_1 \cos\theta + \sin\theta_1 \sin\theta \cos\phi, \tag{57}$$

$$\cos(\phi_2 - \phi_1) = \frac{\cos\theta - \cos\theta_2 \cos\theta_1}{\sin\theta_1 \sin\theta_2},$$
(58)

$$\sin(\phi_2 - \phi_1) = \frac{\sin\theta\sin\phi}{\sin\theta_2}.$$
(59)

Una vez conocido el ángulo, se puede a partir de la ecuación 47, calcular la energía del fotón tras el choque. Con esta energía se obtienen nuevas secciones eficaces que nos permiten calcular la nueva distancia que recorrerá el fotón hasta la siguiente interacción de acuerdo con la ecuación 55.

Conocida esa distancia y los ángulos $\theta_2 y \phi_2$ se obtiene la posición del fotón en coordenadas cartesianas:

$$x = s\sin\theta_2\cos\phi_2,\tag{60}$$

$$y = s\sin\theta_2\sin\phi_2,\tag{61}$$

$$z = s \cos \phi_2, \tag{62}$$

donde el eje z es perpendicular al material.

Figura 36. Representación esquemática de un track para un SRL



Fuente: SALVAT, Francesc; et al. PENELOPE. p. 165.

Una vez calculada la posición del fotón, se comprueba si ha salido o no del material. Si el fotón no ha salido se vuelve a sortear qué proceso ha tenido lugar. Si lo que ocurre es un efecto fotoeléctrico, el fotón cede toda su energía en el punto de interacción y acaba su recorrido.

A continuación se muestra un esquema del algoritmo empleado:

Figura 37. Diagrama de flujo del algoritmo simple con Monte Carlo



Fuente: elaboración propia.

4.4. El algoritmo simple de Monte Carlo

Para implementar el algoritmo simple de MC mostrado en el apartado anterior, se escribió un programa utilizando el entorno de desarrollo y cálculo técnico llamado MATLAB (versión académica). Al ejecutar el programa aparecen una serie de preguntas para introducir los datos de entrada:

- Características del medio: nombre, densidad (g/cm³), número de elementos químicos, número de átomos de cada especie por molécula, número atómico y masa atómica de cada especie.
- Geometría del problema: por *default* se utiliza plana, con sus correspondientes dimensiones, pero con una ligera modificación puede ser cilíndrica.
- Características del fotón incidente: energía (MeV).
- Características de la simulación: número de simulaciones.
- Opciones de salida: son opciones gráficas y permiten visualizar el paso de la radiación a través del medio, donde se muestra una ventana gráfica en la que se representan los límites de una lámina y se van dibujando una a una las trayectorias de los fotones o la opción de los puntos donde los fotones terminan y van depositando energía. Al terminar el paso de todos los fotones se muestran en pantalla los coeficientes de transmisión, reflexión y absorción, así como el número de fotones que se han transmitido sin interaccionar y aquellos que han interaccionado más de una vez. También se muestra el tiempo que al software le lleva realizar los cálculos.

El formato matricial matemático ha dado lugar a diferentes sistemas de coordenadas para la representación del haz, algunos de los cuales se han mantenido hasta hoy, ver figura 38, pero el algoritmo aquí propuesto da una representación gráfica de dos tipos: de trayectoria reales; las que representan la historia o pista del fotón incidente, y de puntos que representan donde el fotón va depositando energía (es decir el lugar donde termina la pista del fotón) una vez atraviesa el material ambas gráficas describen el haz simulando en el espacio dando la posición inicial y final real de cada fotón.





Fuente: Radiofísica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

A parte de las representaciones gráficas en tiempo real de la simulación, se generan 6 gráficas que dan información cuantitativa y cualitativa de los cálculos realizados, estas generan ficheros de datos de dichos cálculos, y para la presentación de resultados en este trabajo se presentaran dichas gráficas y se hará un análisis sistemático de dichos resultados, estas 6 gráficas son:

Dos gráficas de la distribución angular de los fotones transmitidos y reflejados, respectivamente y operan de la siguiente manera: se obtiene la fracción de fotones que se han transmitido y reflejado con un ángulo cenital entre θ y $\theta + \Delta \theta$ por unidad de ángulo sólido $(2\pi \sin \theta \Delta \theta)$ en función del ángulo θ , gráficamente es decir $\frac{dn}{d\omega}[\text{str}^{-1}]$ versus $\theta[^{\circ}]$. Para obtener estas distribuciones se utilizan dos subrutinas que dividen los intervalos $[0, \pi/2]$ y $[\pi/2, \pi]$ en 45 subintervalos, cada uno de ellos de dos grados de longitud. Cuando el fotón abandona la lámina, el programa obtiene el ángulo con el que ha salido y aumenta en una unidad el contador del intervalo angular correspondiente. De este modo una vez simulación, calcula distribución finalizada la se la angular correspondiente.

Figura 39. Representación esquemática de la distribución angular de fotones transmitido o reflejados



Fuente: SALVAT, Francesc; et al. PENELOPE. p. 278.

Dos gráficas de la distribución energética de los fotones transmitidos y reflejados respectivamente, y operan de la siguiente manera: se obtiene la fracción de fotones que se han transmitido y reflejado con una energía entre E y E + ΔE por unidad de energía en función de la energía E, gráficamente es decir dn [MeV⁻¹] versus E[MeV].

En este caso la subrutina correspondiente procede como en el caso anterior, pero ahora se divide el intervalo $[0,01, E_0]$ (E_0 = energía incidente del fotón) en 50 subintervalos.

Figura 40. Representación esquemática de la distribución energética de fotones transmitido o reflejados



Fuente: SALVAT, Francesc; et al. PENELOPE. p. 27.

Una gráfica de la energía depositada en el material, que se obtiene la energía *E_i* (en KeV) depositada en el medio por fotón y por unidad de profundidad en función de la profundidad, gráficamente es decir ^{dn}/_{dz} [KeV/ fotón – cm] *versus* Profundidad[cm].

La subrutina divide la lámina en 50 capas y calcula en qué capas deja energía el fotón almacenando la energía depositada en cada capa. Donde $\sum E_i$

es la energía total del sistema, aplicando el principio de conservación de la energía.

• Por último una gráficas del espectro de energía absorbida, que se obtiene la fracción de fotones que dejan en el material una energía entre E y $E + \Delta E$ por unidad de energía en función de la energía E, gráficamente es decir $\frac{dn}{dE}$ [MeV⁻¹] *versus* E [MeV]. La subrutina divide el intervalo [0,01, E_0] en 50 subintervalos y calcula cuál es la energía depositada por cada fotón a su paso por la lámina. Estas gráficas se graban automáticamente cada vez que se realiza una simulación.

Figura 41. Representación esquemática del espectro de energía absorbida



Fuente: SALVAT, Francesc; et al. PENELOPE. p. 247.

A continuación se presentan algunas capturas de pantalla del algoritmo puesto en marcha en un editor de texto plano y sobre MATLAB.

Figura 42. Editor de texto plano Notepadd++

| Editor - C:\Users\root0\Desktop\myTesis\useParaTesis\ | _ □ | x | | | |
|---|---|-------|--|--|--|
| File Edit Text Go Cell Tools Debug Desktop Window Help | | X 5 K | | | |
| 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 | l ■ 📾 B > fx | | | | |
| *= 5 5 - 1.0 + + + 1.1 × 🕺 🜌 🔍 | | | | | |
| 1 % | | | | | |
| 2 % ENTRADA DE DATOS | | ^ | | | |
| 3 - disp('+ | +'); | | | | |
| 4 - disp(' :UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMLA:: | ('); | | | | |
| 5 - disp(' >> FACULTAD DE INGENIERIA << | ('); | | | | |
| 6 - disp('+ | +'); | | | | |
| 7 - disp(' PROGRAMA: | ('); | | | | |
| 8 - disp(' SIMULACION POR EL METODO DE MONTECARLO | ('); | | | | |
| 9 - disp(' DEL PASO DE RADIACION GAMMA DE BAJA ENERGIA | ('); | | | | |
| 10 - disp(' A TRAVES DE MEDIOS MATERIALES | ('); | | | | |
| 11 - disp(' | ('); | | | | |
| 12 - disp(' AUTOR: JOSE LUIS ALVAREZ GONZALEZ | <pre>disp(' AUTOR: JOSE LUIS ALVAREZ GONZALEZ ');</pre> | | | | |
| 13 - disp(' ASESOR DE TESIS: Lic. AMAHAN SANCHEZ | disp(' ASESOR DE TESIS: Lic. AMAHAN SANCHEZ '); | | | | |
| 14 - disp(' LICENCIATURA EN FISICA APLICADA | ('); | | | | |
| 15 - disp('+ | +'); | | | | |
| 16 - disp(':: :: | '); | | | | |
| 17 - disp('+ | +'); | | | | |
| 18 - disp(' CARACTERISTICAS DEL MEDIO: | (); | | | | |
| 19 - disp(+ | +'); | | | | |
| <pre>20 mac-input(' material> ; ', '3'); 21 - rho=input(' Densided(g/gm^3)> = ');</pre> | <pre>mat=input(' Material> : ','s'); phe=input(! Depeided(g(gr(2)) -> - 1);</pre> | | | | |
| 22 - negripput (' NUMERO DE ELEMENTOS OUIMICOS> = '); | <pre>rno=input(' Densidad(g/cm⁻³)> = '); nog=input(' NUMEDO DE ELEMENTOS OUTMICOS> = ');</pre> | | | | |
| 23 - disn(! !): | | 5 | | | |
| | | , Ť | | | |
| | | / | | | |
| | Ln 1 Col 1 | OVR: | | | |

Figura 43. Plantilla de inicio del software en MATLAB



5. **RESULTADOS**

Los resultados están divididos en dos partes, por un lado se presentan los obtenidos y su respectivo análisis de una simulación del paso de fotones a través de un material (aluminio) con geometría plana como se ve en la figura 44 con la implementación del algoritmo simple, y después se presentan los resultados obtenidos y se comparan con los resultados obtenidos con un software de uso profesional llamado EGS4.





Fuente: SALVAT, Francesc; et al. PENELOPE. p. 248.

5.1. Resultados generados con el algoritmo simple implementado en este trabajo

Todos los resultados mostrados en este apartado, se han obtenido mediante simulaciones de 10^6 fotones de energía incidente 1 MeV a través del aluminio, el cual es un material de uso frecuente en física médica, utilizado para colimar haces de energía radiante a excepción las figuras 45, 47 y 49 en las que el número de fotones simulados fue de 10^2 en las gráficas de trayectorias (por fines de presentación) y de 10^3 en las gráficas de puntos en las figuras 46, 48 y 50.

Los resultados obtenidos con el algoritmo simple para un material típico de uso común en física médica como lo es el aluminio, se tiene: las figuras 45 a 50 muestran los resultados obtenidos con la opción gráfica para láminas de $0,2\lambda$, 1λ y 5λ respectivamente (1,208 cm, 6,041 cm y 30,206 cm), donde λ es el recorrido libre medio para una energía de 1,0 MeV. En estas figuras se muestran los dos tipos posibles de salida gráfica: trayectorias de los fotones y puntos donde debido a una interacción se ha depositado energía. Como se puede observar a medida que aumenta el espesor de la lámina, disminuye el número de fotones transmitidos.

También se aprecia cómo la energía depositada se concentra en la dirección incidente (ya que la primera interacción siempre tiene lugar en esa dirección), cómo la energía depositada disminuye a medida que aumenta la distancia al eje de incidencia (debido a que, a medida que el fotón interacciona, va perdiendo energía y por tanto, el recorrido libre medio es cada vez menor) y cómo disminuye a medida que aumenta la profundidad (debido a que la probabilidad de interacción decae con la distancia recorrida, siendo máxima en el punto de contacto con la lámina, como se indica en la ecuación 54; este

96

efecto sólo se aprecia en la lámina de 5λ . Por último también se observa que la distribución de energía depositada presenta simetría cilíndrica alrededor de la dirección de incidencia. Ello es debido a la intrínseca simetría cilíndrica del problema puesta de manifiesto en la fórmula de Klein-Nishina ecuación 44.

Figura 45. Geometría plana para un haz de fotones a través del aluminio de $0, 2\lambda$ (gráfica de trayectorias)



Fuente: elaboración propia.





Figura 47. Geometría plana para un haz de fotones a través del aluminio de 1λ (gráfica de trayectorias)



Fuente: elaboración propia.

Figura 48. Geometría plana para un haz de fotones a través del aluminio de 1λ (gráfica de puntos)



Figura 49. Geometría plana para un haz de fotones a través del aluminio de 5λ (gráfica de trayectorias)



Fuente: elaboración propia.

Figura 50. Geometría plana para un haz de fotones a través del aluminio de 5λ (gráfica de puntos)



Ahora pasando al resto de resultados obtenidos se tiene:

En las gráficas correspondientes a las distribuciones angulares de los fotones transmitidos, figuras 51, 52 y 53, lo primero que se observa es que el máximo de la distribución corresponde a un ángulo de 0 grados, lo que se corresponde con la figura 35, que representaba la sección eficaz diferencial dada por la fórmula de Klein-Nishina. El hecho de que a 90 grados la distribución alcance su mínimo, también está de acuerdo con dicha figura, y el que el mínimo sea cero se debe a que ningún fotón puede escapar de la lámina con un ángulo de 90 grados, debido a la propia geometría del problema.

En cuanto a las distribuciones angulares de los fotones retrodispersados (reflejados) figuras 54, 55 y 56 el mínimo es cero y ocurre a 90 grados (por el mismo motivo que anteriormente se comentó). El máximo ocurre a 180 grados como era de esperar a la vista de la figura 35. En la lámina de $0,2\lambda$ sólo interaccionan más de una vez el 5 por ciento de los fotones, aproximadamente. Esto hace que las distribuciones angulares prácticamente coincidan con la fórmula de Klein-Nishina. Por este motivo en dicha lámina la distribución de fotones reflejados presenta un máximo plano extendido entre aproximadamente 120 y 180 grados, debido a que la sección eficaz diferencial se mantiene constante entre dichos ángulos, según la figura 35.

También se comprueba el acuerdo con la fórmula de Klein-Nishina en el hecho de que el cociente entre los máximos de la distribución de los fotones transmitidos y de los reflejados es aproximadamente 7, según la figura 35.

Al aumentar el espesor de la lámina el número de fotones que interaccionan más de una vez es muy grande de modo que, dado que los fotones pierden energía en cada interacción, las distribuciones angulares ya no

100

siguen exactamente la fórmula de Klein-Nishina, sino que responden a una mezcla de distribuciones que siguen dicha fórmula para energías del fotón menores o iguales que 1,0 MeV.

Esto hace que el máximo de la distribución de los fotones reflejados se vaya acentuando y se pierda la planitud comentada anteriormente, ya que como se ve en la figura 35, la sección eficaz diferencial deja de ser constante con el ángulo. La mezcla de distribuciones también hace que el cociente entre los máximos de ambas distribuciones disminuya, ya que a medida que la energía del fotón decrece, el valor de la sección eficaz a 180 grados aumenta, mientras que el valor a 0 grados se mantiene constante. En general, esto pasa para cualquier otro ángulo, debido a que a medida que la energía del fotón decrece, la sección eficaz aumenta más rápidamente para ángulos entre 90 y 80 grados que para ángulos entre 0 y 90 grados.

Las distribuciones energéticas de los fotones transmitidos, figuras 57, 58 y 59 son fuertemente dependientes del espesor de la lámina. En la lámina de $0,2\lambda$ se observa un mínimo en $\approx 0,3$ MeV, un máximo local a energías menores que 0,3 MeV y un crecimiento monótono con la energía a partir del mínimo.

Para la lámina de 1λ el máximo ha crecido manteniéndose el mínimo en ≈ 0.3 MeV, mientras que en el caso de la lámina de 5λ el máximo es muy pronunciado y la distribución decrece para energías mayores que la del máximo.

La explicación física se puede hacer en términos de la ecuación 47. Con una sola interacción Compton y para ángulos θ entre 0° y 90° grados (fotones transmitidos) la energía del fotón E_1 después del choque está entre $E_0(1 + \gamma)$ y E_0 .

101

Por tanto, para una energía incidente de 1 MeV, la mínima energía que lleva el fotón tras la interacción es de ≈ 0.3 MeV. Es decir, la zona de energía menor que 0.3 MeV no es accesible a fotones que sólo han sufrido una interacción Compton, por lo que el pequeño máximo que aparece en la lámina de 0.2 λ corresponde a fotones que han interaccionado más de una vez. Al aumentar el espesor de la lámina, el número de fotones que interaccionan más de una vez es mayor, siendo ésta la explicación del crecimiento del pico de energía menor que 0.3 MeV. Esto no quiere decir que todos los fotones que sufren interacciones múltiples contribuyan a dicho pico: por ejemplo, en el caso de la lámina de 5 λ aproximadamente el 90 por ciento de los fotones interacciona más de una vez, por lo que la cola por encima del máximo también corresponde a interacciones múltiples.

Para explicar las gráficas correspondientes a las distribuciones energéticas de los fotones reflejados, figuras 60, 61 y 62 también se hace uso de la ecuación 47. En el caso de que sólo se produzca una interacción Compton y para ángulos θ entre 90 y 180 grados (fotones reflejados), la energía del fotón después del choque está entre $E_0(1 + 2\gamma)$ y $E_0(1 + \gamma)$, que para una energía incidente de 1 MeV corresponde a E_1 entre 0,2 y 0,3 MeV, aproximadamente.

Precisamente en las gráficas correspondientes aparece un máximo de la distribución entre esas dos energías. Si los fotones sólo sufrieran una interacción, debería observarse una caída brusca de la distribución para energías menores que 0,2 MeV. En el caso de la lámina de $0,2\lambda$, lo que se aprecia en lugar de la caída, es una pequeña cola a dichas energías. Por tanto, esa zona de energía corresponde a fotones que han interaccionado más de una vez.

En la lámina de 1λ esa cola se convierte en un máximo secundario y en la lámina de 5λ ese máximo secundario se acentúa en comparación con el máximo principal, debido a que el número de fotones que sufren interacciones múltiples aumenta con el espesor.

Para entender cómo varía el comportamiento de las gráficas correspondientes a la dosis de energía absorbida con el espesor de la lámina se hace uso de la expresión que dice cómo se atenúa un haz de fotones cuando atraviesa un medio material. La intensidad I de fotones tras recorrer el haz una distancia x dentro del material viene dada por:

$$I = I_0 \exp(-x/\lambda). \tag{63}$$

Si los fotones interaccionaran una sola vez dentro del material, la energía depositada en el medio tendría la misma dependencia exponencial que la intensidad, por lo que en las gráficas de la dosis de energía absorbida se debería poner de manifiesto esta dependencia.

En la lámina de $0,2\lambda$ la dosis de energía absorbida es prácticamente constante con la profundidad, debido a que la lámina es muy fina. En la lámina de 1λ ya se aprecia un decrecimiento de la dosis con la profundidad, mientras que en la lámina de 5λ la caída exponencial es totalmente manifiesta, de modo que la energía depositada es casi cero al final de la lámina, ya que el haz es casi atenuado por completo a su paso por el medio.

Sin embargo analizando con más detalle estas gráficas se observa que la dependencia exponencial es solo aproximada, debido a que se producen interacciones múltiples. A partir de las gráficas de las figuras 63, 64 y 65 se puede calcular el valor del parámetro λ que varía entre 8 y 10 centímetros

(dependiendo de la profundidad), mientras que el recorrido libre medio para fotones de 1 MeV en aluminio es de 6 centímetros, aproximadamente.

Para comprender las gráficas correspondientes al espectro de energía absorbida, gráficas de las figuras 66, 67 y 68, se considera cómo es el espectro correspondiente a fotones que sólo sufren una interacción dentro del material. Si la interacción es un efecto fotoeléctrico, el fotón pierde toda su energía en el medio, estos fotones forman un máximo en el espectro situado en la energía incidente de los fotones máximo conocido como fotopico. Si la interacción es una colisión Compton el proceso queda descrito a través de las fórmulas de las ecuaciones 44 a 47. Junto con esas fórmulas también se puede obtener cuál es la energía T que se lleva el electrón tras el choque, que viene dada por:

$$T = E_0 \frac{\gamma(1 - \cos \theta)}{1 + \gamma(1 - \cos \theta)}.$$
 (64)

Esta energía varía entre 0 (correspondiente a $\theta = 0^{\circ}$ grados) y un valor máximo $T_{máx}$ (correspondiente a $\theta = 180^{\circ}$ grados), conocido como borde Compton, que viene dado por:

$$T_{max} = E_0 \frac{2\gamma}{1+2\gamma}.$$
(65)

Entonces el espectro de energía presenta las siguientes características: una distribución continua desde E = 0 hasta la energía correspondiente al borde Compton $T_{máx}$, el fotopicosituado en la energía incidente de los fotones, y entre el borde Compton y el fotopico la distribución se anula, debido a que esa zona de energía no es cinemáticamente posible si sólo se produce un efecto Compton. En este caso la energía incidente es $E_0 = 1,0$ MeV de modo que el borde Compton se encuentra a una energía de 0,8 MeV. En las tres láminas se observa que en el borde Compton la caída no es totalmente brusca y la distribución no se anula entre 0,8 y 1,0 MeV. Por tanto, esa zona corresponde a fotones que han sufrido más de una interacción. A medida que aumenta el espesor de la lámina, la importancia de esa zona es mayor: en la lámina de 0,2 λ se trata de una cola descendiente hacia la energía del fotopico; para la lámina de 1 λ la cola se convierte en un máximo secundario y para la lámina de 5 λ se convierte en la zona de mayor importancia en la región continua del espectro.

Otra característica interesante de la distribución continua que se aprecia en las láminas de $0,2\lambda$ y 1λ es el hecho de que aparece un mínimo aproximadamente a 0,65 MeV. Este mínimo es consecuencia de la geometría del problema, ya que como se comentó anteriormente al ser la lámina de extensión infinita no es posible que escape ningún fotón con un ángulo $\theta = 90$ grados. Esto hace que cuando el fotón sufre una colisión y es dispersado 90 grados no puede depositar sólo la energía correspondiente a esa interacción ($T \approx 0,65$ MeV) sino que por fuerza debe experimentar más colisiones y, por tanto depositar más energía.

Es decir, la intensidad del espectro de energía debería ser cero en 0,65 MeV, porque ningún fotón puede dejar esa cantidad de energía. Sin embargo, en las gráficas el mínimo no es cero debido a la posibilidad de interacciones múltiples.

En cuanto al fotopico se observa que aumenta con el espesor de la lámina, ya que al aumentar el espesor el número de interacciones es mayor, la energía del fotón disminuye y el efecto fotoeléctrico va siendo más importante.

105

A grandes rasgos los aspectos comentados para el aluminio se repiten para el resto de materiales.





Fuente: elaboración propia.





Fuente: elaboración propia.





Fuente: elaboración propia.





Fuente: elaboración propia.





Fuente: elaboración propia.





Fuente: elaboración propia.



Fuente: elaboración propia.





Fuente: elaboración propia.









Fuente: elaboración propia.

Figura 61. Distribución energética de fotones reflejados, 1λ



Fuente: elaboración propia.

Figura 62. Distribución energética de fotones reflejados, 5λ



Fuente: elaboración propia.


Fuente: elaboración propia.

Figura 64.

Dosis de energía absorbida, 1 λ



Fuente: elaboración propia.



Dosis de energía absorbida, 5λ



Fuente: elaboración propia.





Fuente: elaboración propia.





Fuente: elaboración propia.





Fuente: elaboración propia.

5.2. Comparación de los resultados obtenidos con EGS4

Para comprobar la validez de las simulaciones realizadas con el algoritmo, se han comparado algunos de los resultados con los del programa EGS4, que tiene en cuenta todos los posibles procesos de interacción radiación-materia. El número de sucesos simulados en ese trabajo fue de 10^6 .

En las gráficas de las figuras 69 a la 72 se presentan los resultados obtenidos con el algoritmo simple y los resultados de EGS4 superpuestos en las mismas gráficas para dos medios distintos: uno ligero (aluminio) y un medio interesante en el campo de la física médica (agua). En el caso del aluminio se realizaron simulaciones para láminas de $0,2\lambda$, 1λ y 5λ . La simulación con agua fue con una lámina de 50 centímetros de espesor.

Considerando en primer lugar los resultados obtenidos para las láminas de aluminio de $0,2\lambda$, el acuerdo es bueno dentro de las fluctuaciones estadísticas, tanto para las distribuciones angulares y energéticas como para la dosis. En cuanto al espectro de energía absorbida, se observa que el acuerdo es bueno en todo el rango energético si bien el fotopico está ligeramente subestimado en los resultados.

En la lámina de $0,2\lambda$ sólo interaccionan el 18 por ciento de los fotones y tan sólo aproximadamente el 4 por ciento hace más de una vez. Por tanto, casi todos los fotones que interaccionan lo hacen sólo una vez, es decir; con energía de 1,0 MeV. Para esta energía la sección eficaz fotoeléctrica es unas 4 000 veces más pequeña que la sección eficaz Compton y por este motivo el fotopico del aluminio es apreciablemente menos intenso que la distribución continua. El fotopico obtenido con el algoritmo simple es menos intenso que el de EGS4. Esto se debe a que para energías menores que 1 MeV, las secciones eficaces

115

de Messel-Crawford son siempre menores que las de Storm e Israel, excepto en el caso del plomo en que para energías menores que 0,08 MeV los valores de Messel-Crawford pasan a ser mayores, pero para láminas tan delgadas como las de $0,2\lambda$ este hecho no es importante, ya que esas energías tan bajas no se alcanzan.

Es interesante hacer notar cómo las discrepancias en las distribuciones angulares pueden ser explicadas a partir del tratamiento que se haya dado al efecto fotoeléctrico, cuando se podría pensar que tales discrepancias son debidas a un mal tratamiento de la dispersión incoherente.

Por último, el que sean las distribuciones angulares y energéticas de los fotones retrodispersados (reflejados), las que presentan mayores desviaciones respecto a las que se obtienen con EGS4 se puede explicar considerando lo que ocurre cuando se produce un efecto Compton. Los fotones que sufren una desviación muy grande en las colisiones Compton (requisito necesario para reflejarse) pierden mucha energía y por tanto, se encuentran en la zona de baja energía en la que las secciones eficaces fotoeléctricas de Messel-Crawford y las de Storm e Israel presentan una mayor discrepancia. Entonces, en EGS4 tienen más probabilidad de ser absorbidos que en el algoritmo simple, en donde si no se absorben, serán fotones reflejados.

Y los resultados obtenidos para láminas de 1λ de espesor de nuevo los fotopicos están subestimados por el algoritmo simple, siendo la causa la misma que se explicó en el caso de $0,2\lambda$. En cuanto a las distribuciones angulares y energéticas, en este caso ya aparecen discrepancias significativas en el aluminio. Esto se debe a que al ser la lámina más gruesa aumenta el número de fotones que interaccionan (≈ 60 por ciento) así como el número de los que interaccionan más de una vez. Esto hace que los fotones pierdan más energía a

116

su paso por el medio y adquiera mayor importancia la región de menor energía, donde el efecto fotoeléctrico es más sensible a la aproximación realizada (Messel-Crawford).

Finalmente en las láminas de 5λ las discrepancias comentadas en los casos anteriores aumentan, aunque en el caso del fotopico la diferencia entre el algoritmo simple y EGS4 se hace menor. Se debe a que una lámina de 5λ es prácticamente infinita de modo que muy pocos fotones son capaces de atravesarla. Esto hace que casi todos los fotones interaccionen al menos una vez y que, salvo los reflejados casi todos sean absorbidos contribuyendo, por tanto, al fotopico.

En cuanto a la simulación realizada con una lámina de agua de 50 centímetros de espesor, se observa que existen algunas discrepancias en las distribuciones angulares y energéticas, así como en la intensidad del fotopico, mientras que el acuerdo en la dosis de energía absorbida es muy bueno. De nuevo, las diferencias observadas se deben a las distintas secciones eficaces usadas por el algoritmo simple y por EGS4.



Fuente: elaboración propia.

Figura 70.



Fuente: elaboración propia.

Figura 71. **Aluminio Z = 13, E = 1,0 MeV**, 5λ



Fuente: elaboración propia.

Agua, E = 1,0 MeV, 50 centímetros



Fuente: elaboración propia.

CONCLUSIONES

- 1. En el presente trabajo se ha implementado un algoritmo simple de Monte Carlo para simular el paso de fotones con energías ≤ 1,0 MeV. Para estas energías la creación de pares electrón-positrón no es posible y en el rango de energía en que la dispersión coherente es significativa, el efecto fotoeléctrico es dominante. Por tanto, solo se ha tenido en cuenta la dispersión incoherente y el efecto fotoeléctrico, lo que ha permitido simplificar significativamente la implementación del algoritmo. Es interesante hacer notar que para materiales ligeros el algoritmo sigue siendo válido hasta energías del orden de 10 MeV, ya que hasta esas energías la producción de pares es poco importante, siendo dominante la dispersión incoherente.
- 2. El mayor problema con el que se ha encontrado es la dificultad para tratar el efecto fotoeléctrico de forma sencilla y obteniendo a la vez resultados precisos. Esto es debido a que no existe una fórmula analítica que permita describir convenientemente este proceso para cualquier material, es decir que reproduzca correctamente las secciones eficaces fotoeléctricas experimentales. Por tanto, no es posible realizar una simulación sencilla y a la vez precisa del efecto fotoeléctrico.
- 3. En cambio la dispersión incoherente no presenta ninguna dificultad, ya que la sección eficaz dada por la fórmula de Klein-Nishina reproduce con gran exactitud los resultados experimentales, excepto a bajas energías (del orden de la energía de ligadura de los electrones atómicos) donde no se puede considerar que los electrones sean libres. El tratamiento

riguroso de este problema conduce a la necesidad de hacer correcciones a las secciones eficaces del efecto Compton para describir correctamente la dispersión incoherente, es de mencionar que los programas profesionales de Monte Carlo hacen uso de métodos más exactos de la dispersión Compton. No obstante a las energías a las que las correcciones son importantes, el efecto fotoeléctrico es dominante. Por tanto el uso de la fórmula de Klein-Nishina sin correcciones no introduce errores en las simulaciones.

4. Se comprobó que las predicciones de la dosis de energía absorbida en agua están en muy buen acuerdo con EGS4. Teniendo en cuenta este hecho se realizó una simulación como aplicación del algoritmo al campo de la física médica: un haz de fotones de 1,0 MeV incidiendo sobre un cilindro de agua. Este tipo de simulaciones es importante, porque para estudiar el efecto de la radiación sobre el tejido humano frecuentemente se sustituye el tejido por agua.

RECOMENDACIONES

1. Se han comparado los resultados de este algoritmo implementado con los de EGS4 encontrándose que, sistemáticamente las distribuciones angulares y energéticas de los fotones que emergen de la lámina (particularmente los retrodispersados), así como la intensidad del fotopico muestran valores inferiores que los obtenidos con EGS4. Esto se debe a que el tratamiento del efecto fotoeléctrico es muy sensible a la aproximación utilizada para su descripción. En este caso se utilizó la aproximación de Messel y Crawford que proporciona unas secciones eficaces menores que las exactas del efecto fotoeléctrico.

> Esto hace que haya fotones que en EGS4 son absorbidos, mientras que en el algoritmo aquí trabajado algoritmo no lo son. Estas discrepancias son sólo significativas para materiales pesados, en los que el efecto fotoeléctrico es más importante. No obstante la solución a este problema sólo requiere una pequeña modificación en el algoritmo presentado en este trabajo, que consiste en crear un fichero con las secciones eficaces fotoeléctricas del átomo de interés que se encuentran tabuladas en la literatura, que son las que se usarían en lugar de las secciones eficaces de Messel y Crawford.

2. Se concluye que, en general el algoritmo da muy buenos resultados para materiales ligeros en los que el efecto fotoeléctrico no tiene una importancia primordial. Y es importante recordar que se está trabajando sobre materiales homogéneos, por lo que no se está comentando nada sobre interferentes como el poder de frenado, ni las posibles perturbaciones del medio irradiado, producidos por la cavidad, temas que son de uso común en dosimetría clínica y física.

- 3. Con todo lo presentado en este trabajo, es de aclarar que el algoritmo aquí propuesto no es un algoritmo para uso profesional, ya que hay muchas otras variables de interés que tendrían que involucrarse como se comentó en el párrafo anterior, sin embargo el valor significativo del mismo, no está en la calidad de los resultados, ya que ni incluso ni la comparación de resultados entre los algoritmos profesionales desarrollados por instituciones dedicadas estrictamente a las investigaciones con simulaciones con Monte Carlo pueden tener resultados parecidos, y aún más es de mencionar que los algoritmos profesionales han llevado años de perfeccionamiento y pruebas, y la mayoría siguen generando actualizaciones para los códigos liberados al mercado.
- 4. Con este trabajo se tiene una intención implícita, la cual consiste en sentar un precedente para futuros estudiantes de cualquier carrera a realizar simulaciones de cualquier fenómeno estocástico utilizando métodos de Monte Carlo.

Simulación de un haz de radiación



Fuente: Radiofisica Hospitalaria. http://radiofisicainfo.wordpress.com/. Consulta: 13 de septiembre de 2014.

BIBLIOGRAFÍA

- BROSED S., Antonio; Millán C. Esther. Fundamentos de física médica. España: SEFM. 2013, 392 p. Vol. 1.
- CROMER, D. T. Compton scattering factors for a spherical free atoms, J. Chem. USA. EdPhys. 1969, 232 p.
- W. Garson. Determinación de la dosis absorbida en radioterapia con haces externos. España. Colección de informes técnicos No 398. IAEA. 2005, 105 p.
- 4. E. B Podgorsak. Radiation Oncology Physucs: A Handbook fot Teachers and Students. USA. IAEA. 2011, 859 p.
- E. Storm; H. I. Israel. Photon cross sections from 1 KeV to 100 MeV for elements Z=1 to Z=100, Nuclear Data Tables. USA. AcademicPress, 1970, 152 p.
- FRANCESC, Salvat; et. al. PENELOPE: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport. Canada. Sertif. 2003, 672 p.
- 7. GLENN F., Knoll. *Radiation Detection and Measurement.* USA. Harmon Press. 1979, 185p.

- J. R., Cunningham. *The Physics of Radiology*. USA. Thomas Press. 1983, 153 p.
- H. Messel; D. F., Crawford. *Electron-photon shower distribution function tables for Lead, Copper and Air absorbers*. USA Pergamon. 1970, 96 p.
- Jeremy, H. MATLAB, edición de estudiante. Guía de usuario. México.
 Prentice Hall. 1996, 344 p.
- 11. W. R. Leo. *Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments*. USA. Springer. 1987, 75 p.
- 12. William R., H. Rogers. *The EGS4 code system, Stanford Linear* Accelerator Center Report. USA. Springer. 1985, 256 p.
- 13. W. Williamson, Jr.; G. C., Duncan. *Monte Carlo simulation of non relativistic electron scattering*, USA. Phys. 1986, 262 p.