



UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE LA MIXTECA

**DESARROLLO DE UN CÓDIGO PARA EL TRANSPORTE DE ELECTRONES  
EN AGUA POR LA TÉCNICA DEL *EVENTO-POR-EVENTO* UTILIZANDO EL  
MÉTODO MONTE CARLO**

TESIS  
PARA OBTENER EL TÍTULO DE:  
INGENIERO EN FÍSICA APLICADA

PRESENTA:  
JONATHAN SAID UNDA LÓPEZ

DIRECTOR:  
DR. RICARDO ROSAS RODRÍGUEZ

CO-DIRECTOR:  
DR. EUGENIO TORRES GARCÍA

NOVIEMBRE DE 2024



*Este trabajo es dedicado con mucho amor y respeto  
para Raquel González, Rafael Unda y Carlos  
Chávez Martínez, familiares que llevo  
profundamente en mi alma.*

# Agradecimientos

A mis padres Claudia y Jesús, por su constante apoyo en toda mi trayectoria académica, agradezco el tiempo y esfuerzo que me brindaron, nunca dejaron de creer en mí incluso en los momentos de más incertidumbre en mi vida, por los consejos y las buenas acciones que me enseñaron hasta ser la persona que soy, estaré eternamente agradecido.

A mi hermano Jorge, con quien compartí los momentos de mayor felicidad, le agradezco por estar siempre a mi lado, por su gran esfuerzo y trabajo para apoyar a toda la familia.

A mi tía Blanca, una de las personas fundamentales en mi trayectoria universitaria, le agradezco su apoyo incondicional no sólo en la parte económica, si no también en la moral, le agradezco por su palabras de aliento para ser mejor cada día y nunca dejar de creer en mí.

A mi abuela María, le agradezco sus bendiciones y buenos deseos que me brindó, quien siempre rezó por mí para estar siempre de la mano de Dios.

A los jefes de carrera el Dr. Rafael Martínez y el Dr. Maxwell Jiménez, les agradezco por brindarme la beca de alimentos durante 4 semestres, la cual fue un apoyo económico importante en mi carrera y del cual estaré eternamente agradecido.

A mis amigos y compañeros de carrera, con quienes pasé los momentos más agradables y complicados en la carrera, le agradezco su apoyo y compañía que compartimos.

A mi director de tesis externo, el Dr. Eugenio Torres, por brindarme la oportunidad de trabajar en este campo de la física, por su tiempo y disposición para poder culminar de forma exitosa este trabajo.

A mi director director de tesis, el Dr. Ricardo Rosas, le agradezco por permitirme trabajar con él además de su tiempo y dedicación en la revisión del contenido del trabajo.

A mis sinodales, el Dr. Iván Corrales, Dr. Hugo Sánchez y Dr. Mario Lomelí, agradezco su interés en la revisión de este trabajo de tesis a través de sus comentarios y observaciones.

Agradezco a todos los seres en general que me apoyaron en esta etapa de mi vida, a todas las personas que me compartieron sus consejos y motivación para culminar la carrera, es aquí donde les doy mis más sinceros agradecimientos.

# Resumen

En el presente trabajo de tesis se desarrolló un código en el lenguaje de programación C++ a partir del método de Monte Carlo, que simula explícitamente la interacción de electrones energéticos en un medio acuoso cuyas energías pueden estar entre 1 keV y 3 MeV utilizando como algoritmo de simulación la técnica denominada *evento-por-evento*. El código tiene el objetivo de calcular la energía que es depositada en el agua por un número de electrones primarios y energía ingresadas por el usuario, así como el radio de puntuación. En el rango de energía establecido los eventos de interacción considerados en este trabajo son colisiones tipo elásticas, inelásticas (ionizaciones y excitaciones) y radiativos sobre la base de la aproximación de Born de primer orden (onda plana). La sección transversal de interacción elástica se modeló mediante la fórmula de Rutherford modificada que tiene en cuenta el factor de apantallamiento por los electrones orbitales. Las secciones transversales de dispersión inelástica están representadas por una formulación semiteórica formulada por Bethe bajo la aproximación de Born de primer orden y teorías de encuentro binario; mientras que la base de datos de la sección transversal de dispersión radiativa fueron recopilados de la literatura. La interacción inelástica de los electrones con el agua esta modelada mediante la respuesta dieléctrica que considera cinco niveles de ionización y cinco niveles de excitación electrónica de la molécula de agua. Para la determinación de las variables de interés (energía y ángulo de dispersión) se aplicaron técnicas de muestreo Monte Carlo a las funciones de distribución de probabilidad para la generación de números aleatorios que caracterizan la interacción estocástica del electrón con el medio. El código desarrollado, llamado "MCET\_mx", al seguir la historia de todos los electrones primarios y secundarios, también registra las coordenadas espaciales de todos los eventos de colisión elástica, inelástica y radiativa. La validación de los resultados de la energía depositada en el agua en diferentes radios generados por los electrones se examina frente a los resultados disponibles por códigos de simulación Monte Carlo que utilizan tanto la técnica del *evento-por-evento* como la técnica de las historias condensadas, determinando una validación bastante aceptable en comparación con los resultados de otros códigos.

# Abstract

In the present thesis work, a code was developed in the C++ programming language from the Monte Carlo method, which explicitly simulates the interaction of energetic electrons in an aqueous medium whose energies can be between 1 keV and 3 MeV using as an algorithm simulation the technique called *event-by-event*. The code has the objective of calculating the energy that is deposited in the water by a number of primary electrons and energy entered by the user, as well as the scoring radius. In the established energy range, the interaction events considered in this work are elastic, inelastic (ionizations and excitations) and radiative collisions based on the first-order Born approximation (plane wave). The elastic interaction cross section was modeled using the modified Rutherford formula that takes into account the screening factor by the orbital electrons. The inelastic scattering cross sections are represented by a semi-theoretical formulation formulated by Bethe under the first-order Born approximation and binary encounter theories; while the radiative scattering cross section database were collected from the literature. The inelastic interaction of electrons with water is modeled by means of the dielectric response that considers five levels of ionization and five levels of electronic excitation of the water molecule. To determine the variables of interest (energy and dispersion angle), Monte Carlo sampling techniques were applied to the probability distribution functions for the generation of random numbers that characterize the stochastic interaction of the electron with the medium. The developed code called “MCET\_mx”, by tracking the history of all primary and secondary electrons also records the spatial coordinates of all elastic, inelastic and radiative collision events. Validation of the results of the energy deposited in water at different radii generated by the electrons is examined against the available results using Monte Carlo simulation codes using both the event-by-event technique and the condensed history technique, determining a quite acceptable validation compared to the results of other codes.

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Planteamiento del problema . . . . .	2
1.2. Justificación . . . . .	3
1.3. Hipótesis . . . . .	3
1.4. Objetivos . . . . .	3
1.5. Metas . . . . .	3
<b>2. Marco Teórico</b>	<b>5</b>
2.1. Radiaciones Ionizantes . . . . .	5
2.1.1. Antecedentes históricos de uso de las radiaciones ionizantes y su implementación en tratamientos clínicos . . . . .	5
2.1.2. Tipos de radiaciones ionizantes . . . . .	8
2.2. Cantidades Microdosimétricas . . . . .	13
2.3. Descripción microscópica de la interacción de electrones energéticos con la materia	18
2.3.1. Aspectos generales . . . . .	18
2.3.2. La aproximación de Born . . . . .	20
2.3.3. Concepto de sección transversal . . . . .	22
2.3.4. Tipos de interacción de electrones con el medio . . . . .	23
2.3.5. Transferencia de energía y momento por un electrón a un objetivo . . . . .	26
2.3.6. Sección transversal de Rutherford de dispersión elástica . . . . .	29
2.3.7. Tratamiento de interacciones inelásticas de electrones en medios de fase condensada . . . . .	31
2.3.8. Fuerza de Oscilador Generalizada (GOS) . . . . .	32
2.3.9. Sección transversal de dispersión inelástica distante y cercana . . . . .	35
2.3.10. Sección transversal de dispersión radiativa . . . . .	37
2.4. Propiedades fisicoquímicas del agua . . . . .	37
2.4.1. Equivalencia radiológica agua-tejido . . . . .	40
2.4.2. Respuesta dieléctrica del agua . . . . .	43
2.4.3. Efectos producidos por la interacción de la radiación ionizante en agua (radiólisis) . . . . .	46
2.4.4. Aplicaciones médicas . . . . .	51
2.5. El método de Monte Carlo (MC) en la física de la radiación . . . . .	53
2.5.1. Introducción . . . . .	53
2.5.2. El método MC como alternativa a la ecuación de transporte . . . . .	54
2.5.3. El método MC aplicado al transporte de radiación . . . . .	57
2.5.4. Algoritmos de simulación MC . . . . .	59
2.5.4.1. Técnica de historia condensada . . . . .	62
2.5.4.2. Técnica del <i>evento-por-evento</i> . . . . .	64
2.5.5. Códigos de simulación MC . . . . .	67
<b>3. Metodología</b>	<b>75</b>

3.1. Supuestos . . . . .	75
3.2. Simulación de eventos de interacción . . . . .	76
3.3. Generación de trayectorias aleatorias . . . . .	81
3.4. Descripción de la programación del código MCET_mx . . . . .	83
<b>4. Resultados</b>	<b>87</b>
4.1. Generación de números aleatorios . . . . .	87
4.2. Validación de números aleatorios generados . . . . .	89
4.3. Energía depositada por electrones de 1, 2 y 3 MeV . . . . .	90
4.4. Análisis de la energía depositada por electrones de 1, 2 y 3 MeV . . . . .	96
4.5. Interacciones registradas por el código MCET_mx . . . . .	98
4.6. Análisis de las interacciones simuladas por electrones de 1, 2 y 3 MeV . . . . .	99
4.7. Errores estadísticos y sistemáticos . . . . .	99
<b>Conclusiones</b>	<b>101</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>103</b>

# Índice de figuras

2.1. Diagrama esquemático de la trayectoria de una partícula cargada interactuando en puntos de transferencia (●) y sus correspondientes transferencias de energía. . .	15
2.2. Representación esquemática de la trayectoria de una partícula incidente en un medio. . .	23
2.3. Tres tipos de interacción de electrones con un átomo, dependiendo del tamaño relativo del parámetro de impacto $b$ y el radio atómico $a$ . Colisión fuerte para $b \sim a$ ; colisión suave $b \gg a$ y colisión radiativa para $b \ll a$ . . . . .	24
2.4. Cinemática de la interacción entre dos electrones. . . . .	27
2.5. Geometría de interacción donde la función de onda de la partícula incide a lo largo del eje $z$ . . . . .	29
2.6. Superficie de Bethe: Representación de la pérdida de energía en función del momento y energía transferida. . . . .	45
2.7. Diagrama esquemático de las etapas física, intermedia y química de la radiólisis del agua. . . . .	49
2.8. Estructura y componentes principales del ADN. . . . .	50
2.9. Curva de dosis-profundidad de un haz de electrones en agua que ilustra los parámetros característicos importantes. Dependiendo del tratamiento, se considera que el rango terapéutico es el 90 % distal (R90) o el 85 % distal (R85). . . . .	52
2.10. Comparación esquemática entre el algoritmo de historia condensada y el algoritmo analógico. . . . .	65
3.1. Diagrama secuencial del algoritmo utilizado para el transporte de electrones. . .	84
4.1. Energía depositada por electrones de 1 MeV en función de la distancia radial. . .	92
4.2. Resultados obtenidos de dosis absorbida en agua por electrones de 1 MeV en función de la distancia radial. . . . .	92
4.3. Energía depositada por electrones de 2 MeV en función de la distancia radial. . .	93
4.4. Resultados obtenidos de dosis absorbida en agua por electrones de 2 MeV en función de la distancia radial. . . . .	94
4.5. Curva de energía depositada por electrones de 3 MeV en función de la distancia radial. . . . .	95
4.6. Distribución de la dosis absorbida en agua por electrones de 3 MeV en función de la distancia radial. . . . .	96
4.7. Distribución radial de la energía depositada en esferas de agua por electrones de 1, 2 y 3 MeV. . . . .	97
4.8. Distribución radial de la dosis absorbida en agua por electrones de 1, 2 y 3 MeV. . .	98
4.9. Gráfico bidimensional de la trayectoria de un electrón de 3 MeV en agua. El punto de emisión está en $(x = 0, y = 0, z = 0)$ y la dirección inicial es en dirección $z$ . Para propósitos ilustrativos aquí se muestran los electrones secundarios generados con energías mayores a 100 KeV durante la trayectoria del electrón primario. . .	99

# Índice de tablas

2.1. Parámetros de la respuesta dieléctrica del agua. . . . .	44
4.1. Determinación de los parámetros estadísticos utilizados para la prueba de chi cuadrada. . . . .	90
4.2. Energía media depositada en esferas de agua de diferentes radios por electrones de 1 MeV. . . . .	91
4.3. Dosis media absorbida en esferas de agua de diferentes radios por electrones de 1 MeV. . . . .	91
4.4. Energía media depositada en esferas de agua de diferentes radios por electrones de 2 MeV. . . . .	93
4.5. Dosis media absorbida en esferas de agua de diferentes radios por electrones de 2 MeV. . . . .	93
4.6. Energía media depositada en esferas de agua de diferentes radios por electrones de 3 MeV. . . . .	94
4.7. Dosis media absorbida en esferas de agua de diferentes radios por electrones de 3 MeV. . . . .	95
4.8. Número y tipo de interacciones promedio registradas en el código MCET_mx por $2 \times 10^4$ electrones primarios simulados para cada energía. . . . .	98

# Capítulo 1

## Introducción

La Física Médica es una rama de la física que tiene como objetivo la aplicación de conceptos físicos en el campo de la medicina. Esta rama se ocupa principalmente, aunque no exclusivamente, del uso de las radiaciones ionizantes en la prevención, diagnóstico y tratamiento de enfermedades humanas impulsada principalmente por el desarrollo de técnicas de instrumentación y medición, específicamente en los campos radiológicos relacionados con el aseguramiento de la calidad y optimización de aplicaciones con radiación, el modelado y la simulación. La especialidad de la física médica cubre diversas áreas de la medicina como son la física radiológica, la física de la medicina nuclear, la física de la salud y la física de la radioterapia. Esta última, también conocida como terapia de radiación es la ciencia que estudia la interacción y efectos que tiene cierto tipo de radiación ionizante con la materia, particularmente en cuantificar la cantidad de energía que es depositada en el medio (dosimetría de radiación), ya sea por radiación ionizante directa (partículas cargadas) o radiación ionizante indirecta (partículas neutras). El objetivo principal de la radioterapia es dañar o destruir las células cancerosas provocando roturas de hebras en moléculas genéticas llamadas ácido desoxirribonucleico (ADN) en el núcleo de las células vivas, las cuales son responsables de controlar el crecimiento y división de las células; mientras se minimiza el daño a las células sanas circundantes mediante la administración de una dosis controlada y optima de radiación a la zona del cuerpo que contiene el tumor [1].

Para conocer con cierta precisión la dosis administradas en una región en específico, los científicos han desarrollado objetos tanto físicos como computacionales llamados maniqués modelados a base de materiales o propiedades que imiten a la de los tejidos u órganos del cuerpo humano. Estos objetos deben absorber y dispersar la radiación del mismo modo que el tejido real, es decir, es necesario que estos maniqués tengan características “radiológicas” similares a la de los tejidos. Uno de los primeros materiales utilizados como sustitutos equivalentes de los tejidos biológicos fue el agua, debido a la proporción con la que el cuerpo humano está compuesto. Aunque los tejidos biológicos tienen diferentes densidades y composiciones que el agua, los físicos médicos han encontrado que, en términos de la interacción de la radiación, el agua es un material de referencia adecuado. La dosis absorbida en agua es un parámetro crítico para garantizar un tratamiento efectivo y seguro en radioterapia, además para optimizar los procedimientos de diagnóstico por imagen en radiología [2].

La implementación de las simulaciones Monte Carlo en la dosimetría de radiación ha sido una de las contribuciones a la física médica más importantes en los últimos años. Esta herramienta permite la determinación de las distribuciones de dosis resultantes de la penetración de radiaciones ionizantes en el tejido. En una simulación Monte Carlo del transporte de radiación, la historia (trayectoria) de una partícula es vista como una secuencia aleatoria de vuelos libres que terminan con un evento de interacción donde la partícula cambia su dirección de movimiento, pierde energía y, ocasionalmente, produce partículas secundarias [3]. El algoritmo utilizado en el código

de simulación depende de los requisitos específicos de la simulación. En algunos casos, el método de *historia condensada* es suficiente para obtener resultados razonablemente precisos y al mismo tiempo ahorrar recursos computacionales. En otros casos, particularmente cuando el modelo de interacciones individuales es crítico, se prefiere un método detallado a pesar de su mayor costo computacional [4].

En la actualidad, los algoritmos para el cálculo de la distribución de dosis en el paciente irradiado (planificación del tratamiento) son un componente importante de la radioterapia y han evolucionado hasta tal punto de utilizar una distribución de dosis basada en un algoritmo Monte Carlo específico como un método más preciso para predecir la distribución de dosis en cada tipo de paciente [1]. Más que nunca es necesario determinar la transferencia de energía en una variedad de medios cuando son irradiados por cualquiera de una amplia gama de cuantos de energía o por cualquier tipo de radiación ionizante y con el rápido aumento actual de la potencia informática se puede esperar que en un futuro próximo la planificación rutinaria del tratamiento de radioterapia se lleve a cabo con motores de cálculo de dosis basados en el método de Monte Carlo [5].

## 1.1. Planteamiento del problema

Una de las principales fuentes de radiación utilizadas en las practicas radioterapéuticas son los electrones energéticos. Debido a su naturaleza éstos experimentan múltiples interacciones y desviaciones angulares significativas que pueden afectar otras regiones cercanas al objetivo. La planificación, verificación y control de calidad del tratamiento no puede ser evaluada en los pacientes debido al riesgo que esto conlleva, es por ello que, los científicos desarrollaron objetos físicos y computacionales llamados maniqués los cuales imitan las propiedades radiológicas del tejido humano, permitiendo que los médicos evalúen y ajusten los tratamientos sin exponer a los pacientes a riesgos innecesarios. Uno de los primeros materiales utilizados como sustitutos fue el agua debido al porcentaje con el está compuesto el cuerpo humano y hasta la fecha sigue siendo un material muy utilizado en la realización de simulaciones previas al tratamiento, lo que ayuda a los médicos y físicos médicos a planificar de manera más precisa la administración de la dosis de radiación [6].

El estudio del transporte de radiación inicialmente se atacó a través de la ecuación de transporte de Boltzmann. Sin embargo, este procedimiento se encuentra con grandes dificultades cuando se aplica a geometrías complejas. Por lo que, para superar esta problemática, a finales de la década de 1950 con la disponibilidad de las computadoras el desarrollo de los métodos de simulación Monte Carlo, resultaron ser una poderosa y útil alternativa para afrontar este tipo de problemas [3]. Los códigos Monte Carlo actualmente disponibles que simulan las interacciones de la radiación con el medio utilizan principalmente dos tipos de algoritmos. El primero de ellos (y el más utilizado) denominado técnica de historia condensada, consiste dividir en dos tipos de clases las interacciones que sufren las partículas proyectadas durante su trayectoria dependiendo de la pérdida de energía y efectos que éstos producen en el medio, a partir de aproximaciones y teorías de dispersión múltiple; sin embargo, estas aproximaciones están ligadas a errores e incertidumbres significativas, además de no ser eficientes a niveles micrométricos [7]. Por otro lado, el algoritmo del *evento-por-evento* (el cual es más preciso que el anterior), simula cada interacción de las partículas de radiación de forma más detallada. Estas simulaciones proporcionan resultados más confiables y permiten realizar múltiples análisis de correlación, aunque, están muy limitados en su rango de energía, además de ser muy tardados y costosos computacionalmente [7].

Por lo expuesto anteriormente, surge la necesidad de desarrollar un código Monte Carlo que realice el transporte de electrones de forma detallada y precisa en un rango de energía que cubra

la energía máxima de emisión del mayor número de radionúclidos empleados en la práctica clínica y los electrones rápidos producidos por la energía promedio de un haz de rayos de 6 MeV, lo cual permitirá realizar cálculos dosimétricos a nivel celular y subcelular con una buena exactitud.

## 1.2. Justificación

En la actualidad existen algunos códigos Monte Carlo que simulan el transporte de electrones como MCNPX, PENELOPE, GEANT4, etc. [3]; estos códigos aproximan el transporte a la técnica del *evento-por-evento*. Sin embargo, hasta el momento, se tiene registrado que solo existe un código especializado en el transporte de electrones en agua de forma detallada; este código se llama NOREC, pero está limitado a realizar el transporte de electrones en un rango de 7.4 eV a 1 MeV, y en la práctica clínica son requeridos intervalos de energía más amplios para poder así, reducir la dosis depositada en los tejidos sanos debido a los efectos de dispersión, y por ende aumentar la eficiencia del tratamiento [8]. Por esta razón, en el presente trabajo de tesis, se desarrolló un código de simulación Monte Carlo que realiza el transporte de electrones en agua con la técnica del *evento-por-evento* en un intervalo de energía de 1 keV hasta 3 MeV, en donde se pueda establecer una cierta optimización entre el tiempo de cómputo y la precisión en la energía depositada en el volumen de agua.

## 1.3. Hipótesis

Con base al método de Monte Carlo, es posible desarrollar un código que simule el transporte de electrones con la técnica del *evento-por-evento* de 1 keV a 3 MeV que contemple el transporte a través de agua de electrones primarios y secundarios.

## 1.4. Objetivos

### Objetivo General

Desarrollar un código en C++ que simule el transporte de electrones de 1 a 3000 keV en agua mediante la técnica del *evento por evento*.

### Objetivos Específicos

- Dominar el lenguaje C++ y el método Monte Carlo.
- Aplicar el método Monte Carlo y la física necesaria para programar el transporte de electrones utilizando como algoritmo base la técnica del evento-por-evento.
- Implementar un diagrama de flujo que relacione todos los posible eventos en el transporte de electrones a través del agua.
- Traducir el algoritmo utilizado al lenguaje de programación.
- Evaluar los resultados de energía depositada en agua obtenidos por el código desarrollado con otros códigos en la literatura, principalmente con el código NOREC.

## 1.5. Metas

- Identificar el tipo de sistema y sus componentes que lo conforman.
- Entender el método MC y su relación con el transporte partículas.

- Realizar códigos en el lenguaje C++ que requieran el uso del método MC.
- Relacionar todas las variables involucradas en el transporte de electrones.
- Realizar un modelo matemático que describa las propiedades e interacciones del sistema.
- Establecer un algoritmo computacional que describa de manera óptima el transporte de electrones a partir de la técnica del evento-por-evento.
- Revisar y consultar bibliografías disponibles que ya hayan programado tal fenómeno.
- Comparar las funciones y técnicas de programación utilizadas en la literatura con la desarrollada.

# Capítulo 2

## Marco Teórico

### 2.1. Radiaciones Ionizantes

#### 2.1.1. Antecedentes históricos de uso de las radiaciones ionizantes y su implementación en tratamientos clínicos

El estudio y uso de las radiaciones ionizantes tuvo sus orígenes con tres descubrimientos trascendentales: los rayos X de Wilhelm Röntgen en 1895, la radiactividad natural de Henri Becquerel en 1896 y el descubrimiento del radio de Pierre Curie y Marie Curie-Skłodowska en 1898. Desde entonces, las radiaciones ionizantes han desempeñado un papel importante en la física atómica y nuclear, las cuales marcaron el inicio de la era de la mecánica cuántica, impulsó el desarrollo de la radiología y la radioterapia como especialidades médica y de la física médica como especialidad en el campo de la física. También resultó útil en diversas áreas de interés humano, como en la industria, la generación de energía, la gestión de residuos y servicios de seguridad [1]. El beneficio potencial del uso de rayos X en medicina para la obtención de imágenes y el tratamiento del cáncer se reconoció pocas semanas después del descubrimiento de los rayos X por parte de Röntgen. Gracias a ello, la radiología y la radioterapia evolucionaron rápidamente y ambas dependieron en gran medida de los físicos para el uso rutinario de la radiación y para el desarrollo de nuevas técnicas y equipos.

Los primeros avances tecnológicos en el uso médico de la radiación ionizante estaban relacionados con las mejoras en la emisión eficiente del haz de rayos X<sup>1</sup>, el desarrollo de técnicas de imágenes analógicas; la optimización de la calidad de la imagen con minimización simultánea de la dosis administrada; y un aumento de las energías del haz para radioterapia. Desde entonces, los científicos e ingenieros inventaron y desarrollaron aplicaciones beneficiosas de la radiación aprovechando el poder penetrante y dañino de la radiación. Los rayos X utilizados para diagnosticar enfermedades mediante la obtención de imágenes en los sitios a tratar y el uso de rayos X y electrones utilizados por oncólogos radioterapeutas para curar ciertos tipos de cáncer y tumores son las aplicaciones más notables de las radiaciones ionizantes en el campo de la medicina [9].

Los electrones de alta energía se utilizaron por primera vez en radioterapia poco después de la extracción exitosa del haz de un betatrón en 1947. A principios de la década de 1950, algunas instituciones que utilizaban betatrones comerciales o aceleradores lineales únicos trataban a los pacientes de forma rutinaria. Esta modalidad permaneció confinada a unos pocos centros importantes hasta la década de 1970, cuando, con el desarrollo comercial de aceleradores lineales con energía adecuada, muchas otras instituciones comenzaron a utilizar electrones para radioterapia. Se habían establecido la física básica y la dosimetría de los electrones de alta energía para su uso clínico inicial. Con su uso cada vez mayor, se han desarrollado mucho más los detalles

---

<sup>1</sup>Flujo de partículas subatómicas que se mueven juntas en una dirección y energía específica.

de su dosimetría clínica, que estaban algo retrasados con respecto a los avances correspondientes para los rayos X de alta energía. La Comisión Internacional sobre Unidades y Medidas de Radiación (ICRU) publicó un informe exhaustivo y detallado (1984) sobre esencialmente todos los aspectos de la dosimetría por haz de electrones, incluidos valores actualizados de datos dosimétricos básicos como los poderes de frenado y dispersión. Ese documento es una excelente referencia para el estudio detallado de la dosimetría por haz de electrones, pero no es tan práctico para uso clínico [10].

A pesar de que el uso de las radiaciones ionizantes para el tratamiento de enfermedades humanas resultaba bastante útil, un uso descuidado podría tener efectos nocivos en la salud de los pacientes. Esto implicó que los físicos y médicos evaluaran cuidadosamente la distribución de la energía que era depositada en el tejido humano. Si no se comprenden bien los posibles daños por radiación, se deben evitar los usos clínicos de nuevas fuentes de radiación sin antes una evaluación cuidadosa y exhaustiva. Es por ello que, los científicos tuvieron la necesidad de desarrollar cuerpos u órganos humanos simulados, llamados maniqués, para evaluar y estimar la energía que es absorbida por una fuente de radiación, así como la atenuación que esta sufría en el cuerpo humano. Uno de los primeros materiales utilizados fue el agua en su estado gaseoso y líquido. Fue el primer material que Kienbock utilizó como sustituto de los tejidos en las mediciones de radiación. Baumeister introdujo la cera en 1923. La primera formulación sólida, llamada cera de Siemens, compuesta de cera de parafina y óxido de magnesio como filtro corrector, fue reportada por Ott en 1937. Posteriormente se introdujeron varios productos similares a base de cera en Europa y América del Norte, incluidos MixD, Harris Wax y M3. A partir de estos últimos materiales se han construido muchos maniqués compuestos por simples láminas apiladas o estructuras más complejas parecidas a los cuerpos [9].

La simulación de tejidos comenzó a principios del siglo pasado, cuando los rayos X recién descubiertos se investigaban intensamente tanto en Europa como en Estados Unidos. La edición de junio de "Archives of the Roenten Ray" de 1906 contiene un informe del radiólogo vienés Profesor Kienbock quien establece que "una lámina de aluminio de 1 mm de espesor equivale en poder de absorción a una capa de agua o músculo, de 1 cm de espesor". Las ideas inherentes al trabajo de Kienbock fueron pulidas en 1913 por un radiólogo, matemático y político suizo, Franz T. Christén. Christén afirmó en su libro "Messung und Dosierung der Roentgenstrahle" que la calidad del haz de rayos X debe especificarse en términos de atenuación del agua, ya que el agua produce resultados similares en los tejidos blandos. También introdujo un sustituto sólido del agua en forma de baquelita, que se decía que tenía exactamente la misma opacidad roentgen que el agua [11].

De los sustitutos de tejido introducidos antes de 1970, sólo unos pocos tenían características de absorción y dispersión de radiación dentro del 5% de las de los tejidos reales correspondientes en un rango de energía extendido, y estos incluían la mayoría de los maniqués antes mencionados. El más importante de ellos era el agua. Afortunadamente, estaba disponible y era barato. En 1970 se inició un extenso programa de investigación y desarrollo en el Hospital St. Bartholomew de Londres. Se formularon más de 160 sustitutos de tejidos, que simulaban una amplia gama de tejidos corporales. Se produjeron sistemas líquidos, en gel y sólidos para su uso con radiaciones de fotones y partículas. Otros grupos también desarrollaron materiales equivalentes al tejido. Herman et al. utilizaron polietileno para desarrollar material equivalente al agua, así como materiales de grasa y músculo en la década de 1980. Homolka et al. utilizaron polvos de polímero junto con aditivos adecuados para ajustar la atenuación de los fotones. Crearon materiales equivalentes al tejido adiposo, músculo, hueso y agua, que simulan las características radiológicas de los tejidos para fotones de baja energía, es decir, energía menores 100 keV para rayos X de diagnóstico. Uno de los trabajos más recientes incluye el desarrollo de materiales equivalentes a

tejidos para radiología pediátrica por parte de Bloch et al. Burmeister et al., desarrollaron un plástico conductor equivalente al tejido cerebral para aplicaciones de neutrones de baja energía [9].

En el desarrollo de tejidos sustitutos se pueden apreciar dos fases importantes. En la primera fase (anterior a 1940), parece desarrollarse una conciencia general de los problemas involucrados con la mayoría de los estudios experimentales que utilizan agua o cera. Al final de este período, se desarrolla un enfoque más analítico y se introducen las propiedades del concepto. Durante la segunda fase, que continúa hasta la actualidad, se derivan muchas mezclas de sólidos y líquidos como sustitutos de tejidos biológicos y otros medios. Esta fase se caracteriza por la mejora gradual de los materiales fabricados y el uso de números atómicos efectivos que la mayoría de los autores emplean en sus procedimientos de formulación [11].

De 1949 hasta la actualidad, se han introducido varios sustitutos que, como mucho antes lo hicieron el agua y la cera, influyeron fuertemente en la dosimetría experimental. Maniqués más sofisticados hechos a partir de mezclas, compuestos, polímeros y ciertos plásticos conductores hicieron posible el avance tecnológico para estudios experimentales con la radiación ionizante. El tipo de material sustituto y su forma son dictadas por las necesidades de los físicos y médicos hospitalarios para una mejor estimación de la cantidad de dosis que debe ser administrada en cada paciente durante su tratamiento [11].

Por otra parte, durante las últimas dos décadas, la mayoría de los avances en medicina radiológica estuvieron relacionados con la integración de computadoras en las imágenes, el desarrollo de técnicas digitales de diagnóstico por imágenes y la incorporación de computadoras en la administración de dosis terapéuticas con aceleradores lineales de alta energía (linacs). La dosimetría de la radiación y la planificación del tratamiento también han experimentado enormes avances en los últimos años: desde el desarrollo de nuevas técnicas de dosimetría absoluta y relativa hasta una mejor comprensión teórica de las interacciones básicas de la radiación con los tejidos humanos y la introducción de técnicas Monte Carlo en la determinación de las distribuciones de dosis resultantes de la penetración de radiación ionizante en el tejido [1].

El método Monte Carlo aplicado al cálculo de dosis de radiación es una técnica de integración multidimensional que toma muestras aleatorias de distribuciones de probabilidad que gobiernan el transporte de radiación (por ejemplo, fotones o electrones) a través de la materia. Fue desarrollado durante la investigación sobre la difusión de neutrones para el desarrollo de la bomba atómica durante la Segunda Guerra Mundial. Esta técnica de cálculo recibió el nombre en clave Montecarlo de la ciudad de Mónaco famosa por los juegos de azar, que también se basa en eventos aleatorios [12]. El método MC lleva más de 50 años de desarrollo y los métodos de transporte de neutrones-gamma han alcanzado un estado de madurez razonable. A pesar de que su objeto de desarrollo fue el diseño de armas, es una maravillosa ironía que los resultados del método Monte Carlo nunca se hayan utilizado en un conflicto. Más bien, los científicos han explotado los métodos de Monte Carlo para obtener beneficios públicos positivos en la salud y sectores relacionados. Por ejemplo, la planificación de dosis de radioterapia moderna depende hasta cierto punto de los cálculos proporcionados por este método [13].

La simulación Monte Carlo del transporte de electrones y fotones en la materia ha desempeñado un papel destacado en la dosimetría de la radiación y la física de la radioterapia. El trabajo de Martin Berger es considerado el pilar de este campo y su artículo de 1963 sobre el tema en *Methods of Computational Physics* todavía se considera un trabajo fundamental [6]. Posteriormente desde el artículo de Raeside (1976) donde los principios del método de Monte Carlo y sus primeras aplicaciones a la medicina fueron descritos, se desarrollaron varios códigos de simulación Monte

Carlo más conocidos hoy en día por la comunidad científica como ETRAN (Berger y Seltzer 1968), EGS (Ford y Nelson 1978), MCNP (Thompson 1979), o MORSE (Straker et al 1976)[14].

Actualmente, los aceleradores lineales (linacs) son las máquinas de alta tecnología más importantes para la administración de dosis en la radioterapia moderna. Los algoritmos para calcular la distribución de dosis en el paciente irradiado (planificación del tratamiento) son un componente importante de la radioterapia. Evolucionaron durante las últimas décadas desde cálculos que dependían en gran medida de algoritmos analíticos, semianalíticos y empíricos basados en mediciones de dosis en agua hasta la etapa actual, en la que recientemente, se han comercializado sistemas de planificación de tratamiento basados en Monte Carlo específicos para cada paciente; sin embargo, su implementación rutinaria en las clínicas de radioterapia todavía depende de muchos factores, como la modelización adecuada de las fuentes de radiación, resolver varios problemas experimentales que involucran faltas de homogeneidad de tejidos, responder a muchas preguntas clínicas importantes, actualizar los algoritmos de cálculo de dosis, y mejorar el hardware informático. Se espera que en un futuro próximo la incorporación de modelos biológicos predictivos para el control de tumores y las complicaciones del tejido normal en los motores de cálculo de dosis basados en Monte Carlo constituyan el enfoque estándar para la planificación del tratamiento de radioterapia [1].

La creciente disponibilidad de computadoras y redes rápidas en los hospitales, y la existencia de códigos públicos bien documentados y respaldados, seguramente aumentarán el número de aplicaciones y comunicaciones científicas en el futuro. Sin embargo, es importante ser consciente de las limitaciones del método. El método Monte Carlo no es una caja negra mágica que proporciona la respuesta correcta a todo tipo de simulaciones. Debido a la naturaleza del método, existen algunas deficiencias de las técnicas macroscópicas comúnmente utilizadas para el transporte de electrones. Estos sugieren la combinación de técnicas macroscópicas y microscópicas en rangos de energía o geometrías donde cada técnica es más eficiente. Un problema importante se refiere a aproximaciones que sólo son válidas para determinadas aplicaciones, como la desestimación del transporte de electrones, pero que se han implementado en aplicaciones en las que no son válidas, generando resultados erróneos. Es obligatorio realizar pruebas y comparaciones del código Monte Carlo con otros códigos y experimentos bien conocidos; incluso si la simulación real no se puede comparar, siempre es posible seleccionar casos relacionados para los cuales hay resultados disponibles. Desgraciadamente, un porcentaje no despreciable de los códigos existentes no han sido comparados con otros códigos o resultados experimentales y es recomendable ser escéptico ante los resultados del código informático Monte Carlo de cualquier otra persona o institución [14].

### 2.1.2. Tipos de radiaciones ionizantes

La radiación es un fenómeno físico que hace referencia al transporte de energía a través del espacio o en un medio; y puede surgir ya sea de manera natural o por procesos artificiales [15], es decir, la radiación se puede manifestar ya sea por el propio comportamiento o alteración en la estructura interna de los átomos que conforman a la materia.

De acuerdo con el modelo atómico de Bohr (1913), el átomo es considerado como la unidad más pequeña y fundamental de la que puede estar constituida la materia. Los átomos poseen las propiedades físicas y químicas características de los 118 elementos conocidos, 92 de los cuales se presentan de forma natural y los demás se producen artificialmente. La estructura del átomo consta de un núcleo central positivo compuesto por partículas subatómicas fuertemente enlazadas denominadas protones ( $Z$  es el número atómico) y neutrones ( $N$ ), en conjunto denominados nucleones, ( $A$  es el número másico) que se encuentran rodeados por una nube de electrones que se mueven en órbitas alrededor del núcleo [12]. Cada elemento tiene un número atómico

característico, pero éstos pueden tener diferente número másico, es decir, un número diferente de neutrones. Se dice que aquellos átomos que contienen un número diferente de protones y neutrones concentrados en el núcleo atómico son denominados isótopos de un elemento y éstos, dependiendo de su estructura atómica pueden ser estables o inestables. La masa de un átomo se comprende de las masas individuales de todas las partículas elementales que lo forman. Por ejemplo, al sumar las masas de los 6 pares de nucleones y los 6 electrones que contiene un átomo neutro de  $^{12}\text{C}$  se tiene una masa total de 12.09888 uma (una uma se define como  $1/12$  de la masa del átomo en cuestión), sin embargo, por definición la masa es de 12.000 uma. El defecto de masa se puede describir en términos de energía según la expresión de Einstein  $E = mc^2$ , para la equivalencia de masa y energía. Según esta ecuación de equivalencia masa-energía, 1 uma de masa equivale a 931 MeV de energía. La energía equivalente al defecto de masa de un átomo se conoce como energía de enlace del átomo y es la energía necesaria para separar el átomo en sus partes constituyentes. Casi toda la energía de enlace de un átomo está asociada con el núcleo y refleja la influencia de la fuerza nuclear fuerte que une las partículas en el núcleo. Para el  $^{12}\text{C}$ , la energía de enlace promedio por nucleón es  $92.0 \text{ MeV}/12 = 7.67 \text{ MeV/nucleón}$ . Cuando se calcula la energía de enlace promedio por nucleón como el cociente de la energía de enlace del átomo dividida por el número de nucleones, se ignora la pequeña contribución de los electrones a la energía de enlace del átomo [12].

En un átomo neutro, el número de protones en el núcleo está equilibrado por un número igual de electrones que se encuentran presentes en la nube electrónica. Un átomo con un número mayor o menor de electrones que el número de protones se denomina ion negativo o positivo, aunque también estos átomos son conocidos como partículas cargadas pesadas [12].

Cuando existe un equilibrio entre las fuerzas electrostáticas que actúan en el núcleo, o las fuerzas atractivas son mayores que las repulsivas se dice que los núcleos son estables. Muchos de los átomos presentes en la naturaleza son estables; en general, son estos átomos los que constituyen la mayor parte de la materia conocida. En los núcleos estables de átomos más ligeros, el número de neutrones es aproximadamente igual al número de protones, mientras que, para los isótopos estables o menos inestables, la concentración en el número de neutrones es mayor que el número de protones a medida que los átomos son más pesados [12].

En contraste, los átomos que son inestables tienden a sufrir cambios dentro del núcleo para lograr configuraciones más estables de neutrones y protones. Los cambios van acompañados de la emisión de partículas aceleradas y radiación electromagnética (fotones) emitidas desde el núcleo, junto con la liberación de cantidades sustanciales de energía relacionada con un aumento de la energía de enlace de los nucleones en su configuración nuclear final. Estos cambios se denominan desintegración radiactiva del núcleo y es el proceso natural por el cual surge la radiación [12]. Cuando la energía con la que las partículas o fotones son expulsados de los átomos inestables es mayor a un cierto rango de energía, este tipo de radiación se denomina radiación ionizante. Las radiaciones ionizantes se caracterizan por su capacidad para excitar y ionizar átomos o moléculas con los que interactúan. Sabiendo que por debajo de este rango de energía la radiación se denomina radiación no ionizante, a partir de este punto, cuando se utilice el término radiación se referirá a la radiación puramente ionizante. Se ha determinado que la energía necesaria para expulsar un electrón de un átomo en su estado fundamental se encuentra entre el rango de 4 a 25 eV [16] y los efectos que puede tener la radiación con los tejidos biológicos pueden ser nocivos al dañar el material genético (ADN) dentro de las células, debido a los componentes reactantes (iones) que va creando durante su recorrido en el medio.

Como se mencionó anteriormente, la radiación puede manifestarse de dos maneras: en modo de radiaciones corpusculares, que consisten en un conjunto de diferentes tipos de partículas

atómicas o subatómicas, que fluyen y transfieren su energía cinética en cualquier medio con el que interactúen; y en forma de radiaciones electromagnéticas, que surgen a partir de la perturbación y auto propagación de los campos eléctricos y magnéticos, los cuales disipan su energía en una secuencia de mecanismos que afectan la estructura interna de la materia [15].

Las partículas son entidades caracterizadas principalmente por tener una cierta cantidad de masa. En algunos casos es conveniente expresar la masa de las partículas atómicas o subatómicas en términos del peso atómico, es decir,

$$1 \text{ unidad de peso atómico} = \frac{1 \text{ gramo}}{N_A} = 1,66 \times 10^{-24} g, \quad (2.1)$$

siendo  $N_A$  la constante de Avogadro. Mientras que, la carga eléctrica de las partículas se expresa generalmente en términos de la carga del electrón, cuya magnitud es indicada por el símbolo  $e = 1,602176 \times 10^{-19} \text{ C}$ .

Las cargas de las partículas atómicas pueden ser positivas o negativas, pero siempre son múltiplos enteros de la carga de un electrón [15].

Cualquier cambio en la velocidad de las partículas conlleva a un cambio en su energía total interna. El principal mecanismo por el cual la radiación corpuscular transporta su energía ocurre al momento en que se le ha impartido un cierto tipo de fuerza a las partículas. Éstas experimentan una aceleración que, a su vez, proporciona una cierta cantidad de energía que se almacena en forma de energía cinética la cual se va disipando durante su propagación en el medio durante un intervalo de tiempo.

Las radiaciones corpusculares o partículas aceleradas pueden dividirse en tres grandes grupos.

- i) **Partículas cargadas ligeras.** Este grupo hace referencia a partículas subatómicas que tienen una masa relativamente baja y una carga eléctrica de igual magnitud a  $e$ . Las partículas ligeras son constituyentes fundamentales de la materia y desempeñan funciones esenciales en diversos procesos físicos. Una de las partículas más comunes son los electrones.

*Electrones.* Con un peso atómico de  $1/1823$  ( $9,108 \times 10^{-31} \text{ kg}$ ) y una carga eléctrica igual a  $-e$ , los electrones forman parte de las principales partículas que constituyen todo tipo de materia conocida. Existen diferentes procesos por los cuales los electrones adquieran una cierta cantidad de energía cinética y cada tipo de emisión adopta un término diferente [15].

Cuando un radionúclido o radioisótopo, es decir, un átomo conformado por un núcleo inestable trata de llegar a un estado de mayor estabilidad emite radiación espontánea en forma de partículas u ondas electromagnéticas (desintegración radioactiva). Si las partículas liberadas son electrones, entonces este tipo de radiación se conoce como radiación  $\beta$ . Por otra parte, si los electrones son liberados del átomo debido a la interacción con partículas cargadas, entonces este tipo de electrones energéticos son denominados rayos  $\delta$ . Este tipo de radiación “secundaria” a menudo se caracteriza por su menor energía en comparación con la radiación “primaria”, y desempeñan papeles importantes en diversos contextos científicos, como la medicina o la industria [12].

De manera artificial se han realizado estudios clásicos de los electrones cuando emergen del terminal negativo (cátodo) de un circuito eléctrico insertado en un recipiente al vacío el cual forma un haz de rayos catódicos [15]. Otras formas de producción de electrones son los generadores de Van de Graaff que ofrecen intensos haces continuos de electrones de hasta

12 MeV, y los aceleradores lineales (“linacs”), los betatrones y los microtrones ofrecen haces de electrones de energías mucho más altas tal como se encuentran en aplicaciones médicas [16].

En el campo de la física médica, los electrones desempeñan un papel importante debido a su masa relativamente pequeña. Se utilizan directamente en la terapia contra el cáncer y además son responsables de la deposición de dosis en los medios mediante haces de fotones y electrones y gobiernan los aspectos experimentales y teóricos de la dosimetría de la radiación.

- ii) **Partículas cargadas pesadas.** Usualmente se tratan de átomos de cualquier tipo de materia despojados de algunos o todos sus electrones, es decir, convertidos en iones positivos.

*Partículas alpha.* Este tipo de radiación se produce por la desintegración nuclear mediante la emisión de 2 protones y 2 neutrones como una única partícula alfa ( $\alpha$ ) desde el núcleo, es decir, una partícula alfa está compuesta por dos protones y dos neutrones. En términos de su estructura, se asemeja al núcleo de un átomo de helio lo que la hace relativamente grande y pesada en comparación con otras partículas subatómicas, como los electrones.

En la desintegración  $\alpha$ , la energía se libera como energía cinética y siempre es expulsada con la energía característica de la transición nuclear particular [12].

De manera artificial, algunos tipos de partículas cargadas pesadas generalmente se obtiene a partir de la aceleración mediante un campo de fuerza de Coulomb en un ciclotrón, Van de Graaff o un acelerador lineal de partículas pesadas [17]. Los tipos incluyen:

*Protones.* Núcleos despojados de su electrón enlazado del átomo de hidrógeno, contienen un peso atómico de 1.008 y una carga positiva igual a  $+e$ .

*Deuterón.* El núcleo del deuterio consta de un protón y un neutrón unidos por la fuerza nuclear.

En resumen, las partículas pesadas cargadas consisten en núcleos de átomos pesados, ya sea completamente despojados de sus electrones nucleares o, en cualquier caso, con un número de electrones diferente al necesario para producir un átomo neutro.

- iii) **Partículas sin carga.** También conocidas como partículas neutras, son partículas subatómicas que pueden tener una carga neta cero, lo que significa que la carga eléctrica total de estas partículas está equilibrada, con el mismo número de cargas positivas y negativas o pueden ser partículas sin ninguna carga eléctrica. A continuación, se muestran algunos ejemplos de partículas neutras o sin carga:

*Neutrones.* Con un peso atómico de 1.009 y sin carga eléctrica, Los neutrones son un constituyente normal de los núcleos de todo tipo de materia, excepto el isótopo común del hidrógeno [15]. La emisión de neutrones rápidos es obtenida principalmente de reacciones nucleares (fisión nuclear, por ejemplo), de manera que, estas partículas no pueden ser aceleradas electrostáticamente por ellas mismas. La radiación de neutrones tiene altas energías cinéticas, típicamente del orden de miles de electronvoltios (MeV) o más. Estos neutrones se caracterizan por sus velocidades relativamente altas y pueden interactuar con la materia de manera diferente a los neutrones de menor energía. Son más penetrantes y tienen una mayor probabilidad de provocar reacciones nucleares. Estas interacciones pueden resultar en la emisión de neutrones adicionales, radiación gamma u otras partículas secundarias. En radiografía industrial, los neutrones rápidos a veces se utilizan para pruebas no destructivas de materiales y estructuras.

*Fotones.* Cuando se consideran las interacciones con la materia, la radiación electromagnética generalmente se trata como una serie de partículas individuales, conocidas como fotones (dualidad onda-partícula) [18]. Por definición los fotones son partículas que no poseen masa,

pero poseen una energía dada por  $E = hc/\lambda$ . Donde  $h$  es la constante de Planck,  $\lambda$  es la longitud de onda del fotón y  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío.

La radiación de fotones ionizantes consta de tres categorías de fotones: ultravioleta (UV), rayos X y rayos  $\gamma$ . Aunque los rayos ultravioleta tienen un uso limitado en medicina, las imágenes y el tratamiento de enfermedades se llevan a cabo con fotones de mayor energía, como los rayos X y los rayos  $\gamma$ . Con respecto a su origen, este tipo de radiación se divide en tres importantes categorías las cuales son; los rayos gamma: fotones producidos por la transición de orbitales nucleares; los rayos X característicos (fluorescentes): fotones resultantes de transiciones electrónicas entre orbitales atómicos; y la radiación Bremsstrahlung: fotones emitidos por la interacción de tipo Coulomb entre electrones y positrones energéticos con núcleos atómicos. La interacción de fotones con la materia puede darse mediante tres procesos: (1) el fotón puede transmitirse a través del material sin interacción, (2) dispersarse en una dirección diferente durante una o más interacciones, o (3) ser absorbido por la transferencia de su energía al material a través de una o más interacciones. Los fotones que atraviesan un material sin interacción se denominan fotones primarios o radiación primaria, mientras que los fotones que se dispersan se denominan fotones secundarios. Si el fotón es absorbido o dispersado, se dice que ha sufrido *atenuación* y estos procesos pueden involucrar interacciones únicas o múltiples que resultan en la transferencia de toda o solo una parte de la energía del fotón al material [12].

La terminología recomendada por la ICRU (Comisión Internacional de Unidades y Medidas de Radiación, 1971) para representar los diferentes tipos de interacciones que tiene la radiación ionizante de partículas cargadas y partículas neutras con la materia es la siguiente [16]:

- *Radiación Ionizante directa.* Se refiere a la radiación que interactúa directamente y transfiere su energía a los átomos o moléculas que encuentra a través de varias interacciones de tipo Coulomb, provocando que se ionicen. Este proceso de ionización implica la eliminación de uno o más electrones de los átomos o moléculas, lo que da como resultado la creación de partículas cargadas llamadas iones. Estos iones pueden luego participar en reacciones químicas y otros procesos biológicos, causando potencialmente daños a los organismos vivos. Los principales tipos de radiación directa son los electrones, protones y partículas alfa. La radiación ionizante directa se utiliza comúnmente en aplicaciones médicas, incluida la radioterapia para el tratamiento del cáncer, y también es motivo de preocupación en el contexto de la protección radiológica y la seguridad nuclear, ya que la exposición a altos niveles de radiación ionizante puede ser perjudicial para la salud humana.
- *Radiación ionizante indirecta.* Este tipo de radiación no interactúa directamente ni ioniza átomos o moléculas, sino que produce partículas secundarias o fotones que posteriormente causan ionización. Este proceso de ionización indirecta ocurre cuando la radiación indirecta transfiere energía al material que atraviesa, provocando la creación de partículas cargadas u otra radiación ionizante. Estas partículas secundarias o fotones pueden luego ionizar átomos o moléculas dentro del material, provocando daños químicos y biológicos al medio. Los tipos de radiación que se clasifican en este grupo son los fotones y neutrones principalmente. Del mismo modo, la radiación ionizante indirecta, como los rayos X y los rayos gamma, se usa comúnmente en diversas aplicaciones, incluidas imágenes médicas (radiografía de rayos X y tomografías computarizadas), inspección industrial y radioterapia, y es de suma importancia considerar las medidas de seguridad radiológica y de protección cuando se trabaja con fuentes de radiación ionizante indirecta para minimizar los riesgos potenciales para la salud asociados con la ionización y su consecuente exposición.

El rango de energías más frecuentemente utilizado en las aplicaciones de la física de la radiación se extiende desde 10 KeV hasta 25 MeV para electrones y fotones, los neutrones hasta 100 MeV y protones hasta 300 MeV. Los electrones y fotones de hasta aproximadamente 1 KeV también son de interés en varias aplicaciones, al igual que las energías de hasta aproximadamente 50 MeV [17].

Los haces de radiación de fotones y electrones de alta energía emitidos por los aceleradores modernos han reemplazado a los haces de rayos X de ortovoltaje (haces de energías menores a 600 keV) en la radioterapia debido a las características de interacción física de la radiación de alta energía, las cuales producen distribuciones de dosis superiores y de mejor calidad. En general, las radiaciones de mayor energía proporcionan una tasa de dosis más alta, mejor preservación de la piel, mejores características de penetración, menos dispersión y menos perturbación en las interfaces de los tejidos (menor invasión a tejidos circundantes). La mejora en la distribución de dosis se ha reflejado en mejores tasas de curación y menores tasas de complicaciones, y en muchos casos ha revolucionado los resultados de la radioterapia [19].

## 2.2. Cantidades Microdosimétricas

La característica más relevante de las radiaciones ionizantes es su interacción discontinua con la materia. Las magnitudes utilizadas para cuantificar la energía que es absorbida en el medio como lo es la dosis absorbida (que se define más adelante) es, sin embargo, una cantidad obtenida a partir de un promedio estadístico que no tiene en cuenta las fluctuaciones aleatorias resultantes. La complejidad específica de la acción de la radiación biológica radica en el hecho de que grandes cantidades de energía se depositan localmente en volúmenes muy pequeños, lo que provoca la alteración o destrucción de estructuras moleculares esenciales. Por lo tanto, para la mayoría de las consideraciones radiobiológicas, estas cantidades no permiten ninguna afirmación sobre la energía que realmente es impartida a células individuales o a estructuras subcelulares [20]. Una comparación que ejemplifica lo anterior es la siguiente, la dosis letal media para los seres humanos es de aproximadamente 5 Gray (GY), es decir, 5 J/kg que, si se diera completamente en forma de calor, provocaría un aumento de temperatura de sólo aproximadamente 1/1000°C; ahora, para romper un enlace químico se requiere una energía de unos 400 kJ/mol, es decir, en agua 2000 kJ/kg, lo que corresponde a un aumento de temperatura local de 2000°C. Este pequeño cálculo muestra que la dosis media macroscópica es completamente inapropiada para la descripción de procesos en dimensiones submicroscópicas, sin embargo, esto no invalida su utilidad a efectos prácticos. El ejemplo anterior muestra, además, que el número de eventos que crean depósitos locales de alta energía debe ser muy pequeño y, por lo tanto, un tratamiento más apropiado debe tener en cuenta la naturaleza estocástica de los procesos de interacción. La rama de la investigación sobre las radiaciones que se ocupa de estos problemas específicos se denomina “microdosimetría” [21].

La microdosimetría, que surge a partir de un desarrollo de conceptos, así como de cantidades físicas y su medición, es el estudio y cuantificación sistemática de la distribución espacial y temporal de la energía absorbida en las estructuras biológicas celulares y subcelulares, y la relación de tales distribuciones con los efectos biológicos. Aunque puede utilizarse, y se ha utilizado, en la interpretación de diversos efectos de la radiación, su principal utilidad ha sido en el campo de la radiobiología [4].

La microdosimetría busca expresar la “calidad” de la radiación en términos de parámetros físicos suficientemente sutiles para permitir la predicción cuantitativa de los efectos biológicos de diferentes tipos de radiaciones ionizantes [16].

En el campo de la física y especialmente en la rama de la física de las radiaciones es importante tener claros los conceptos y definiciones de las magnitudes que involucran la utilización de los campos de radiación aplicados en algún medio, esto con el objetivo de tener una correcta estimación de los cálculos y datos obtenidos por los instrumentos de medición. Estas magnitudes deben cumplir rigurosamente cuatro atributos principales: deben ser generales, es decir, su rango de aplicación en la práctica debe ser extenso, inequívocas o no ambiguas y con ninguna condición implicada, necesarias (no redundantes) y además que sean accesibles a las mediciones y cálculos. La precisión de las cantidades físicas que se desean medir con respecto al campo de radiación dependerá si se trata de magnitudes estocásticas o no estocásticas [22].

Una magnitud *estocástica* es aquella en la que los valores resultantes ocurren de manera aleatoria y, por lo tanto, no se pueden predecir. Estas magnitudes están definidas en un espacio finito y varían en el espacio y tiempo de manera discontinua. Sin embargo, la probabilidad de cualquier valor particular se puede determinar por una distribución de probabilidad específica. Esta distribución representa una estimación de la distribución de probabilidad de la magnitud, y su media un estimador del valor esperado. En términos matemáticos se habla de la función de distribución y de la densidad de probabilidad de esa magnitud [22].

Por otra parte, una magnitud no estocástica es aquella que en ciertas condiciones su valor puede predecirse mediante un cálculo analítico, por tanto, es considerada como una función continua y diferenciable en el espacio y el tiempo, y se puede hablar de su gradiente espacial y su tasa de cambio temporal. Su valor es igual o se basa en el valor esperado de una cantidad estocástica relacionada, si existe. Aunque las cantidades no estocásticas en general no necesitan estar relacionadas con las cantidades estocásticas, sí lo están en el contexto de la radiación ionizante [16].

Cualquier medición de la radiación ionizante requiere de la formulación de las magnitudes apropiadas. La ICRU engloba todas las magnitudes involucradas en la física de las radiaciones en diferentes categorías. Particularmente las magnitudes dosimétricas son concebidas para proporcionar una medición física que se correlacione con los efectos reales y potenciales de la radiación sobre el medio de interés.

Como la radiación interactúa con la materia en una serie de pasos en los que la energía del campo de radiación es depositada en diferentes puntos del medio la ICRU separa las magnitudes dosimétricas en dos secciones como lo son el depósito de energía y la conversión de energía [22].

Entre las primeras se considera la energía depositada, la energía impartida, energía específica y la dosis absorbida y entre la segunda sólo se considerará el KERMA y el CEMA. A continuación se presenta una definición de cada uno de estos términos.

- La *energía depositada* es una magnitud estocástica que se define como la energía que es depositada en una única interacción en el medio; en términos algebraicos se expresa como

$$\varepsilon_i = \varepsilon_e - \varepsilon_s + Q. \quad (2.2)$$

- La *energía impartida*  $\varepsilon$ , al medio en un volumen pequeño (no infinitesimal), es la suma de todos los depósitos de energía en dicho volumen, esto es

$$\varepsilon = \sum_i \varepsilon_i. \quad (2.3)$$

En las ecuaciones anteriores,  $\varepsilon_i$  es la energía de la partícula ionizante de la  $i$ -ésima interacción,  $\varepsilon_e$  es la energía de la partícula ionizante que entra en la región de interacción mientras que  $\varepsilon_s$  es la suma de las energías de todas las partículas ionizantes que abandonan la región de interacción y  $Q$  es el cambio en las energías internas de los núcleos o moléculas involucradas en la interacción, se relaciona con cambios tales como reacciones nucleares y producción de pares y suele casi siempre ser igual o cercano a cero. La unidad característica de estas magnitudes es el Joule, aunque frecuentemente son expresadas en eV [22].

Las partículas cargadas ionizantes sufren interacciones y pierden energía en ciertos puntos del medio expuesto. El punto de interacción se denomina punto de transferencia y se establece que este tipo de interacciones discretas ocurren en puntos de transferencia sin tener en cuenta las incertidumbres de la mecánica cuántica con respecto a la ubicación del punto [4].

La partícula de energía cinética  $T_1$  puede detenerse en el punto de transferencia o puede emerger con energía cinética reducida  $T_2$ . Se tratará como una partícula emergente sólo si su energía cinética aún excede un límite establecido. La interacción también puede producir una partícula ionizante secundaria con energía cinética  $T_3$ , así como cambios en la estructura interna del medio de interacción [Figura 2.1]. Si ninguna partícula ionizante emerge del punto de interacción, dicho punto es el final de la trayectoria de partícula cargada [20].

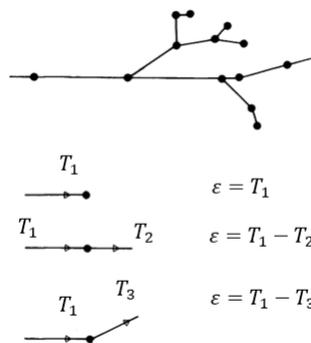


Figura 2.1: Diagrama esquemático de la trayectoria de una partícula cargada interactuando en puntos de transferencia (●) y sus correspondientes transferencias de energía [20].

En un medio expuesto se produce una configuración aleatoria de puntos de transferencia. El término trayectoria de partículas (particle track) se utiliza para la configuración de puntos de transferencia y de partículas cargadas asociadas. Toda la configuración de puntos de transferencia en el medio expuesto se ha denominado *distribución incoada* (inchoate distribution) de transferencias de energía. El término incoada se refiere a que esta es la distribución inicial antes de los procesos posteriores de mayor degradación energética [20]. Esta descripción también denominada microdosimetría estructural permite una descripción detallada del patrón microscópico de absorción de energía y es de importancia básica porque el efecto inmediato de la radiación está determinado esencialmente por la intersección de este patrón y el de los componentes sensibles de la materia irradiada [4].

La *energía impartida media*  $\bar{\varepsilon}$  en un volumen dado de materia está definido como la energía radiante  $R_e$  de todas las partículas ionizantes cargadas y no cargadas que entran en un volumen, menos la energía radiante  $R_s$  de todas aquellas partículas ionizantes cargadas y no cargadas que abandonan el volumen más la sumatoria  $\sum Q$  de todos los cambios de energía en reposo de los núcleos o moléculas [23]. Matemáticamente se expresa como

$$\bar{\varepsilon} = R_e - R_s + \sum Q. \quad (2.4)$$

A partir de las definiciones anteriores se pueden derivar las cantidades de dosis y energía específica. La dosis absorbida,  $D$ , es una magnitud no estocástica que se define como el valor esperado de la energía impartida a la materia por unidad de masa en un punto de un volumen específico. Su unidad de medición es el Gray (J/Kg) y está dada como

$$D = \frac{d\bar{\varepsilon}}{dm} \quad (2.5)$$

La contraparte microscópica de la dosis absorbida es la *energía específica*  $z$ . Se define como el cociente de la energía impartida  $\varepsilon$  depositada localmente en un pequeño volumen dividida por su masa  $m$  [21, 4].

$$z = \frac{\varepsilon}{\rho V} = \frac{\varepsilon}{m}, \quad (2.6)$$

donde  $\rho$  es la densidad del medio absorbente. Esta es una cantidad estocástica que fluctúa según leyes estadísticas que pueden describirse mediante una función de densidad  $f(z)dz$ , y se utiliza cuando uno está interesado principalmente en el número de diferentes eventos aleatorios de deposición de energía en lugar de analizar su contribución relativa a la dosis total. Aunque  $z$  y  $\varepsilon$  son cantidades estrechamente relacionadas, a menudo es más conveniente usar  $z$  porque es el análogo aleatorio de la dosis absorbida  $D$  [20].

El volumen  $V$  en el que se analizan las magnitudes anteriores se considera frecuentemente esférico con cierto diámetro diferente de cero. Si  $V$  no es esférico, se requieren, en principio más parámetros e incluso una orientación respecto al campo de radiación. Como la microdosimetría suele ocuparse de volúmenes que son lo suficientemente pequeños y uniformes (Microdosimetría regional) como para que en la mayoría de los tipos de irradiación la dosis pueda considerarse constante, entonces se cumple que la energía específica media es igual a la dosis absorbida en la región de interés [4].

Los electrones son radiaciones ionizantes directas que depositan su energía en el tejido mediante interacciones de Coulomb con los electrones orbitales y los núcleos de los átomos absorbentes. Los haces de electrones de megavoltaje representan una modalidad de tratamiento importante en la radioterapia moderna y, a menudo, brindan una opción única para el tratamiento de tumores superficiales que tienen menos de 5 cm de profundidad. Los electrones se han utilizado en radioterapia desde principios de la década de 1950, primero producidos por betatrones y luego por aceleradores lineales. Los modernos aceleradores lineales de alta energía utilizados en radioterapia suelen proporcionar, además de energías de haz de rayos X de dos megavoltajes, varios haces de electrones con energías de 4 MeV a 25 MeV [1]. Ahora se definen las magnitudes dosimétricas de conversión de energía.

- El *kerma*  $K$  del acrónimo de energía cinética liberada en la materia, es una magnitud no estocástica que se define para las radiaciones ionizantes indirectas (fotones y neutrones) como la energía transferida  $E_{tr}$  a partículas cargadas por unidad de masa del absorbente [1]. Esta magnitud se expresa como

$$K = \frac{dE_{tr}}{dm}. \quad (2.7)$$

- El *cema*  $C$  del acrónimo de, energía convertida por unidad de masa, es una magnitud no estocástica que hace referencia a la energía impartida por las partículas cargadas, excepto electrones secundarios, debido a las colisiones con electrones atómicos en un diferencial de masa del medio y es expresada como

$$C = \frac{dE_c}{dm}. \quad (2.8)$$

La energía perdida por las partículas cargadas en colisiones con electrones incluye la energía empleada en romper los enlaces y cualquier energía cinética de los electrones liberados, definidos como electrones secundarios. Por lo tanto, la subsecuente pérdida de energía de todos los electrones secundarios se excluye de  $dE_c$  [22].

La unidad de ambas magnitudes es expresada en GY. El kerma se relaciona con la energía cinética inicial de las partículas cargadas liberadas por las partículas no cargadas (fotones y neutrones), la energía empleada en romper los enlaces, una componente relativamente pequeña que no está incluida en la definición. El Kerma considera pues la energía transferida a las partículas cargadas que nacen en  $dm$  en tanto que el cema considera las energías disipadas o perdidas en colisiones electrónicas por las partículas cargadas existentes en  $dm$  [22].

La energía que pierden las partículas energéticas al interactuar con el medio es, como se mencionó anteriormente, un proceso estocástico. Sin embargo, debido al gran número de colisiones que sufren las partículas en su recorrido, la pérdida de energía de las partículas proyectadas hasta llegar al reposo se describe mediante una función continua denominada poder de frenado,  $S$ . Este concepto se define como  $S = dT/dx$ , donde  $dT$  es la pérdida de energía cinética de la partícula a medida que viaja una distancia  $dx$  [22]. Este concepto el cual fue propuesto por primera vez por Bethe a principios del siglo XX, describe la tasa de energía perdida por las partículas cargadas al interactuar con el medio, transfiriendo parte de su energía a un electrón, dejando al átomo en un estado ya sea ionizado o excitado [12].

Comúnmente se usa el poder de frenado de colisión por unidad de masa, que es el poder de frenado de colisión dividido por la densidad del medio definido como

$$\frac{S}{\rho} = \frac{1}{\rho} \frac{dT}{dx}. \quad (2.9)$$

El poder de frenado másico es proporcional al cuadrado del número atómico del medio e inversamente proporcional a  $\beta$ . Se debe tener en cuenta que, para partículas cargadas de menor energía, el poder de frenado másico de colisión disminuye al aumentar la energía, porque la velocidad aumenta, pero para partículas relativistas, como los electrones con energías de varios MeV, la velocidad es constante (aproximadamente igual a  $c$ ) es por ello que el poder de frenado másico sea aproximadamente constante e igual a  $2 \text{ MeV cm}^2 \text{ g}^{-1}$ . Esto significa que, en agua, con una densidad de  $1 \text{ g cm}^{-3}$ , un haz de electrones perderá aproximadamente  $2 \text{ MeV}$  por cada  $\text{cm}$  que recorra en el medio [12].

Así mismo el poder de frenado por colisiones radiativas es inversamente proporcional al cuadrado de la masa de la partícula cargada. Un protón tiene una masa de aproximadamente 2000 veces

la masa de un electrón, por lo que la cantidad de producción de Bremsstrahlung en un haz de electrones es 106 veces mayor que en un haz de protones. Debido a que los haces de electrones interactúan con los núcleos con mayor probabilidad, especialmente a energías más altas, los electrones sufrirán una dispersión considerablemente mayor que las partículas cargadas pesadas. Para un haz de partículas pesadamente cargadas, que no sufre mucha dispersión, la profundidad de penetración y la longitud del camino serán bastante similares, sin embargo, para un haz de electrones, el final de la trayectoria de partículas puede ocurrir en un rango de profundidades [12].

Cabe resaltar que, en el poder de frenado por colisión, el electrón incidente transfiere parte de su energía al átomo y el resto en forma de energía cinética al electrón eyectado. Esta vacancia puede ser rellenada ya sea por absorción de un electrón libre del medio lo que dará lugar a un proceso radiativo de emisión de fotones (rayos X característicos) o por una transición de un electrón más energético, cediendo ese exceso de energía a otro electrón de un orbital superior provocando que sea emitido con una cierta velocidad. A este tipo de proceso no radiativo donde se emite un electrón secundario se le conoce como transición de Auger [22].

En resumen, tras la ionización de orbitales atómicos internos tiene lugar, una relajación atómica, es decir, el exceso de energía del ión atómico se emite en forma de radiación  $\delta$  o en forma de rayos X. La probabilidad de que ocurra alguna de estas transiciones está particularmente en función del número atómico  $Z$  del blanco ya que diferentes investigaciones han demostrado que la emisión de electrones de Auger predomina para números atómicos bajos, mientras que para valores de  $Z$  intermedios o grandes es más probable la emisión de rayos X característicos [17].

Al definir algunas magnitudes tanto macro como microdosimétricas, surge la necesidad de hacer hincapié en dos conceptos que están involucrados en dichas magnitudes, la energía transferida y la energía depositada. La *energía transferida*, se refiere al proceso por el cual la energía de la radiación se transfiere al material por el que pasa. Cuando la radiación ionizante interactúa con la materia, puede transferir energía a los átomos o moléculas del material. Esta transferencia de energía puede tener como resultado diversos efectos, como la excitación o ionización de átomos, dando lugar a la creación de partículas cargadas o a la emisión de radiación secundaria. Mientras que la *energía depositada* es la energía que realmente absorbe el material. No toda la energía transferida al material por radiación es depositada; algo de ésta puede dispersarse, reflejarse o sufrir otras interacciones sin ser absorbida. Por tanto, en un proceso de colisión inelástica en la que existe un intercambio de energía, la energía transferida siempre es mayor que la energía que es depositada en el medio.

## 2.3. Descripción microscópica de la interacción de electrones energéticos con la materia

### 2.3.1. Aspectos generales

Las partículas cargadas como electrones y positrones, protones, partículas  $\alpha$  e iones más pesados, son fundamentales en la física médica. Incluso si la radiación primaria es un haz de fotones, son las partículas cargadas las que causan el efecto biológico, ya sea muerte celular u otros cambios que eventualmente pueden inducir cáncer. Además, un conocimiento preciso de la distribución espacial de la dosis absorbida es crucial para la planificación y administración del tratamiento de radioterapia; y esto sólo puede obtenerse si el transporte de la energía por las partículas cargadas (abrumadoramente electrones) pueden ser modelados. Alternativamente, la radioterapia también se administra mediante haces de partículas primarias cargadas, generalmente electrones de megavoltaje, donde las interacciones de los electrones con la materia son sumamente cruciales;

estos electrones pueden tener alcances de hasta un centímetro y son utilizados mayormente para lesiones o tumores superficiales. El tema de la dosimetría de la radiación depende de un conocimiento profundo de las interacciones de las partículas tanto indirectamente ionizantes como directamente ionizantes. A nivel microdosimétrico, una comprensión fundamental de la acción de la radiación sobre las células sólo puede lograrse mediante el estudio de la estructura de las trayectorias de partículas en relación con los objetivos pertinentes (es decir, el ADN en el núcleo celular), requiriendo nuevamente un conocimiento de las interacciones entre partículas cargadas y el medio [23].

Las principales diferencias entre la manera en que las partículas cargadas interactúan con la materia y la manera en que los fotones interactúan con la materia residen en la naturaleza de sus colisiones. La interacción tipo Coulomb de electrones con otros electrones y los núcleos de un medio ocurren entre partículas cargadas en las que cada partícula ejerce una fuerza de atracción o repulsión sobre la otra. La mayoría de las interacciones de partículas cargadas con la materia son interacciones con los electrones que rodean el núcleo, aunque también pueden ocurrir interacciones con los núcleos. Como resultado de estas interacciones, las partículas cargadas imparten una pequeña porción de su energía cinética a los electrones secundarios [12].

Los procesos atómicos más importantes que sufren las partículas cargadas al atravesar medios están relacionados con la dispersión de Coulomb tanto de electrones como de núcleos atómicos. Aunque el proceso básico es siempre el mismo (es decir, la dispersión de Coulomb), debido a las masas tan diferentes de electrones y núcleos, el efecto es muy diferente: la sección transversal es proporcional a  $Z^2$ , y cuando se expresa en función del cuadrimomento  $\mathbf{P}'$  transferido, es aproximadamente independiente de la masa. Esto significa que para un proyectil dado la transferencia de energía es inversamente proporcional a la masa del blanco. Por lo tanto, las interacciones con los electrones son, con mucho, la fuente dominante de pérdidas de energía de las partículas cargadas [24].

A medida que un haz de partículas cargadas de energía se mueve a través de un medio, las partículas cargadas pueden interactuar transfiriendo parte de su energía a un electrón en el medio. En esta transferencia, la partícula cargada que choca pierde energía y se desvía (dispersa) en algún ángulo con respecto a su dirección original. Las partículas cargadas son dispersadas por los electrones del medio, impartiendo pequeñas cantidades de energía a los electrones del medio a medida que ionizan los átomos del medio. Por ejemplo, un electrón que atraviesa un tejido perderá, en promedio, entre 30 y 35 electronvoltios en cada interacción en la que participe. Por tanto, para un electrón de 3 MeV, éste sufrirá aproximadamente 100.000 interacciones antes de perder toda su energía cinética y detenerse [12].

En una interacción electrón-electrón, el electrón que recibe la energía puede ser elevado a una capa más alejada del núcleo del átomo al que pertenece, o puede ser expulsado completamente del átomo. Cuando un electrón se eleva a una capa más alejada del núcleo, el átomo es inestable y se dice que está excitado. Por lo general, el átomo permanece en este estado sólo momentáneamente y recupera rápidamente la estabilidad a través de una o más transiciones electrónicas, emitiendo rayos X característicos, hasta que se llenan todas las vacantes en los niveles de energía inferiores [12].

Si un electrón es expulsado durante una interacción electrón-electrón, su energía cinética será,  $T' = T - E_u$ , donde  $T$  es la energía transferida al electrón expulsado y  $E_u$  es la energía de enlace del electrón expulsado. Si la energía de enlace es insignificante, la suma de la energía cinética de los electrones dispersados y expulsados es igual a la energía cinética del electrón original antes de la interacción. Cuando la energía cinética se conserva en una interacción, se dice que la interacción es *elástica*.

Si no se puede ignorar la energía de enlace, la energía cinética no se conserva y se dice que la interacción es *inelástica*. Cuando un electrón es expulsado de un átomo mediante un proceso como una interacción con un electrón incidente, se dice que el átomo está ionizado. El electrón expulsado y el ion positivo residual constituyen un par de iones primarios [12].

Un electrón que viaja a través de un medio puede dispersarse con energía reducida durante la interacción con un núcleo en el medio. En algunas interacciones, la energía cinética se conserva porque la suma de la energía cinética del electrón dispersado y el núcleo en “retroceso” es igual a la del electrón incidente. En medios absorbentes de  $Z$  grande, la dispersión elástica por los núcleos es más probable porque su probabilidad aumenta con  $Z^2$ , mientras que la probabilidad de dispersión elástica por los electrones aumenta con  $Z$ . La probabilidad de interacción a menudo se denomina sección transversal de la interacción, a veces expresada en unidades de “barns”, donde  $1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$  [12].

La mayoría de las interacciones de dispersión de electrones con núcleos son más inelásticas que elásticas porque la energía cinética de las partículas que interactúan no se conserva en la interacción. La pérdida de energía cinética se expresa como energía liberada en forma de radiación electromagnética durante la interacción. La energía irradiada cuando un electrón (o cualquier partícula cargada) se ralentiza al interactuar con un núcleo de un medio absorbente se denomina Bremsstrahlung. Un fotón Bremsstrahlung puede poseer energía hasta toda la energía cinética del electrón incidente.

De manera similar a la dispersión elástica de electrones por los núcleos, la probabilidad de producción de Bremsstrahlung varía con  $Z^2$  del medio. En consecuencia, los medios con  $Z$  alto son mucho más efectivos para producir Bremsstrahlung que los absorbentes con  $Z$  bajo [12]. La relación entre la energía perdida por los electrones debido a interacciones inelásticas con los núcleos (pérdida de energía por radiación Bremsstrahlung) y la pérdida por excitación e ionización durante las interacciones con electrones es aproximadamente  $TZ/820$ . Donde  $T$  es la energía cinética de los electrones incidentes en MeV y  $Z$  es el número atómico del medio siendo importante en el diseño de tubos de rayos X utilizados para diagnóstico médico y radioterapia [12].

### 2.3.2. La aproximación de Born

La aproximación de Born es un concepto utilizado en diversos campos de la física, incluida la mecánica cuántica y la física nuclear. Es un método de aproximación utilizado para simplificar sistemas complejos considerando sólo los términos más dominantes o significativos en una expresión o ecuación matemática. En mecánica cuántica, por ejemplo, cuando se trata de procesos de dispersión o interacciones entre partículas, la primera aproximación implica considerar sólo los términos de primer orden en la expansión de la serie de perturbaciones. Esto significa ignorar los términos de orden superior, que suelen ser menos significativos en muchos casos. La aplicación de la serie de Born al cálculo de la amplitud de dispersión lleva directamente a un observable físico: la sección transversal diferencial de dispersión en ángulo sólido, que, cuando se combina con la cinemática de la dispersión, produce la probabilidad de transferencia de energía. La amplitud de dispersión modula espacialmente la función de onda saliente después de la dispersión y, por tanto, contendrá toda la información relativa a la interacción de dispersión [25].

Aunque ésta no fue la ruta histórica de la derivación, la expansión de Born se deriva de la ecuación de Lippmann-Schwinger mediante la invocación de dos supuestos principales: primero, el potencial de dispersión es débil en relación con los valores propios del hamiltoniano de partículas libres y, segundo, la observación de la función de onda del estado final ocurre a una distancia suficientemente grande del centro de dispersión. Lo que comúnmente se llama aproximación de

Born es, de hecho, el primer término de la serie de Born que se deriva de la solución iterativa de la ecuación de Lippmann-Schwinger. Este resultado describe la función de onda del estado final (posterior a una colisión) como una serie infinita tanto en la evolución temporal de los estados inicial a final como del potencial perturbador que causa esta transición cuántica. El primer término representa un único canal desde el estado inicial hasta el estado final. Los términos adicionales representan canales adicionales que ocurren a través de estados intermedios. En la mayoría de los cálculos prácticos, el primer término perturbativo es adecuado [25].

A diferencia del hamiltoniano clásico, que sólo tiene valores propios continuos, un hamiltoniano de mecánica cuántica puede tener valores propios tanto discretos como continuos dependiendo de si el sistema que describe está ligado o no. Los valores propios discretos corresponden a los estados ligados de un sistema que son las consecuencias de un potencial de interacción atractivo que confina el sistema de partículas dentro de un volumen finito de espacio. En tal caso, la ecuación de Schrödinger del sistema ligado es

$$H\Psi_n = E_n\Psi_n, \quad (2.10)$$

con valores propios de energía  $E_n$  y funciones propias  $\Psi_n$  para el hamiltoniano hermitiano. Las magnitudes de las funciones de onda de las partículas unidas disminuirán rápidamente a medida que aumente el espaciamiento entre partículas. Por tanto, la fuerza del potencial de unión debe exceder las energías cinéticas de las partículas unidas [25].

Los valores propios continuos corresponden a estados libres o, en nuestro caso de interés, de dispersión. Son estos estados los que están definidos por los estados inicial y final en el cálculo de transferencia de energía. En la dispersión, una partícula incide sobre un potencial y luego es dispersada por ese potencial, de modo que el estado final observado es la suma de las funciones de onda incidente (no dispersada) y dispersada. Mientras que el problema de función propia discreta corresponde a un sistema único y confinado, el problema de función propia continua describe las interacciones entre dos subsistemas (aquí, el proyectil y el objetivo) que no son estados mutuamente vinculados. Esos resultados proporcionan sólo la energía y el impulso de las dos partículas en el estado final una vez que se ha especificado un ángulo de dispersión o retroceso. Una forma de resolver el problema de la dispersión es mediante la solución de la ecuación de Schrödinger. En particular, la versión dependiente del tiempo. El haz incidente de los proyectiles en tal caso estaría representado por paquetes de ondas idénticos. Sin embargo, la mecánica para obtener la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es laboriosa. En cambio, se pueden hacer una serie de suposiciones para simplificar este problema de dispersión dependiente del tiempo a uno independiente del tiempo en el que la dependencia del tiempo permanece implícita y no es necesario incluirla en el cálculo. Por ejemplo, supongamos primero que los paquetes de ondas tienen un momento  $\mathbf{p}$  bien definido, de modo que cada paquete tiene una longitud extendida a lo largo de muchas longitudes de onda como consecuencia del principio de incertidumbre de Heisenberg. Por tanto, cada partícula puede considerarse como una onda plana [12]:

$$\Psi_i(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.11)$$

donde el vector de onda se define como

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{P}}{\hbar c}, \quad (2.12)$$

y tiene unidades de longitud inversa. Supongamos a continuación que el haz de partículas del proyectil incide en el potencial durante un período de tiempo mucho más largo que la duración de la interacción misma. Bajo estos dos supuestos, las condiciones de estado estacionario pueden considerarse válidas con el resultado de que el problema se reduce a encontrar soluciones estacionarias a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo [12].

### 2.3.3. Concepto de sección transversal

Como ya se describió, la microdosimetría regional se ocupa de la estocástica de la deposición de energía en sitios específicos. Una vez definido el objetivo como un conjunto físico (composición, geometría, etc.), el problema se reduce a estudiar la probabilidad de interacción de las partículas con el sistema objetivo, problema que se analiza a partir de la mecánica cuántica. El proceso de deposición de energía dominante que nos preocupa aquí es la interacción de Coulomb entre la partícula incidente y los electrones atómicos. El interés radica en las propiedades de transporte de la radiación y, más concretamente, la probabilidad de que una determinada radiación sufra una interacción en el medio, para ello se enuncian a continuación algunas magnitudes y conceptos [4].

La *fluencia*,  $\Phi$ , de las partículas es

$$\Phi = \frac{dN_p}{da}, \quad (2.13)$$

donde  $dN_p$  es el número de partículas que inciden en una esfera de área de sección transversal  $da$ . El área debe ser perpendicular a la dirección de las partículas y una esfera lo garantiza de la manera más sencilla.

La *sección transversal*,  $\sigma$ , de un blanco (target) para una interacción con partículas incidentes es

$$\sigma = \frac{P}{\Phi}, \quad (2.14)$$

donde  $P$  es la probabilidad de interacción para una entidad objetivo cuando está sujeta a una fluencia  $\Phi$ . El término blanco u objetivo puede referirse a partículas atómicas, átomos o estructuras más complejas (células biológicas, por ejemplo) [4].

En una interpretación geométrica,  $\sigma$  es el área que cada entidad objetivo presenta a una partícula incidente por unidad de probabilidad de interacción. En una fluencia uniforme y unidireccional, el número de partículas que atraviesan un plano perpendicular de unidad de área es  $N_p$ . Sin embargo, esta interpretación geométrica de  $\sigma$  no debe tomarse literalmente; por ejemplo, un tratamiento mecánico-cuántico de la interacción de una partícula con un objetivo que consiste en que una esfera densa de radio  $r$  muestra que para partículas de alta energía la sección transversal elástica total resulta ser el doble de la sección transversal clásica; mientras que, a bajas energías, la sección transversal elástica total es cuatro veces el valor clásico. En los estudios de transporte es necesario discriminar aún más entre los procesos de dispersión mediante variables adicionales como la energía ( $\hbar\omega$ ) y el momento ( $\hbar\mathbf{k}$ ) transferidos por el proyectil al material objetivo; o, de manera análoga, la energía ( $T'$ ) y el ángulo de dispersión ( $\theta$ ) de la partícula saliente, es decir, el ángulo de dispersión entre el vector de momento inicial  $\mathbf{p}_i$  y el vector de momento final  $\mathbf{p}_f$  [4].

El camino libre se deriva de la sección transversal y se define como la trayectoria de la partícula (por simplicidad, una trayectoria recta) entre eventos de interacción sucesivos. A lo largo de un camino libre, se supone que la energía y el momento de la partícula son constantes. Dependiendo del proceso de interacción considerado, se puede tener un camino libre para la dispersión elástica, ionización, excitación, etc. Bajo el supuesto de que las interacciones sucesivas se rigen por la estadística tipo Poisson, la probabilidad de una trayectoria libre (sin dispersión)  $s$  seguida de la interacción entre  $s$  y  $s + ds$  es

$$f(s)ds = e^{-N\sigma s} N\sigma ds. \quad (2.15)$$

Por tanto, el camino libre medio (MFP, del acrónimo mean free path) el cual guarda una estrecha relación con la sección transversal, se obtiene a partir de

$$\lambda = \int s f(s) ds = \frac{1}{N\sigma}, \quad (2.16)$$

donde  $N$  es el número de objetivos por unidad de volumen. El inverso del MFP  $\lambda^{-1}$ , a veces se conoce como la sección transversal macroscópica [4].

#### 2.3.4. Tipos de interacción de electrones con el medio

Existen principalmente tres mecanismos de interacción importantes para los electrones en el rango de energía desde unos pocos cientos de eV hasta 50 MeV, el primero son las colisiones con electrones atómicos unidos; en segundo lugar, las interacciones radiativas o Bremsstrahlung; y tercero, la dispersión elástica con el átomo o molécula en cuestión [23].

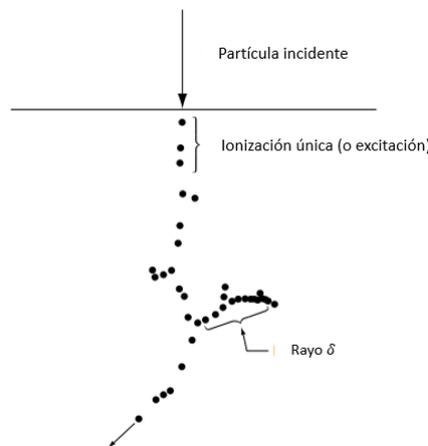


Figura 2.2: Representación esquemática de la trayectoria de un partícula incidente en un medio [23].

Las interacciones de tipo Coulomb con los electrones atómicos unidos son la principal forma en que los electrones pierden energía en los materiales con energías de interés en radioterapia. La partícula crea un rastro de ionizaciones y excitaciones a lo largo de su camino [Figura 2.2]. En ocasiones, la transferencia de energía al electrón atómico es suficiente para crear los llamados rayos delta ( rayo  $\delta$ ) que son electrones lo suficientemente energéticos como para sufrir por sí solos interacciones adicionales de fuerza de Coulomb. Así, un rayo disipa su energía cinética a lo largo de una trayectoria separada de la de la partícula cargada primaria [16].

Las interacciones entre electrones y fuerzas de tipo Coulomb se pueden caracterizar simplemente en términos del tamaño relativo del parámetro de impacto clásico  $b$  frente al radio atómico  $a$ , como se muestra en la figura 2.3. Los tres tipos de interacciones mencionados (inelástica, elástica y radiativa) se vuelven dominantes para  $b \sim a$ ,  $b \gg a$  y  $b \ll a$ , respectivamente [23].

Los términos *suave* y *duro* se utilizan a menudo para describir los diferentes tipos de colisiones. Se dice que las llamadas colisiones suaves ocurren cuando la partícula rápida pasa por un átomo a una distancia relativamente grande, y el campo de fuerza de Coulomb afecta al átomo como un todo, distorsionándolo, posiblemente con una excitación o ionización de una capa externa. Sólo se puede transferir una pequeña cantidad de energía del orden de eV [23].

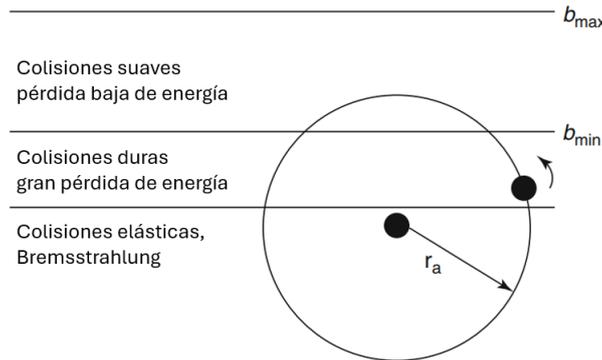


Figura 2.3: Tres tipos de interacción de electrones con un átomo, dependiendo del tamaño relativo del parámetro de impacto  $b$  y el radio atómico  $a$ . Colisión fuerte para  $b \sim a$ ; colisión suave  $b \gg a$  y colisión radiativa para  $b \ll a$  [1].

En una colisión dura la interacción entre electrones requiere la penetración del proyectil dentro de la “nube” de electrones atómicos, seguida de una colisión directa y singular con un electrón. Por tanto, la colisión entre un proyectil y un electrón debe describirse de acuerdo con la mecánica cuántica [25]. Tales colisiones fuertes dan como resultado que los electrones sean expulsados con una energía cinética apreciable. En el caso en que un electrón de la capa interna es expulsado como resultado de una colisión fuerte, entonces el átomo regresará a su estado fundamental ya sea por la emisión de rayos X característicos o por electrones Auger [23].

Si un electrón pasa por un átomo a una distancia considerable, la influencia del campo de fuerza de Coulomb de la partícula afecta al átomo en su conjunto, distorsionándolo, excitándolo a un nivel de energía más alto y, a veces, ionizándolo al expulsar un electrón de la capa más externa. El efecto neto es la transferencia de una cantidad muy pequeña de energía (unos pocos eV) a un átomo del medio absorbente. Las colisiones suaves son, con diferencia, el tipo más numeroso de interacción de electrones y representan aproximadamente la mitad de la energía transferida al medio absorbente. Aunque las colisiones duras son pocas en comparación con las colisiones suaves, las fracciones de energía de la partícula primaria que se gastan en estos dos procesos son generalmente comparables [16].

Cuando el parámetro de impacto de un electrón rápido es mucho menor que el radio atómico, la interacción de la fuerza de Coulomb se produce principalmente con el núcleo. En todas las interacciones, excepto entre un 2 o 3%, el electrón se dispersa elásticamente y no emite radiación de frenado ni excita el núcleo. Pierde sólo la cantidad insignificante de energía cinética necesaria para satisfacer la conservación del momento durante la colisión. Por tanto, éste no es un mecanismo para la transferencia de energía al medio absorbente, pero es un medio importante para desviar electrones. Es la razón principal por la que los electrones siguen trayectorias muy curvadas, especialmente en medios con alto número  $Z$ . Realizando cálculos por el método de

Monte Carlo sobre el transporte de electrones a través de la materia, a menudo se supone, por simplicidad, que las interacciones de pérdida de energía pueden tratarse por separado de las interacciones de dispersión (es decir, de cambio de dirección) [16].

En el otro 2-3% de los casos en los que el electrón pasa cerca del núcleo, se produce una interacción radiativa inelástica en la que se emite un fotón de rayos X. El electrón no sólo se desvía en este proceso, sino que cede una fracción significativa o inclusive todo su energía cinética al fotón, ralentizándose el proceso. Esta interacción también tiene una sección transversal atómica diferencial proporcional a  $Z^2$ , e inversamente a la masa de la partícula, para una velocidad de partícula dada. Aunque la producción de Bremsstrahlung es un medio importante de disipación de energía por electrones energéticos en medios con alto número  $Z$ , es relativamente insignificante en materiales con bajo  $Z$  (tipo tejido o agua) para electrones por debajo de 10 MeV. En ese caso no sólo la sección transversal de producción es baja, sino que los fotones resultantes son lo suficientemente penetrantes como para que la mayoría de ellos puedan escapar de objetos de varios centímetros de tamaño. Por lo tanto, normalmente se “llevan” su *energía cuántica* en lugar de gastarla en el medio mediante una interacción adicional [16].

Más allá de un determinado parámetro de impacto  $b_{max}$ , el proyectil no transfiere energía eficazmente a ningún componente del átomo y la respuesta se considera adiabática, es decir, los electrones atómicos se perturban, pero la transferencia de energía es insignificante desde el proyectil en movimiento al medio (la respuesta adiabática es que el electrón entra en movimiento lento, pero permanece unido al átomo), que para propósitos médicos no es considerado [25]. En otras palabras, para parámetros de impacto grandes  $b$ , la transferencia de energía puede ser menor que la energía de enlace del electrón orbital o menor que la energía de excitación mínima del electrón orbital dado. Por lo tanto, no es posible ninguna transferencia de energía para  $b > b_{max}$ , donde  $b_{max}$  corresponde a una transferencia de energía mínima  $W_{min}$ , denominada *energía de ionización/excitación media*  $I$  del átomo absorbente.

La energía media de ionización/excitación  $I$  corresponde a la cantidad mínima de energía  $W_{min}$  que se puede transferir, en promedio, a un átomo absorbente en una interacción de Coulomb entre una partícula cargada y un electrón orbital. Para un átomo dado, su energía de ionización/excitación media es siempre mayor que la energía de ionización del átomo, ya que  $I$  representa todas las ionizaciones atómicas posibles, así como las excitaciones atómicas, mientras que la energía de ionización atómica pertenece a la energía requerida para eliminar el electrón atómico menos unido (es decir, el electrón de valencia en la capa exterior) [1].

Los tipos de colisiones mencionados están diferenciados en lo que Bohr (1948) definió como *colisión nuclear*, llamada así debido al dominio de masa que tiene el núcleo en el átomo, en la que el proyectil interactúa con el átomo en su conjunto, y una colisión electrónica que es aquella entre el proyectil y un electrón atómico. Éste es el diferenciador entre colisiones suaves y duras dentro de la teoría clásica caracterizado por el parámetro de impacto. En la teoría cuántica (Bethe), la métrica que diferencia entre colisiones suaves y duras es la transferencia de momento (o, equivalentemente, la transferencia de energía) resultante de la colisión. Sin embargo, se puede considerar que las dos métricas de la mecánica clásica y cuántica están relacionadas mediante el principio de incertidumbre de Heisenberg [25].

En la descripción de Bethe, el átomo objetivo está en su estado fundamental y la probabilidad de que se produzca una transición como resultado de la colisión se calcula, utilizando la teoría de la perturbación cuántica, entre este estado fundamental y los estados excitados disponibles. El diferenciador entre colisiones suaves y duras en la teoría de Bethe viene dado por un valor específico de la transferencia de energía,  $Q$ , desde el proyectil al sistema atómico. Dentro del

cálculo, este valor fue algo arbitrario en el sentido de que se especificó de modo que  $Q$  no excede las energías de enlace de electrones atómicos, el momento asociado al proyectil debe limitarse de modo que su longitud de onda de De Broglie sea comparable a las dimensiones nucleares [25].

Las colisiones de tipo elásticas son aquellas para las cuales la suma de las energías cinéticas del proyectil y del objetivo son iguales antes y después de la dispersión. Cabe destacar que estas colisiones elásticas también incluyen aquellas en las que el proyectil pierde energía cinética y la transfiere al medio. Esta transferencia de energía se manifiesta como la energía de retroceso  $Q$  del objetivo. Como otro ejemplo, si la transferencia de energía del proyectil a un electrón atómico durante una dispersión de Coulomb es mucho mayor que la energía de enlace del electrón se puede considerar que el electrón previo a la colisión está casi libre y estacionario, con el resultado de que la colisión puede considerarse como elástico, sin embargo, haremos la distinción entre colisiones elásticas e inelásticas cuando exista una transferencia de energía al objetivo [25].

En una colisión con electrones atómicos enlazados, se considera que, el electrón atómico será excitado desde su estado fundamental  $|0\rangle$  al estado  $|f\rangle$  como resultado de la colisión. La transferencia de energía  $Q$  no necesita ser igual a la energía del estado excitado,  $E_f$ , ya que el electrón en retroceso no puede considerarse aislado como consecuencia de ser parte de un conjunto de electrones atómicos. Como resultado, la energía que se le transfiere puede compartirse entre los demás electrones atómicos [25]. Pero en la mayoría de los casos prácticos, es la energía de retroceso del electrón la que puede ser importante para ser expulsado como un rayo  $\delta$  (electrón secundario) para transportar energía a una distancia extendida desde el sitio de interacción [25].

### 2.3.5. Transferencia de energía y momento por un electrón a un objetivo

Las interacciones de partículas en los absorbentes se caracterizan por varios parámetros, en particular los que describen eventos de dispersión únicos son la sección transversal de dispersión diferencial y total, la distancia característica (camino libre) y el ángulo de dispersión. Un electrón que interactúa con diversas categorías posibles de interacciones da como resultado una gama de colisiones de interés en la física nuclear y la física médica.

La probabilidad o sección transversal para una colisión particular, así como el resultado de la colisión dependen de las propiedades físicas del proyectil (masa, carga, velocidad, energía cinética) y del objetivo estacionario (masa, carga).

En una interacción con un electrón proyectil con una energía cinética importante, se supone que los objetivos están en un estado estacionario e interactúan con el proyectil ya sea a través de una interacción de Coulomb cuando tanto el proyectil como el objetivo están cargados.

Las colisiones de dos partículas se clasifican en dos categorías: (1) *colisiones elásticas* y (2) *colisiones inelásticas*.

La dispersión elástica es un caso especial de colisión de dos partículas en la que los productos después de la colisión son idénticos a los productos antes de la colisión, es decir, las masas tanto del proyectil como del objetivo, la energía cinética total y el momento son iguales antes y después de la colisión. Una fracción mínima y generalmente insignificante de la energía cinética inicial del proyectil se transfiere al objetivo (energía de retroceso  $Q$ ).

En la dispersión inelástica, de manera similar a la dispersión elástica, las masas de los interactivos después de la colisión son idénticos a las masas iniciales; sin embargo, el proyectil incidente transfiere una parte de su energía cinética al objetivo no sólo en forma de energía

cinética sino también en forma de energía de *excitación intrínseca*  $E^*$ . La energía de excitación  $E^*$  puede representar:

- Excitación nuclear del átomo objetivo.
- Excitación atómica o ionización del átomo objetivo.
- Emisión de Bremsstrahlung por el proyectil.

En una colisión de impacto directo (colisión cercana) entre dos electrones ( $m_1 = m_2 = m_e$ ) se produce la transferencia de momento máxima posible  $\mathbf{p}_{max}$  y una transferencia de energía máxima posible  $W_{max}$  desde el proyectil (electrón energético) al objetivo (electrón orbital) [25].

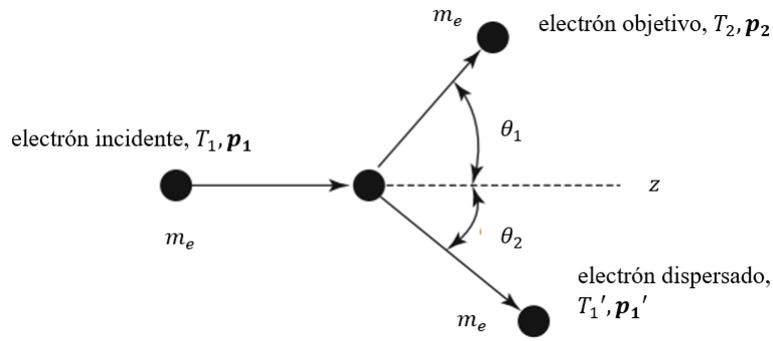


Figura 2.4: Cinemática de la interacción entre dos electrones [3].

Se indicará por  $v_1$ ,  $p_1$  y  $T_1$  a la velocidad, el momento lineal y la energía cinética inicial del electrón respectivamente antes de sufrir una colisión y sus correspondientes términos primados corresponden a la velocidad, el momento lineal y la energía después de una colisión; así mismo, se le asocian a la partícula objetivo, de modo que se define  $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$  y  $W = T - T'$  como la transferencia de momento lineal y energía después de una colisión, respectivamente. Es necesario recordar que para interacciones donde se consideren los efectos relativistas, se define  $\beta = v/c$  y  $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$ ; por tanto, el momento lineal y la energía cinética de los electrones incidentes se expresan como  $\mathbf{p} = \gamma\beta m_e c$  y  $T = (\gamma - 1)m_e c^2$  respectivamente. Para el análisis de energías y momentos se denota a  $\mathbf{P}$  como el 4-vector de energía-momento asociado a una partícula [3], esto es

$$\mathbf{P} = (Ec^{-1}, \mathbf{p}), \quad (2.17)$$

donde  $E$  y  $\mathbf{p}$  son la energía total (energía cinética y energía en reposo) y el momento respectivamente. El producto punto  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{P}$  es invariante bajo transformaciones de Lorentz y es su masa (en reposo) la que determina dicha cantidad invariante dada por [3]

$$\mathbf{P} \cdot \mathbf{P} = E^2 c^{-2} - p^2 = (mc)^2. \quad (2.18)$$

Se tomará la dirección de movimiento del proyectil como el eje  $z$  y establecemos el eje  $x$  de tal manera que el plano de reacción es el plano  $x - z$  tal como se muestra en la figura 2.4. El electrón energético antes de sufrir una colisión tiene un momento asociado  $\mathbf{p}_1$ , mientras que el electrón

atómico que se supone está en reposo tiene un momento igual a cero, por tanto, el 4-vector de energía-momento del proyectil (electrón energético) y el objetivo (electrón atómico) antes y después de la colisión están dados por

$$\mathbf{P}_1 = (E_1 c^{-1}, 0, 0, p_1), \quad (2.19a)$$

y

$$\mathbf{P}_2 = (E_2 c^{-1}, 0, 0, 0), \quad (2.19b)$$

i.e.,

$$\mathbf{P}'_1 = (E'_1 c^{-1}, p'_1 \sin \theta_1, 0, p'_1 \cos \theta_1), \quad (2.19c)$$

$$\mathbf{P}'_2 = (E'_2 c^{-1}, p'_2 \sin \theta_2, 0, p'_2 \cos \theta_2). \quad (2.19d)$$

De modo que por conservación de energía y momento

$$\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2 = \mathbf{P}'_1 + \mathbf{P}'_2. \quad (2.20)$$

A partir de la ecuación 2.20, los ángulos de dispersión de las partículas finales,  $\theta_1$  y  $\theta_2$ , están determinados únicamente por sus energías totales,  $E_1$  y  $E_2$ . De este modo

$$\begin{aligned} m_e^2 c^2 &= \mathbf{P}'_2 \cdot \mathbf{P}'_2 = (\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2 - \mathbf{P}'_2) \cdot (\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2 - \mathbf{P}'_2) \\ &= 3m_e^2 c^2 + 2E_1 E_2 c^{-2} - 2(E_1 E'_1 c^{-2} - p_1 p'_1 \cos \theta_1) - 2E_1 E'_1 c^{-2} \end{aligned} \quad (2.21)$$

De la ecuación anterior se tiene que

$$\cos \theta_1 = \left( \frac{T - W}{T} \frac{T + 2m_e c^2}{T - W + 2m_e c^2} \right)^{1/2}. \quad (2.22)$$

Claramente, por simetría, se obtiene una expresión correspondiente para el ángulo  $\theta_2$ , como

$$\cos \theta_2 = \left( \frac{W}{T} \frac{T + 2m_e c^2}{W + 2m_e c^2} \right)^{1/2}, \quad (2.23)$$

donde  $E_1 = T + m_e c^2$ ,  $E_2 = m_e c^2$ ,  $E'_1 = T - W + m_e c^2$  y  $E'_2 = W + m_e c^2$ , siendo  $W$  la energía cinética transferida al electrón atómico.

Así, para que se produzca la máxima transferencia de energía al electrón atómico se debe cumplir que  $\theta_2 = 0$ , de modo que

$$W_{max} = T. \quad (2.24)$$

El resultado anterior es válido para partículas que son distinguibles, sin embargo, para partículas que son indistinguibles, como es este caso, se supone que la partícula con mayor energía cinética es la partícula incidente [3] por lo tanto, la máxima transferencia de energía posible es

$$W_{max} = \frac{T}{2}. \quad (2.25)$$

### 2.3.6. Sección transversal de Rutherford de dispersión elástica

Muchas interacciones físicas que sufren las partículas pueden describirse y evaluarse con la ayuda de la tasa de transición entre el estado inicial y final del sistema particular que consiste en la partícula y el operador potencial que actúa sobre ella. En general, la velocidad de transición (también llamada velocidad de reacción) que denota la probabilidad de transición por unidad de tiempo depende del acoplamiento entre los estados inicial y final y la densidad de los estados finales [1].

La segunda regla de oro de Fermi se deriva de la teoría de la perturbación dependiente del tiempo y se utiliza ampliamente en física atómica, nuclear y de partículas para abordar una amplia variedad de interacciones, como transiciones atómicas, desintegración beta, desintegración gamma, dispersión de partículas (Rutherford, Mott) y reacciones nucleares [1].

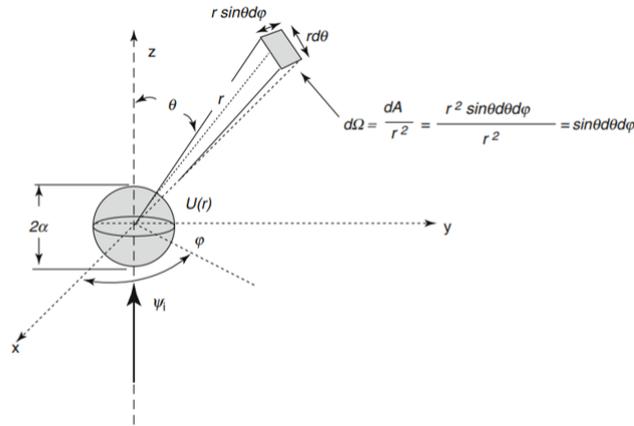


Figura 2.5: Geometría de interacción donde la función de onda de la partícula incide a lo largo del eje  $z$  [25].

Gran parte del conocimiento actual en física atómica, nuclear y de partículas proviene del análisis de experimentos de dispersión realizados con varias partículas como proyectiles que interactúan con un objetivo representado por átomos, núcleos u otras partículas más complejas. Un parámetro importante para describir una interacción de dispersión dada es la sección transversal diferencial  $d\sigma/d\Omega$  para la interacción de dispersión. La sección transversal diferencial que se definió como la probabilidad de dispersión en un ángulo sólido dado  $d\Omega$  (figura 2.5), en mecánica cuántica se expresa como una tasa de transición, dada por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{if}|^2 \rho(E_f) \quad (2.26)$$

donde  $M_{if}$  denota la amplitud del elemento de la matriz de transición (amplitud de probabilidad) y describe la dinámica de la interacción particular y  $\rho(E_f)$  la densidad de estados finales. La sección transversal diferencial para un proceso de dispersión se puede calcular con muchos grados de sofisticación, y el resultado del cálculo se acepta como válido cuando concuerda con el resultado experimental. La sección transversal diferencial a partir de la aproximación de Born se calcula bajo los supuestos de que únicamente ocurre un evento de dispersión; y los estados inicial y final de la partícula que sufre el evento de dispersión se describen mediante ondas planas [1]. La expresión anterior se conoce como *fórmula de colisión de Born* y es válida para la dispersión elástica provocada por un potencial de dispersión central esféricamente simétrico  $V(r)$  [1].

El modelo del átomo de Rutherford revolucionó la física en particular y la ciencia en general.

Desde entonces se llevaron a cabo otros experimentos de dispersión de tipo Coulomb, normalmente utilizando protones o electrones energéticos como proyectiles que bombardeaban núcleos atómicos o electrones orbitales con el objetivo de aprender más sobre la estructura atómica y nuclear. El requisito para que una partícula sea útil como agente para estudios nucleares es que su longitud de onda de De Broglie debe ser del orden del tamaño nuclear. La longitud de onda de De Broglie de una partícula puede ser expresada en términos de su energía cinética  $T$  como

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{T\sqrt{1 + 2E_0/T}}, \quad (2.27)$$

donde  $\hbar$  y  $c$  son la constante de Planck reducida y la velocidad de la luz, respectivamente y  $E_0$  es la energía de la partícula en reposo [1].

En una primera aproximación, la dispersión de electrones sobre un núcleo puede tratarse como la dispersión de Rutherford; sin embargo, al hacerlo, se ignoran otras interacciones, como: efectos de espín en interacciones magnéticas, transferencia de energía al núcleo del dispersor (retroceso del objetivo), efectos relativistas y cuánticos, y efectos del tamaño finito del núcleo, aunque para el tratamiento de electrones con el medio los resultados están en buena concordancia [1].

La sección transversal diferencial de Rutherford  $d\sigma_{Rut}/d\Omega$  se derivó clásicamente; sin embargo, también se puede derivar a partir de la mecánica cuántica de una manera breve y sencilla utilizando la fórmula de colisión de Born. La fórmula de colisión de Born que se introdujo de forma general puede modelarse para la dispersión de Rutherford en términos del potencial nuclear de Coulomb esféricamente simétrico  $V(r)$  [1].

En una colisión el electrón incidente se dispersa elásticamente con los átomos tanto por el núcleo como por los electrones atómicos que apantallan la carga nuclear. De tal forma, el electrón interactuará con un potencial de tipo Coulomb denominado *potencial de Wentzel* el cual considera el efecto de apantallamiento de los electrones atómicos y se expresa como

$$V \approx V_W(r) = \frac{Ze}{r} e^{-r/a_{TF}}, \quad (2.28)$$

donde

$$a_{TF} = \frac{C_{TF}a_0}{Z^{1/3}} \quad (2.29)$$

es la distancia de apantallamiento sugerida en el modelo atómico de Thomas-Fermi,  $a_0$  es el radio de Bohr y  $C_{TF} \simeq 0,88534$  es una constante definida por Fermi. Por tanto, la descripción de la dispersión elástica de electrones por núcleos apantallados debido a los electrones atómicos está dada por la sección transversal diferencial (DCS) obtenida del tratamiento de Wentzel-Moliere de la dispersión simple en el potencial nuclear apantallado tal como se muestra a continuación [26]:

$$\frac{d\sigma_{el,s}}{d\Omega} = Z(Z+1)r_e^2 \frac{(1-\beta^2)/\beta^4}{1-\cos\theta+2A}, \quad (2.30)$$

donde el subíndice  $s$  corresponde a la traducción en inglés de apantallamiento (screening),  $r_e$  es el radio del electrón y el parámetro de apantallamiento  $A$  está dado por

$$A = \left( \frac{\hbar}{2pa_{TF}} \right)^2 \left[ 1,13 + 3,76 \left( \frac{\alpha Z}{\beta} \right)^2 \right], \quad (2.31)$$

siendo  $\alpha$  la constante de estructura fina.

Estrictamente, la dispersión debe referirse al marco del centro de masa, pero como la masa del átomo más ligero es unos miles de veces la masa de un electrón no es habitual considerar el retroceso de la partícula dispersora. El electrón es una partícula cargada y tanto el núcleo con carga positiva como la nube de electrones atómicos con carga negativa influyen en la distribución de la dispersión.

Realizando la integración sobre el intervalo  $[0, 2\pi]$  y  $[0, \pi]$ , para considerar todas las posibles desviaciones del electrón incidente y recordando que  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ , la sección transversal total para la dispersión de electrones por un núcleo apantallado está dado por

$$\sigma_{el,s} = \iint \frac{d\sigma_{el,s}}{d\Omega} = \pi Z(Z+1)r_e^2 \frac{(1-\beta^2)/\beta^4}{A(A+1)} \quad (2.32)$$

De tal manera, la sección transversal total de dispersión elástica representa una medida de la interacción que sufre un electrón (de energía cinética  $T$ , velocidad  $v$ , carga  $e^-$  y masa  $m_e$ ) al dispersarse elásticamente a un cierto ángulo debido a un centro dispersor, en este caso un átomo apantallado de número atómico  $Z$  [26].

### 2.3.7. Tratamiento de interacciones inelásticas de electrones en medios de fase condensada

En las últimas décadas se han realizado estudios y evaluaciones de algunos elementos físicos importantes en los procesos de interacción de radiación primaria en medios de fase condensada. Los avances han sido grandes en esta área, en donde se ha acumulado y perfeccionado información experimental sobre la función de respuesta de muchos medios biológicamente importantes, como el agua líquida, el ADN, los aminoácidos, etc. Se han modelado las funciones de respuesta dinámica de medios condensados relevantes. Los fenómenos en las etapas física y pre-química de las interacciones de la radiación y el transporte de energía son abundantes, complejos y difíciles de estudiar de manera experimental. Aún se deben realizar múltiples estudios para lograr una comprensión integral de estos fenómenos. Aquí se analizarán las funciones de respuesta de los medios condensados y las secciones transversales de los procesos de transporte con el objetivo de comprender la interacción de la radiación ionizante en los medios condensados [27].

La absorción de la energía de cualquier radiación ionizante por los electrones de las moléculas que constituyen el medio invariablemente da como resultado la producción de muchos electrones que tienen una amplia gama de energías cinéticas. Estos electrones, a su vez, chocan con las moléculas y, por lo tanto, degradan su energía y posiblemente producen más electrones por ionización. La descripción de las consecuencias acumulativas de muchas colisiones para los electrones y el medio es el objetivo de la teoría del transporte de electrones. Este tema es importante porque proporciona un vínculo entre el conocimiento de los procesos de colisión individuales y los primeros eventos en radiobiología [27].

La teoría del transporte de electrones en un sentido amplio pertenece a la física estadística y a la física de altas energías, y ha sido estudiada durante muchos años en diversos contextos, como la conductividad eléctrica de la materia ordinaria y de los gases parcialmente ionizados (plasmas) [27].

Para tratar completamente el transporte de electrones en la materia condensada se deben incorporar efectos de la mecánica cuántica. Incluso en el dominio de la excitación electrónica, los efectos de la mecánica cuántica pueden ser apreciables para energías electrónicas por debajo de aproximadamente 100 eV. Sin embargo, el propósito de esta investigación es la interacción de electrones con longitudes de De Broglie no comparables al tamaño atómico o molecular, ya que, como se mencionó anteriormente, la longitud de onda de De Broglie de un electrón en el dominio de subexcitación es más larga, y la de un electrón en el dominio térmico es aún más larga en comparación con el tamaño atómico [27].

### 2.3.8. Fuerza de Oscilador Generalizada (GOS)

En este apartado se pretende describir brevemente la física de las interacciones de los electrones en la materia y su posterior implementación en códigos de simulación Monte Carlo de uso general. El estudio se limita a energías moderadamente altas, por encima de 1 keV. A estas energías, las simulaciones se pueden realizar sobre la base de un modelo de trayectoria en el que se supone que los electrones experimentan interacciones discretas con átomos (o moléculas) individuales del medio. Entre cada par de interacciones sucesivas, un electrón se mueve libremente, es decir, siguiendo una trayectoria recta. El medio considerado en este estudio es un gas isotrópico denso, lo que implica que la duración de cada vuelo libre es una variable aleatoria que sigue la distribución exponencial. Dentro del modelo de trayectoria, toda la información necesaria para simular el transporte de electrones está contenida en las DCS atómicas (o moleculares) para los diversos mecanismos de interacción de dispersión inelástica y emisión de Bremsstrahlung [13].

Los mecanismos dominantes de pérdida de energía para electrones con energías relativamente altas son las colisiones inelásticas, es decir, interacciones que producen excitaciones electrónicas, ionizaciones y emisión de radiación en el medio [3]. Un enfoque práctico, que parece satisfacer los requisitos de precisión de los cálculos de transporte de electrones de alta energía ( $T > 1$  keV), combina modelos atómicos de partículas independientes (por ejemplo, funciones de onda de Hartree-Fock-Slater) con teorías de la perturbación de primer orden (aproximación de Born con ondas planas o distorsionadas) [13].

La teoría cuántica de las colisiones inelásticas de partículas relativistas con átomos y moléculas individuales fue formulada por primera vez por Bethe (1930, 1932) sobre la base de la aproximación de Born de primer orden (onda plana). Posteriormente la teoría fue extendida a las colisiones inelásticas en materiales condensados discutida por Fano (1963). Los aspectos formales de la teoría cuántica para la materia condensada son bastante complicados; afortunadamente, los resultados son esencialmente equivalentes a los de la teoría dieléctrica clásica [3].

El enfoque utilizado aquí es a través de una descripción semiclásica en la que cada molécula o compuesto contiene  $Z$  electrones ligados armónicamente a una posición de equilibrio mediante fuerzas restauradoras lineales. Se supondrá que  $f_k$  de estos electrones tienen frecuencias angulares propias  $\omega_k$ . Como la fuerza del oscilador no debe tener dimensiones, ésta representa una medida de las contribuciones individuales de los  $Z$  electrones contenidos en la molécula o medio (ya sea a la absorción o a la emisión), de modo que, la suma ponderada de las intensidades del oscilador es igual al número total de electrones en el átomo

$$\sum f_k = Z, \quad (2.33)$$

En el contexto de la mecánica cuántica esta relación se conoce como regla de suma de Bethe, y las  $f_k$  se interpretan como intensidades de oscilador para una transición de estados; esta regla de suma es útil ya que, indica la “fuerza” relativa de cada transición particular en el medio [22].

Así mismo para considerar la interacción de las partículas cargadas con agua o cualquier otro medio condensado, la descripción utilizada para determinar la transición de estados tanto de la partícula incidente como del objetivo es a través de su función de respuesta dieléctrica. La *función de respuesta dieléctrica* (compleja) del medio  $\epsilon(k, \omega) = \epsilon_1(k, \omega) + i\epsilon_2(k, \omega_2)$  dependiente del vector de onda  $\mathbf{k}$  y la frecuencia angular  $\omega$ , se define en términos del campo eléctrico  $\mathbf{E}$  y el desplazamiento dieléctrico  $\mathbf{D}$  inducido por un proyectil cargado de densidad de carga  $\rho_p(r, t)$ . La magnitud relevante en este tipo de formalismos es la función de pérdida de energía (ELF)  $\text{Im}(-1/\epsilon) = \epsilon_2/(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)$  [4, 28]. Cuando la energía de la radiación incidente es muy alta se puede despreciar las energías de ligadura y las distribuciones de velocidades de todos los electrones del objetivo y describirlos como si estuvieran libres y en reposo (como es el caso de metales de conducción o compuestos con electrones débilmente enlazados). Las ecuaciones de conservación de la energía y el momento lineal permiten entonces estimar las energías y direcciones de salida más probables de las partículas tras una colisión binaria (electrón-electrón) [22]. La función de respuesta dieléctrica,  $\epsilon(k\omega)$ , y en particular la ELF, son las cantidades fundamentales que determinan para todas las fases la respuesta que tendrá el sistema al interactuar con una partícula energética determinada [4].

Las colisiones inelásticas de un proyectil con energía cinética inicial  $T$  y momento lineal  $\hbar\mathbf{k}$  provocan transiciones del átomo objetivo desde su estado inicial (base) a un estado final excitado, que puede estar ligado (excitación) o libre (ionización). El DCS depende de la pérdida de energía  $W$ , de la deflexión angular  $\Omega = (\theta, \phi)$  del proyectil y del estado final del objetivo. En la teoría del transporte de radiación, normalmente se utiliza el DCS de doble diferencial, obtenido a partir de sumar los estados atómicos finales degenerados, que describe completamente el efecto de las interacciones en el proyectil [13]. Usualmente, en lugar del ángulo de dispersión polar  $\theta$ , es conveniente utilizar la energía de retroceso  $Q$  definida por

$$Q(Q + 2m_e c^2) = (cq)^2 = c^2(p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \theta), \quad (2.34)$$

donde  $\mathbf{q}$  es la magnitud de la transferencia de momento y  $Q$  representa la energía cinética de un electrón que se mueve con un momento lineal igual a  $\mathbf{q}$  [3].

El DCS doble obtenido a partir de la aproximación de Born de onda plana (PWBA), expresada convenientemente en términos de  $W$  y la energía de retroceso  $Q$ , está dado por

$$\frac{d^2\sigma_{in}}{dWdQ} = \frac{2\pi T r_e^2}{(\gamma - 1)\beta^2} \left( \frac{1}{WQ(1 + Q/2m_e c^2)} + C_{tr} \right) \frac{df(Q, W)}{dW}, \quad (2.35)$$

donde el término  $C_{tr}$  representa la parte transversal de la interacción (intercambio de fotones virtuales) y el último factor es la fuerza del oscilador atómico generalizado (GOS). En el caso de medios en fase condensada la ELF está relacionada con la fuerza diferencial del oscilador generalizado de la forma [13]:

$$\frac{df(\hbar k = q, \hbar \omega = W)}{dW} = \frac{2W}{\pi(\hbar \omega_p)^2} \text{Im} \left[ -\frac{1}{\epsilon} \right] \quad (2.36)$$

donde  $\hbar \omega_p$ , es la energía del plasma, denotada por  $\Omega_p$

$$\Omega_p^2 = 4\pi N \hbar e^2 / m_e \quad (2.37)$$

el cual sólo depende de la densidad de electrones  $N$  en el medio [4].

Las propiedades dieléctricas del medio condensado también afectan la interacción transversal, dando lugar a la llamada corrección del efecto de densidad para proyectiles relativistas [13]. El término de corrección de densidad  $\delta_F$  es un término utilizado para tener en cuenta el efecto de polarización o densidad en medios condensados. Desde el punto de vista clásico el campo eléctrico (externo) del proyectil polariza el medio produciendo un campo eléctrico inducido que provoca la desaceleración del proyectil. El efecto influye en las interacciones de colisión suave (distante) al polarizar el medio absorbente condensado, disminuyendo así el poder de frenado de colisión del medio condensado en comparación con el mismo medio absorbente en estado gaseoso. Para partículas pesadas cargadas, la corrección de densidad es importante en energías relativistas e insignificante en energías intermedias y bajas; sin embargo, para los electrones y positrones desempeña un rol importante en las ecuaciones de poder de frenado en todas las energías [1].

El GOS también se puede utilizar para describir la energía de excitación (o ionización) media del sistema, el cual es un parámetro explícito dependiente del medio, obtenido a partir de la siguiente expresión [3]:

$$\int \ln W \frac{df(q, W)}{dW} dW = Z \ln I. \quad (2.38)$$

Se supone que el GOS se divide en contribuciones de los diferentes orbitales de electrones atómicos. Cada orbital  $k$  se caracteriza por el número  $Z_k$  de electrones en la capa y energía de ionización asociada  $U_k$ . Liljequist (1983) propuso modelar el GOS de cada capa de electrones atómicos como un solo “oscilador  $\delta$ ”, que es una entidad con un GOS simple dado por [3].

$$F_{k(Q,W)} = \delta(W - W_k) \Theta(W_k - Q) + \delta(W - Q) \Theta(Q - W_k), \quad (2.39)$$

donde  $\delta(x)$  es la función delta de Dirac y  $\Theta(x)$  es la función escalón. El primer término representa interacciones resonantes de baja  $Q$  (distantes), que se describen como una resonancia única en la energía de resonancia de un oscilador de orbital enlazado  $W_k$ . El segundo término corresponde a interacciones de  $Q$  grande (cercanas), en las que los electrones objetivo reaccionan como si estuvieran libres y en reposo ( $W = Q$ ) [3]. La mayor contribución a la sección transversal de ionización total surge de las excitaciones de baja  $W$  (suave), es decir, en el límite cuando  $Q \rightarrow 0$ .

Siguiendo a Sternheimer (1952), la energía de resonancia de un oscilador de un orbital ligado se expresa como

$$W_k = \sqrt{(bU_k)^2 + \frac{2}{3} \frac{f_k}{Z} \Omega_p^2} \quad (2.40)$$

donde  $b$  es un parámetro de ajuste que se determina a partir de la condición

$$\sum_k f_k \ln W_k = Z \ln I \quad (2.41)$$

### 2.3.9. Sección transversal de dispersión inelástica distante y cercana

El DCS para colisiones inelásticas obtenido del modelo GOS se puede dividir en contribuciones de interacciones longitudinales distantes, transversales distantes y cercanas.

$$\frac{d\sigma}{dW} = \frac{d\sigma_{dist,l}}{dW} + \frac{d\sigma_{dist,t}}{dW} + \frac{d\sigma_{cerc}}{dW}. \quad (2.42)$$

Los dos primeros términos del lado derecho son las contribuciones de las interacciones a través del campo de Coulomb instantáneo (longitudinal) y del intercambio de fotones virtuales (campo transversal), respectivamente, que se expresan como

$$\frac{d\sigma_{dist,l}}{dW} = \frac{2\pi T r_e^2}{(\gamma - 1)\beta^2} \sum_k f_k \frac{1}{W_k} \ln \frac{W_k Q_- + 2m_e c^2}{Q_- W_k + 2m_e c^2} \delta(W - W_k) \Theta(W_k - Q_-), \quad (2.43)$$

$$\frac{d\sigma_{dist,t}}{dW} = \frac{2\pi T r_e^2}{(\gamma - 1)\beta^2} \sum_k f_k \frac{1}{W_k} \ln \left[ \frac{1}{1 - \beta^2} - \beta^2 - \delta_F \right] \delta(W - W_k) \Theta(W_k - Q_-), \quad (2.44)$$

donde  $\delta_F$  es la corrección de densidad de Fermi que, como se mencionó anteriormente, tiene en cuenta la polarización del medio absorbente y es importante cuando las energías cinéticas altas de la partícula cargada atraviesan el absorbente y  $Q_-$  la mínima energía de retroceso permitidas cinemáticamente dada por [1]:

$$Q_- = \sqrt{[\sqrt{T(T + 2m_e c^2)} - \sqrt{(T - W)(T - W + 2m_e c^2)}]^2 + m_e^2 c^4 - m_e c^2} \quad (2.45)$$

Para interacciones cercanas entre electrones el DCS debe corregirse para tener en cuenta la indistinguibilidad del proyectil y los electrones objetivo que, para interacciones distantes, el efecto de esta corrección es pequeño y ha sido despreciado. Así, la DCS de pérdida de energía por colisiones binarias de electrones con electrones libres en reposo, obtenida a partir de la aproximación de Born, viene dada por la fórmula de Møller (1932) [3]:

$$\frac{d\sigma_{cerc}}{dW} = \frac{2\pi T r_e^2}{(\gamma - 1)\beta^2} \sum_k f_k \frac{1}{W^2} F^-(T, W) \Theta(W - W_k), \quad (2.46)$$

donde

$$F^-(T, W) = 1 + \left( \frac{W}{T' - W} \right)^2 - \frac{W}{T' - W} + a \left( \frac{W}{T' - W} + \frac{W^2}{T'^2} \right). \quad (2.47)$$

siendo

$$a \equiv \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^2$$

En colisiones cercanas con electrones enlazados, la función de onda del electrón proyectil se distorsiona por el campo electrostático del átomo o molécula objetivo, lo que produce un aumento en la energía cinética efectiva del proyectil. Para explicar parcialmente este “efecto Coulomb”, el factor  $F^-(T, W)$  de cada término en el lado derecho de la ecuación (2.47) se calcula con la energía cinética modificada  $T' = T + U_k$ . El reemplazo de  $T$  por la *energía cinética efectiva*  $T'$  produce secciones transversales que concuerdan mejor con los resultados de mediciones experimentales y de cálculos más elaborados [3]. En consecuencia, la transferencia de energía máxima permitida en colisiones cercanas con electrones en la capa  $k$ -ésima se establece igual a

$$W_{max} = \frac{T + U_k}{2} \quad (2.48)$$

Integrando las ecuaciones (2.43), (2.44) y (2.46) en el intervalo  $[0, W_{max}]$  se obtienen las contribuciones de interacciones distantes longitudinales y transversales, esto es,

$$\sigma_{dist,l} = \frac{2\pi T r_e^2}{(\gamma - 1)\beta^2} \sum_k f_k \frac{1}{W_k} \ln \frac{W_k Q_- + 2m_e c^2}{Q_- W_k + 2m_e c^2} \Theta(W_{max} - W_k), \quad (2.49)$$

$$\sigma_{dist,t} = \frac{2\pi T r_e^2}{(\gamma - 1)\beta^2} \sum_k f_k \frac{1}{W_k} \ln \left[ \frac{1}{1 - \beta^2} - \beta^2 - \delta_F \right] \Theta(W_{max} - W_k), \quad (2.50)$$

y la integración de la sección eficaz para interacciones cercanas es

$$\sigma_{cerc} = \frac{2\pi T r_e^2}{(\gamma - 1)\beta^2} \sum_k f_k \int_{W_k}^{W_{max}} \frac{1}{W^2} F^-(T, W) dW. \quad (2.51)$$

La sección transversal para la ionización de una capa unida disminuye rápidamente con la energía de ionización del orbital  $U_k$  (porque están prohibidas las transferencias de energía menores que  $U_k$ , lo que promovería el electrón objetivo a estados ocupados). Como consecuencia, las colisiones ocurren preferentemente con electrones en los orbitales exteriores. La ionización de la capa interna por impacto del electrón es un proceso relativamente improbable. Cabe señalar que el modelo GOS es demasiado tosco para proporcionar una descripción precisa de la ionización de la capa interna, aun así, es notable la buena concordancia de secciones transversales obtenidas y las de la base de datos numérica [3].

### 2.3.10. Sección transversal de dispersión radiativa

La emisión Bremsstrahlung es un tipo de radiación electromagnética producida por el cambio de velocidad (aceleración o desaceleración) de los electrones energéticos causada por colisiones inelásticas con núcleos de átomos absorbentes [1]. En cada evento de Bremsstrahlung, un electrón con energía cinética  $T$  genera un fotón de energía  $W$ , que como se mencionó anteriormente puede tomar valores en el intervalo  $[0, T]$ . El proceso está descrito por un DCS atómico en la pérdida de energía  $W$ , la dirección final del proyectil y la dirección del fotón emitido [3].

Para una partícula cargada acelerada, los campos eléctricos y magnéticos no estáticos no pueden ajustarse de tal manera que no se irradie energía desde la partícula cargada. Como resultado, una partícula cargada acelerada o desacelerada emite parte de su energía cinética en forma de fotones, lo que se conoce como radiación Bremsstrahlung. Los campos eléctricos y magnéticos asociados con partículas cargadas aceleradas se calculan a partir de los llamados potenciales de Lienard-Wiechert. Para determinar los campos en el tiempo  $t$ , los potenciales deben evaluarse para un tiempo anterior (llamado tiempo retardado), con la partícula cargada en la posición retardada apropiada en su trayectoria [1].

La sección eficaz diferencial por Bremsstrahlung, es decir, la probabilidad de emisión de un fotón con energía  $W$  dado un electrón incidente con energía  $T$  está dado por

$$\frac{d\sigma_{br}}{dW} = Z^2 \beta^2 \frac{1}{W} \chi(Z, T, \kappa), \quad (2.52)$$

donde  $\kappa$  es la *energía del fotón reducida* definida como  $\kappa \equiv W/T$ , el cual toma valores entre 0 y 1. El término  $\chi(Z, T, \kappa)$  es conocido como la *sección eficaz diferencial de Bremsstrahlung escalada*. Seltzer y Berger (1985, 1986) produjeron tablas extensas de DCS escalado para todos los elementos con número atómico  $Z$  entre 1 y 92 y para energías de electrones de 1 keV a 10 GeV. Tabularon los DCS escalados para la emisión en el campo (apantallado) del núcleo (electrón-núcleo) y en el campo de los electrones atómicos (electrón-electrón) por separado, así como su suma, el DCS escalado total. Cabe mencionar que, las desviaciones angulares del proyectil se consideran explicadas por la dispersión elástica DCS y, en consecuencia, la dirección del movimiento del proyectil se mantiene inalterada en la simulación de eventos radiativos [3].

## 2.4. Propiedades fisicoquímicas del agua

El agua intracelular, que constituye aproximadamente el 80 % de la masa de la mayoría de las células vivas, ha sido el foco de muchas investigaciones. Por varias razones, sus propiedades han sido difíciles de determinar. Algunos métodos físicos no se pueden aplicar directamente al interior de la célula. Otro problema es la interferencia de los constituyentes macromoleculares de las células y del agua alrededor de la región celular; por lo que la interpretación de los datos a menudo se complica por el hecho de que se trabaja con un sistema multicomponente en el que existen muchos tipos de interacciones con el agua. Estas complicaciones, así como la naturaleza compleja del agua líquida, ha llevado a que diferentes investigadores hayan llegado a diversas conclusiones sobre las propiedades del agua intracelular. Esta sección se centra en la recopilación de la información más aceptada sobre las propiedades fisicoquímicas de las moléculas de agua que comprenden las células biológicas [29].

Actualmente no se dispone de una descripción dinámica y energética base del agua líquida, debido a las interacciones débiles que provocan que el medio no tenga una estructura bien definida. A falta de un tratamiento teórico convincente, se han dedicado muchos esfuerzos a representar el

líquido como un compuesto de varios agregados moleculares. La discusión sobre el agua en los sistemas biológicos se centra en las moléculas de agua que se encuentran en las proximidades de superficies macromoleculares; se ha descubierto que estas moléculas de agua denominada “agua enlazada”, tienen propiedades que son detectablemente diferentes de las del medio, por ejemplo, exhiben una presión de vapor más baja, una movilidad más baja, un punto de congelación muy reducido, entre otras, suponiendo que las propiedades radiológicas son las mismas que las del agua natural. Sin embargo, las propiedades medidas pueden cambiar continuamente a medida que aumenta la distancia desde la superficie macromolecular, lo que hace que la determinación de la cantidad de agua enlazada sea algo ambigua. A pesar de estas dificultades, se estima que las moléculas de agua adyacentes a las macromoléculas tienen propiedades suficientemente diferentes como para que sea útil la distinción entre agua enlazada y el agua restante, denominada “agua en masa” [29].

Para interpretar las propiedades del agua en sus diferentes estados de agregación se debe comprender primero la molécula de agua. En esta sección la descripción de una molécula de agua aislada se trata en términos de propiedades que se han deducido de experimentos y en términos de propiedades deducidas de la teoría electrónica. El primer grupo de propiedades se basa en mediciones realizadas en vapor de agua a presiones suficientemente bajas o altas temperaturas para garantizar que las interacciones entre moléculas estén en gran medida ausentes. Estas propiedades incluyen, por ejemplo, las posiciones relativas de los núcleos y la polaridad de la molécula en su conjunto; pero no incluyen mucha información sobre la disposición de la carga electrónica dentro de la molécula. Por tanto, para obtener una imagen más detallada de la molécula de agua debemos recurrir a la descripción dada por la teoría. Esto proporciona detalles tales como la forma de la nube de agua con carga electrónica [30].

Los experimentos de Cavendish y Lavoisier en la década de 1780 establecieron que el agua está compuesta de dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno. Dumas, en 1842, descubrió que la proporción de los pesos combinados de hidrógeno y oxígeno en el agua es casi de 2 a 16 [30]. En algunas sustancias como el agua, el centro de masa de los electrones de cada molécula normalmente no coincide con el centro de masa de los núcleos; por lo tanto, se produce un exceso de concentración de carga negativa en un lado de la molécula y un exceso de carga positiva en el lado opuesto. La atracción intermolecular surge entonces simplemente de una orientación adecuada de las moléculas adyacentes; esta atracción se denomina “fuerza polar” [15]. La disposición de los electrones en la molécula de agua le comunica asimetría eléctrica por la diferente electronegatividad del hidrógeno y del oxígeno. La electronegatividad es la capacidad de un átomo para atraer los electrones compartidos en un enlace covalente. Como el oxígeno es más electronegativo que el hidrógeno, es más probable que los electrones, que poseen carga negativa, estén más cerca del átomo de oxígeno que del de hidrógeno, lo cual provoca que cada átomo de hidrógeno tenga una cierta carga positiva que se denomina carga parcial positiva, y el de oxígeno, una negativa, ya que tiene los electrones más cerca. Esto significa que el agua es una molécula polar, pues tiene una parte o polo negativo y otra positivo, aunque el conjunto de la molécula es neutro. De este carácter polar derivan casi todas sus propiedades fisicoquímicas y biológicas.

Los enlaces químicos surgen cuando los electrones externos combinados de dos o más átomos adyacentes pueden emprender un movimiento coordinado tal que su energía total es menor de la que sería si los átomos permanecieran separados. La formación del enlace puede implicar un exceso de concentración de electrones en algunos átomos y un defecto equivalente en otros átomos. La energía liberada por la formación de un enlace químico es del mismo orden de magnitud que las diferencias de energía de los estados estacionarios de los electrones externos en un átomo, es decir, del orden de unos pocos electronvoltios [15]. Mediante análisis espectroscópico y de rayos X se ha determinado que el ángulo de enlace entre el hidrógeno y el oxígeno es de  $104.5^\circ$ , y la

distancia media entre los átomos de hidrógeno y oxígeno, que es de 96.5 pm.

Cuando una molécula de agua entra en exposición a la luz o radiación ionizante, el agua puede sufrir una serie de transformaciones que involucran excitaciones electrónicas, ionización de especies solvatadas y formación de radicales libres y electrones acuosos. Estos procesos ocurren, por ejemplo, en células biológicas, así como en el agua atmosférica. Muchas de ellas se rigen, al menos en parte, por la naturaleza de la transferencia de electrones y las energías de enlace en soluciones acuosas. De ahí una comprensión detallada de la interacción de radiación con el agua, requiere un conocimiento preciso del potencial de ionización del líquido [31].

El potencial de ionización (IP) o energía de ionización es la propiedad más fundamental determinada por la espectroscopia de fotoelectrones. Los IP de gases y sólidos han sido ampliamente identificados desde el descubrimiento del efecto fotoeléctrico. Sin embargo, el acceso a esta información en líquidos se ha visto obstaculizado por complicaciones experimentales. Es bien sabido que el estudio de moléculas, sales y otros medios solubles dentro de un ambiente acuoso es fundamental para una mejor comprensión de estas partículas en su entorno natural. Por lo tanto, es de gran importancia desarrollar técnicas para una comprensión más profunda de la estructura electrónica del agua y otros disolventes. El progreso experimental en la comprensión de las propiedades físicas básicas del agua líquida también sienta las bases para futuros avances en la comprensión de todo tipo de dinámica electrónica en soluciones acuosas [32].

Múltiples predicciones teóricas del IP del agua a partir de cálculos cuánticos han producido resultados contradictorios dependiendo de los modelos y métodos de estructura electrónica empleados. Sin embargo, mediciones directas del IP del agua líquida obtenidas a partir de espectroscopia fotoelectrónica, del enlace molecular más bajo (1b1) arrojó un valor de 10.06 eV, mientras que estudios más recientes condujeron a un valor ligeramente menor de 9.9 eV, lo que llevó a establecer el valor en aproximadamente 10 eV [31]. Por otra parte, datos proporcionados por el NIST (National Institute of Standards and Technology) establecen que la energía de ionización de una molécula de agua es de aproximadamente 12,6 eV, mientras que la energía de excitación mínima de una molécula de agua es de aproximadamente 7,5 eV [1].

Sin embargo, para describir con cierta precisión la calidad de la radiación incidiendo en agua y en general sobre cualquier medio, es decir la cantidad de energía transferida al medio (poder de frenado), debe ser introducido el concepto de energía de excitación media  $I$ . La energía de excitación media o potencial de ionización promedio es un parámetro que mide la facilidad con la que una partícula proyectada puede depositar energía en el material objetivo; en otras palabras,  $I$  es una medida de la capacidad de un sistema objetivo para absorber energía cinética de un proyectil. Por tanto,  $I$  es fundamental para la determinación del poder de frenado del objetivo [33]. La energía de excitación media, que es específica de cada medio y su estado de agregación, es válida sólo para partículas con energías superiores a la energía de enlace de la capa interna más profunda de la molécula constituyente [34] y aunque puede ser obtenida teórica y experimentalmente los resultados de ambos métodos difieren en un porcentaje sutil. De manera teórica y utilizando como base el modelo de la función de respuesta dieléctrica, la energía de excitación media del agua obtenida es  $I = 77,81$  eV, pero superior al valor actualmente recomendado de 75 eV proporcionado por el ICRU. Por otro lado el valor de  $I$  obtenido experimentalmente ha sido 79.75 eV, el cual difiere en aproximadamente un 2.5% del valor obtenido por el modelo de la función dieléctrica y en un 6% del valor dado por el ICRU [33].

A diferencia de la fase de vapor, no existen datos directos para el agua líquida en relación con las colisiones disociativas de unión de electrones, los patrones de fragmentación y desexcitación de moléculas excitadas y las secciones transversales para transiciones prohibidas. De ahí que la validez

de las aproximaciones en los cálculos de la estructura del recorrido para el agua líquida no puedan compararse directamente con datos experimentales. Sin embargo, los rendimientos informados de electrones hidratados en tiempos tempranos, junto con otra información radioquímica, permiten realizar comprobaciones de coherencia. Los datos disponibles sobre la modificación del poder de frenado debido a diferencias de fase son todavía demasiado vagos y contradictorio para ser de mucha utilidad en la obtención de las secciones transversales diferenciales para electrones e iones en el líquido [27].

#### 2.4.1. Equivalencia radiológica agua-tejido

En la dosimetría de la radiación, la radioterapia y el diagnóstico médico, se deben realizar mediciones con maniqués equivalentes de tejido y materiales dosimétricos para preestimar la distribución de dosis aproximada y las propiedades radiológicas de los materiales. Lo que interesa a la dosimetría de la radiación es la energía de la radiación absorbida durante el período de exposición por el objetivo, es decir, el órgano o el tejido. Es esencial realizar estudios de dosimetría cuando la radiación se utiliza para tratar el cáncer a fin de administrar una dosis suficiente a los tejidos objetivo sin administrar una cantidad excesiva de dosis que pueda afectar a otros tejidos sanos. También es esencial realizar estudios dosimétricos para monitorear la exposición acumulativa de las personas que manipulan materiales radiactivos y/o trabajan en el área de radiación para minimizar los problemas de salud relacionados con la exposición a la radiación [35].

Entre los parámetros que representan la interacción de la radiación con los materiales, cabe señalar que el número atómico efectivo  $Z_{ef}$  es uno de los parámetros más convenientes. Representa las características de un material multielemento, especialmente en el campo de radiación, dependiendo de los números atómicos de los elementos constituyentes y la energía de radiación incidente. Más específicamente, el parámetro  $Z_{ef}$  se ha utilizado ampliamente en tres subcampos de la física médica, como la imagen médica, la radioterapia y la protección radiológica, no sólo con fines dosimétricos y de diagnóstico, sino también con fines de protección contra la radiación [35].

Para la dosimetría interna, una composición casi equivalente al tejido puede tener ventajas para determinar la deposición de energía dentro del cuerpo. El número atómico efectivo,  $Z_{ef}$ , de un medio es el número atómico de un elemento único hipotético que atenúa la radiación a la misma velocidad que el medio en cuestión [1]. Por ejemplo, los números atómicos efectivos del tejido y del agua son 7.53 y 7.42, respectivamente [18].

Un punto importante que se debe resaltar es, el hecho que el número atómico guarda una relación de proporcionalidad con la energía de excitación media  $I$ . Por mencionar algunas se tiene que las energías de excitación media del tejido adiposo ( $\rho = 0.92 \text{ g/cm}^{-3}$ ), musculo esquelético, musculo estriado (ambos con  $\rho = 1.04 \text{ g/cm}^{-3}$ ) son 63.2, 75.3 y 74.7 eV respectivamente. Se puede notar que los valores de las energías de excitación medias de tejidos del cuerpo humano caen dentro de un rango entre 73 y 75 eV, similar a la energía de excitación media del agua ( $\rho = 1.00 \text{ g/cm}^{-3}$ ), con la excepción del tejido adiposo (alto contenido de hidrógeno). Dada la similitud de los valores de  $I$  y la densidad, los valores del poder de frenado  $S$  también deben ser muy similares. Esto es muy conveniente, ya que significa que la pérdida de energía de los electrones a lo largo de una distancia determinada en el cuerpo se puede derivar de la del agua simplemente multiplicándola por la densidad, asumiendo que las pérdidas de radiación también son muy similares [23].

Cabe señalar que el uso de cualquier material que no sea agua aumentará las incertidumbres de la medición (aunque puede disminuir las incertidumbres posicionales), y es por eso que la recomendación principal es usar agua siempre que sea posible para la calibración del haz de radiación. Otros materiales deben probarse en el momento de la compra para garantizar que su

densidad y espesores de losa o lámina sean los esperados. Se debe comprobar su planitud, ya que las láminas deformadas pueden introducir importantes espacios de aire en la trayectoria de la radiación. Además, el usuario debe demostrar que el maniquí realmente es equivalente en agua comparando los resultados de las mediciones realizadas en el maniquí con las realizadas en agua real. Si es necesario, se pueden aplicar correcciones por diferencias de densidad [23].

Para simular los procesos de transporte de radiación en el cuerpo humano, los científicos desarrollaron maniqués hechos de materiales que imitan tejidos. El maniquí debe estar hecho de un material que absorba y disperse la radiación del mismo modo que el tejido real. Spies demostró que el material del maniquí debe tener la misma densidad que el tejido y contener la misma cantidad de electrones por gramo [36]. Si el maniquí puede tener la misma composición atómica que el tejido, esos parámetros del maniquí son los mismos que los del tejido. Sin embargo, no es fácil lograr que la composición atómica del maniquí sea exactamente la misma que la del tejido. Por lo tanto, como pauta para el material equivalente a tejido, los físicos esperan que el material tenga una densidad de masa, un número atómico efectivo y una densidad electrónica similares a los del tejido real. El razonamiento para el enfoque de la interacción del medio sustituto con electrones energéticos es que el poder de frenado de los electrones también es proporcional al número de electrones atómicos, debido a la interacción dual de electrones proyectados y electrones del medio. De ahí que la densidad electrónica del material sea otro parámetro importante para representar las características radiológicas de cada material [36].

El agua fue el primer material que Kienbock utilizó como sustituto de los tejidos en las mediciones de radiación. Baumeister introdujo la cera en 1923. La primera formulación sólida, llamada cera de Siemens, compuesta de cera de parafina y óxido de magnesio como filtro corrector, fue reportada por Ott en 1937. Posteriormente se introdujeron varios productos similares a base de cera en Europa y América del Norte, incluidos MixD, Harris Wax y M3. A partir de estos últimos materiales se han construido muchos maniqués compuestos por simples láminas apiladas o estructuras más complejas parecidas a cuerpos [36].

Los sustitutos de tejido producidos antes de 1970 fueron diseñados para simular predominantemente músculos, huesos, pulmones y grasa. Las fuentes de datos fiables sobre la composición elemental y las densidades de masa de los tejidos reales eran limitadas. Las fuentes principales incluyeron los informes de Woodard, que proporciona la composición elemental del hueso cortical, y un informe del ICRU, que proporciona la composición elemental del músculo estriado y el hueso compacto (fémur). Desafortunadamente, hubo un desacuerdo entre las fuentes mencionadas sobre la composición del hueso, lo que dificultó el trabajo de una simulación ósea [36].

Por esta razón, se hizo un esfuerzo por determinar cuáles de los elementos presentes en diversos tejidos desempeñan un papel crítico en el proceso de deposición de energía al interactuar con diversas modalidades de radiación. Durante esta evaluación, se han calculado datos básicos de interacción para fotones y electrones desde 10 keV hasta 100 MeV, protones desde 1 hasta 1000 MeV y neutrones desde 100 eV hasta 30 MeV. Tal como se señaló anteriormente, la dispersión de la radiación incidente, sean partículas cargadas o partículas neutras, dependen principalmente del número atómico  $Z$  de los constituyentes y de los electrones por kilogramo del tejido. Dado que el hidrógeno tiene el doble de densidad electrónica que otros elementos, éste y los constituyentes con alto contenido de  $Z$  de un tejido son los elementos críticos. En consecuencia, su porcentaje en masa en el sustituto debe coincidir con el de un tejido real con la mayor precisión posible [36].

La irradiación de tejidos con haces de partículas cargadas, como electrones y protones, conduce a la deposición de energía mediante procesos de colisión y radiación. Las interacciones de colisión de partículas incidentes con los electrones del material objetivo son la principal causa de pérdida

de energía para electrones  $< 500$  keV. Las pérdidas radiativas (Bremsstrahlung) se vuelven importantes para energías mucho más altas, por tanto, un maniquí se considera como sustituto útil del tejido sólo si sus características de radiación caen dentro del 5 % de las del tejido real para el cual fue diseñado [36].

De este modo dos materiales absorberán y dispersarán cualquier tipo de radiación de la misma manera, sólo si las siguientes cantidades son idénticas entre ellos [36]:

1. La atenuación másica del fotón y coeficientes de absorción de masa.
2. Los poderes de frenado másico de electrones y de dispersión angular
3. Los poderes de frenado másico para partículas pesadas cargadas e iones pesados.
4. Las secciones transversales de interacción de neutrones y factores de Kerma.
5. Las densidades de masa de los dos materiales deben ser las mismas. A continuación, se presenta una breve descripción de los métodos de formulación.

El agua es el medio favorito para medir dosis por varias razones. El agua es casi equivalente a un tejido y es económica (o fácilmente disponible). Además, se puede escanear un detector de radiación en el agua para medir dosis en puntos espaciados muy estrechos, recordando que la equivalencia del agua con el tejido depende de la energía de la radiación y del tejido con el que se compara el agua. Para fotones en el rango de energía entre 1 KeV y 20 MeV se encontró que los coeficientes de atenuación de masa del agua, el músculo y el tejido adiposo son un 1 % mayores que los del músculo y el tejido adiposo para energías  $> 0,1$  MeV. Sin embargo, en el rango de energía entre 0,01 y 0,1 MeV los coeficientes de atenuación de masa del agua son menores hasta un 1,5 % con los del músculo y el tejido adiposo [36].

Con base en los criterios anteriores, es obvio que sólo el material con los mismos constituyentes elementales y en la misma proporción en masa que el tejido real correspondiente puede denominarse equivalente de tejido para todas las modalidades de radiación. Se formularon varios de estos materiales, particularmente en fase líquida y gel. Si un sustituto es elementalmente correcto y tiene la densidad aparente correcta, la única fuente de error en los cálculos de la dosis absorbida a partir de mediciones en el material maniquí serán las diferencias de fase debidas a las uniones químicas. Estos errores son difíciles de evaluar debido a la falta de datos extensos, pero se han encontrado pequeños y bastante insignificantes en la dosimetría de radiación convencional. Rossi y Failla, quienes introdujeron por primera vez el método de equivalencia intentaron reproducir una fórmula aproximada para el tejido blando  $(C_5 H_{40} O_{16} N)_n$ . Formularon una mezcla de agua, glicerol, urea y sacarosa, pero su publicación no explicaba cómo llegaron a su formulación. Frigerio *et al.* utilizaron agua como material base y luego seleccionaron un compuesto que pudiera disolverse en ella en proporciones tales que satisficieran la relación molar del CHNO. Consideraron cada compuesto como la suma de dos componentes uno de los cuales era agua; por ejemplo, el glicerol  $C_3 H_8 (H_2 O)_3$  se puede escribir como  $C_3 H_8 O_3$ . Utilizando este enfoque, produjeron un sistema líquido con una composición elemental casi idéntica a la del tejido muscular [36].

El método de equivalencia elemental se aplicó posteriormente con modificaciones menores y, como resultado, se formularon más de 35 líquidos y geles equivalentes a tejido. Durante este trabajo se utilizaron las siguientes restricciones [36]:

1. Una vez seleccionado el material base, los aditivos deben elegirse de una biblioteca de compuestos que no sean tóxicos ni corrosivos, explosivos, volátiles ni cancerígenos.

2. El número de componentes debe mantenerse al mínimo.
3. La proporción en masa de cada componente de un sustituto de tejido debe estar dentro del 0,5 % de la del tejido real, excepto para el hidrógeno, para el cual el acuerdo debe estar dentro del 0,1 %.

En resumen, se puede observar que los procedimientos modernos de garantía de la calidad radiológica requieren técnicas de dosimetría fiables y precisas. La dosimetría desempeña un papel esencial en la mayoría de las aplicaciones clínicas que implican radiación ionizante, proporcionando una verificación fiable del tratamiento. Hoy en día, las determinaciones de dosis deben referirse a la dosis absorbida en agua a una profundidad de referencia en un espectro de agua homogéneo. Idealmente, el material del maniquí debe ser equivalente al agua; en otras palabras, debe tener las mismas propiedades de absorción y dispersión que el agua. Por lo tanto, los sistemas de dosimetría basados directamente en mediciones en el agua resultan en alternativas convenientes ya que pueden evitar o minimizar las incertidumbres derivadas de las conversiones de dosis absorbidas entre diferentes materiales. En este contexto, los dosímetros en gel aparecen como la opción más adecuada para diseñar e implementar dosímetros capaces de realizar mediciones directas de la dosis absorbida en medios acuosos. Además, entre las diferentes técnicas de dosimetría disponibles, sólo los geles son capaces de realizar un mapeo de dosis en 3D. Hay dos tipos principales de geles dosimétricos, a saber, el gel Fricke (Schreiner, 2006) y el gel polimérico (Baldock *et al.*, 2010), y aunque este último presenta la ventaja de tener una estabilidad posterior a la irradiación a largo plazo, los dosímetros en gel Fricke requieren procedimientos de fabricación menos complicados y reactivos químicos significativamente más baratos [37]. En términos de interacción radiación-materia, dos materiales diferentes pueden considerarse exactamente equivalentes si las cantidades físicas fundamentales correspondientes, como la sección transversal y la potencia de frenado, son idénticas dentro del rango de energía de interés. Claramente, las cantidades físicas fundamentales influyen en la energía y las distribuciones angulares de las partículas primarias y secundarias dentro del maniquí y, en consecuencia, en las correspondientes distribuciones de dosis [37].

#### 2.4.2. Respuesta dieléctrica del agua

En el marco de la teoría de perturbaciones estándar, las secciones transversales basan los parámetros de interacción en la respuesta dieléctrica del material considerado. Este método permite tener en cuenta la fase líquida del agua e incluir información pertinente sobre las diferentes fases del agua [13, 27, 38]. Estas secciones transversales de interacción se calculan en el marco de la aproximación de Born en el caso no relativista y en el marco de la aproximación de Bethe en el caso relativista. Ambas aproximaciones son teorías de perturbación de primer orden y son válidas para energías de electrones incidentes  $T$  mucho mayores que las energías de enlace  $E_u$  de los átomos o moléculas considerados, *i.e.*,  $T \gg E_u$ . Para energías de electrones incidentes bajas, se deben introducir correcciones que tengan en cuenta efectos de orden superior. Además, en el caso del impacto de un electrón, se debe considerar la indistinguibilidad del electrón entrante y el electrón objetivo. En la aproximación de Born o Bethe, las secciones transversales dependen de la función de pérdida de energía, por tanto, se modela la función de respuesta dieléctrica ajustando los datos a la información experimental [13, 38]. Las secciones transversales de dispersión elástica se calculan utilizando modelos semiempíricos y se corrigen según las propiedades de la fase líquida. Las secciones transversales totales se utilizan para determinar la distancia hasta la siguiente colisión y para determinar el tipo de interacción (nivel de excitación o capa de ionización o dispersión elástica), mientras que las secciones transversales diferenciales de energía se utilizan para determinar la transferencia de energía en el caso de eventos de colisión inelásticas. Las distribuciones angulares de los espectros de emisión de electrones secundarios se calculan utilizando modelos semiempíricos basados en datos experimentales de la fase de vapor de agua [38].

Como se mencionó anteriormente, de acuerdo con la teoría electromagnética cada electrón en un medio dado se representa como una carga clásica separada, unida armónicamente. Este enfoque produce la conocida fórmula Drude-Sellmeier dada por

$$\epsilon(\omega) = 1 + \sum_n \frac{f_n \omega_p^2}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\gamma_n \omega}, \quad (2.53)$$

donde  $f_n$  es el número fraccionario de electrones que tienen una frecuencia de resonancia  $\omega_n$  y una constante de amortiguación  $\gamma_n$ , mientras que  $\omega_p = (4\pi N e^2 / m_e)^{1/2}$  es la *frecuencia del plasma* si  $N$  es la densidad promedio de electrones en el medio; esta expresión es válida cuánticamente si  $f_n$  se interpreta como la fuerza del oscilador para una transición del estado fundamental al  $n$ -ésimo estado excitado del sistema, y si la suma se aumenta mediante una integral sobre la frecuencia continuamente variable  $\omega'$  correspondiente a las transiciones al continuo de ionización del sistema [27].

A diferencia de la pérdida de energía por eventos de ionización, la mayor contribución a la sección transversal inelástica total son las excitaciones de bajo  $Q$  descritos a partir de la parte imaginaria de la función de respuesta dieléctrica  $\epsilon_2$ . Los parámetros considerados para modelar las interacciones de la radiación ionizante con las moléculas de agua ( $Z = 10$ ) son cinco niveles de excitación discretos denotados como: dos excitaciones electrónicas  $A_1B^1$  y  $B_1A^1$ , dos estados de Rydberg Ryd A+B y Ryd C+D y bandas difusas; y cinco orbitales moleculares de ionización denotadas como  $1b_1$ ,  $3a_1$ ,  $1b_2$ ,  $2a_1$  y la capa-K. Estos datos (tabla 1) que son, hasta el momento, la única información disponible sobre la respuesta dieléctrica del agua, cumplen y están en concordancia con la energía de excitación media específica del agua líquida la cual es de 81.6 eV [38].

K	nivel/orbital	$U_k$ (eV)	$W_k$ (eV)	$f$
1	$A_1B^1$	6.55	8.17	0.118
2	$B_1A^1$	7.96	10.13	0.230
3	Ryd A+B	9.21	11.31	0.1675
4	Ryd C+D	9.81	12.91	0.285
5	Bandas difusas	10.60	14.50	0.280
6	$1b_1$	10.79	11.95	2.25
7	$3a_1$	13.39	14.70	2.06
8	$1b_2$	16.05	16.60	1.61
9	$2a_1$	32.20	33.30	1.21
10	Capa-K	539.0	540.0	1.79

Tabla 2.1: Parámetros de la respuesta dieléctrica del agua [28].

De acuerdo con la nomenclatura más utilizada en física atómica y molecular, la sección transversal inelástica se reduce al estudio de la fuerza del oscilador generalizado (GOS) o, en una formulación alternativa más apropiada para objetivos condensados, a la ELF. Tanto el GOS como el ELF están directamente relacionados con el factor de forma del proceso de colisión inelástica y pueden interpretarse heurísticamente como la probabilidad condicional de que el objetivo haga una transición a un estado excitado particular (discreto o continuo) al recibir una energía particular ( $T$ ) y transferencia de impulso ( $q$ ). Por lo tanto, una representación tridimensional (superficie de Bethe) del GOS o ELF describe completamente el proceso inelástico dentro del rango de validez de la aproximación de Born. Por ejemplo, la integración sobre la variable  $q$  produce la sección transversal diferencial de pérdida de energía, mientras que una integración completa sobre  $T$  y  $q$  produce el camino libre medio (inverso) para colisiones inelásticas. Otras cantidades importantes,

como la potencia de frenado de colisión y el parámetro de pérdida de energía rezagada, se pueden obtener a partir del primer y segundo momento de la sección transversal diferencial de pérdida de energía, respectivamente [38].

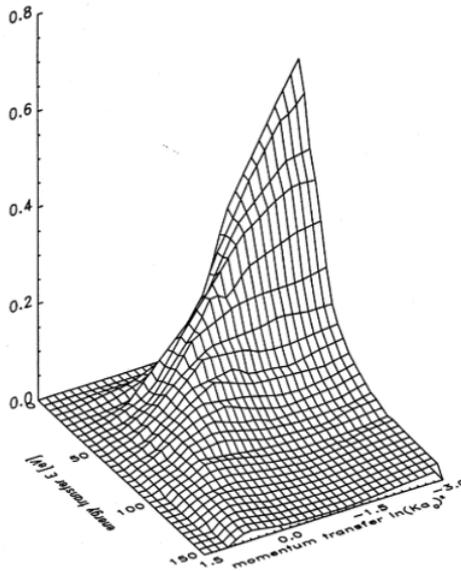


Figura 2.6: Superficie de Bethe: Representación de la pérdida de energía en función del momento y energía transferida [27].

Al construir el ELF de un objetivo condensado, es conveniente dividir el subsistema electrónico en electrones fuertemente unidos (capa interna o núcleo) y electrones débilmente unidos (capa externa o valencia). Los primeros están asociados con energías de enlace relativamente grandes y, por lo tanto, prácticamente no se ven afectados por el resto del subsistema electrónico. De tal manera, una aproximación binaria (es decir, un esquema semiclásico) es adecuada para las ionizaciones de impacto de la capa interna. Para los electrones débilmente unidos, se debe hacer una distinción adicional entre electrones de conducción o casi libres y electrones en bandas de no conducción. En general, los electrones casi libres están asociados con excitaciones colectivas del tipo plasmón, los cuales no serán analizados en este estudio. Sin embargo, para los electrones de valencia, asociados con transiciones entre bandas, la suposición de un comportamiento casi libre puede ser problemática. Por lo tanto, para una amplia gama de materiales no orgánicos (semiconductores y aislantes), orgánicos y agua, se debe idear un esquema motivado físicamente para modelar el ELF de electrones débilmente unidos [38].

A diferencia de los objetivos gaseosos, donde normalmente se dispone de datos bien probados, los experimentos de dispersión en objetivos sólidos son escasos y están restringidos a un rango limitado de energías de impacto y transferencia de impulso. Por lo tanto, se aprovechan las numerosas mediciones ópticas sobre la base de las cuales se puede obtener el límite óptico ( $q = 0$ ) de ELF (denominado OELF). A pesar de que el OELF denota bien el espectro de las colisiones más probables (es decir, las colisiones suaves que implican una pequeña transferencia de momento), una descripción precisa del transporte de partículas en términos de distancia a la siguiente interacción inelástica y pérdida de energía requiere que también se tenga en cuenta el efecto de las colisiones por transferencia de momento finito [38].

Para establecer secciones transversales diferenciales y totales inelásticas del agua, el subsistema electrónico del agua líquida se dividió en ocho electrones débilmente unidos (no conductores) y dos electrones centrales (en la capa K del oxígeno). Se supondrá que estos últimos no son perturbados por el subsistema electrónico restante y, por lo tanto, se tratan mediante una descripción binaria.

El enfoque dieléctrico se utilizó para las transiciones entre bandas asociadas con el primero. Para ello se utilizaron datos experimentales sobre las propiedades ópticas (reflectancia) del agua líquida. El OELF obtenido experimentalmente se representó analíticamente mediante una suma de funciones tipo Drude, donde las intensidades del oscilador, las energías de transición y las constantes de amortiguación se consideraron como parámetros de ajuste. En particular, se utilizó una suma de funciones derivadas de Drude que tienen picos más pronunciados para excitaciones discretas [38].

A energías superiores a unas pocas decenas de eV, la ionización contribuye en más del 90 % al IMFP inelástico en el líquido, en comparación con el 60-70 % en el vapor. Esta gran diferencia contribuye al valor sustancialmente menor de la energía promedio necesaria para producir un par iónico:  $W \sim 22$  eV/pi (par iónico) estimado para el líquido en comparación con  $W = 33$  eV/pi medido y calculado para el vapor. Una contribución adicional (en la misma dirección) a la diferencia en los valores  $W$  la aporta el espectro de colisión única, relativamente más duro, para la pérdida de energía en el líquido [39].

Por lo tanto, se ha procedido a ajustar los datos experimentales sobre la función compleja de longitud de onda del agua líquida con funciones analíticas convenientes. Se sabe que, para  $\hbar\omega$  mucho mayores que las energías de excitación importantes, la función de respuesta de la materia condensada debe ser idéntica a la de los constituyentes atómicos [27].

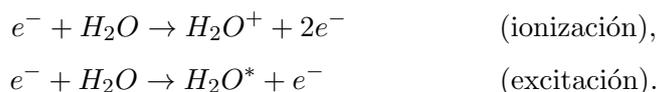
El modelo actual, aunque principalmente adecuado para simulaciones *evento-por-evento*, también puede contribuir a algoritmos mixtos de historia condensada (es decir, códigos de clase II) al permitir una evaluación confiable de los parámetros de dispersión de energía para colisiones suaves. Esto es importante porque el uso de la aproximación binaria en códigos de clase II impone la adopción de valores de corte altos que, a su vez, resultan en un mayor rezago de eventos suaves (por debajo del corte elegido). Igualmente importante es que la posibilidad de aumentar de manera confiable el límite disminuirá significativamente el tiempo de simulación [13].

### **2.4.3. Efectos producidos por la interacción de la radiación ionizante en agua (radiólisis)**

Comprender los efectos de la deposición de energía por la radiación incidente (dosis) en los organismos vivos requiere información sobre el transporte de partículas energéticas en medios biológicos y el elemento que determina la eficacia de la radiación es precisamente como se distribuyen los eventos de deposición de energía. La absorción de energía depende de la concentración del medio en la trayectoria de la radiación. El agua es el compuesto más predominante en los organismos vivos (alrededor del 80 % de la masa de una célula viva es agua) por tanto, es de esperar que una proporción importante de la energía de radiación depositada sea absorbida en el agua celular. Aproximadamente, dos tercios de los daños biológicos causados por radiaciones ionizantes, como los rayos X o los electrones, se deben a una acción indirecta, mientras que el resto debido a una acción directa (se detalla el uso de estos términos más adelante) [18]. De este modo, para comprender la dosimetría de la radiación química es necesario comprender no sólo la física sino también la química subyacente de la interacción de la radiación ionizante con el agua. La disociación de las moléculas de agua inducida por radiación ionizante se llama radiólisis, y es de vital interés para comprender los efectos que genera el transporte de partículas, así como la probabilidad de crear ciertos productos durante la transferencia de energía en las moléculas de agua, medio que rodea el ADN de las células biológicas [1]. La radiólisis del agua es un proceso fisicoquímico de descomposición molecular del agua y formación de radicales libres debido a la interacción con la radiación ionizante. Los eventos fisicoquímicos considerados relevantes para describir la calidad de la radiación ocurren en el primer microsegundo después de la deposición de energía en el objetivo biológico. Durante este tiempo se distingue una etapa física durante un

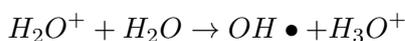
periodo de tiempo de  $10^{-15}$  s, y una etapa fisicoquímica de aproximadamente  $10^{-6}$  s donde la difusión y las interacciones rápidas de especies radicales producidas por la radiación producen productos de interés relevantes [27]. Dado que el oxígeno interfiere con muchas reacciones, el estudio de las etapas de la radiólisis del agua se analizarán en su ausencia [21].

La etapa física de la radiólisis del agua tiene una duración extremadamente corta (1 fs aproximadamente) y se caracteriza por la interacción de la radiación que resulta en la ionización y excitación de las moléculas de agua. Para los haces de fotones, estas interacciones comprenden el efecto fotoeléctrico, la dispersión Compton, entre otras; para los haces de partículas cargadas, comprenden interacciones de tipo Coulomb entre partículas cargadas y moléculas de agua. La excitación de una molécula de agua da como resultado una molécula de agua excitada inestable  $H_2O^*$ , mientras que la ionización da como resultado un catión de agua inestable (ion positivo)  $H_2O^+$  y un electrón libre  $e^-$ . El electrón libre se propaga a través del agua y puede tener suficiente energía para excitar o ionizar el agua por sí solo, liberando además electrones de menor energía en el proceso. Los electrones de energías bajas (de unos pocos eV) que se propagan a través del agua eventualmente se termalizan y son incapaces de ionizar o excitar otras moléculas de agua. En resumen, la etapa física de la radiólisis del agua produce moléculas de agua excitadas inestables, moléculas de agua ionizadas inestables con carga positiva en exceso, así como una gran cantidad de electrones energéticos que después de ser expulsados son termalizados [1]. El panorama general de la radiólisis del agua tras la interacción con un electrón energético se representa mediante el siguiente diagrama [4].



Durante la etapa intermedia de la radiólisis del agua, que dura aproximadamente 1 ps, las moléculas inestables  $H_2O^+$  y  $H_2O^*$  se someten a varios procesos que resultan en radicales hidrógeno e hidroxilo  $H\bullet$  y  $OH\bullet$ , respectivamente, altamente reactivos, mientras que los electrones primarios y secundarios libres termalizados pueden recombinarse con moléculas de agua ionizada o sufrir un proceso denominado *solvatación*. Los procesos químicos que ocurren en la etapa intermedia son los siguientes:

- i) La molécula de agua ionizada  $H_2O^+$  interactúa con una molécula de agua neutra vecina  $H_2O$  y se transforma en un radical  $OH\bullet$  transfiriendo un protón a la molécula de agua neutra. Este proceso químico se llama *protonación* y transforma la molécula de agua neutra en un catión hidronio:



- ii) La molécula de agua excitada  $H_2O^*$  puede volver a su estado fundamental mediante la emisión de calor o puede sufrir uno de varios procesos disociativos de rotura de enlaces, siendo el más común la disociación en un radical hidrógeno  $H\bullet$  y un radical hidroxilo  $OH\bullet$ :



- iii) Los electrones primarios y secundarios termalizados interactúan con dipolos de moléculas de agua y pueden quedar atrapados en un grupo reactivo de típicamente seis moléculas de agua formando una entidad llamada electrón acuoso y representada como  $e_{ac}$ . Al igual que el radical hidrógeno  $H\bullet$ , un electrón acuoso (también conocido como electrón solvatado)

es un fuerte agente reductor, en contraste con el radical hidroxilo  $\text{OH}\bullet$  que es un potente agente oxidante.

En pocas palabras, la etapa intermedia de la radiólisis del agua produce radicales químicamente reactivos ( $\text{H}\bullet$  y  $\text{OH}\bullet$ ), así como electrones acuosos de las tres especies iniciales  $\text{H}_2\text{O}^+$  y  $\text{H}_2\text{O}^*$  y  $\text{e}^-$  energéticos producidos durante la etapa física. Estos radicales son altamente reactivos químicamente como resultado de tener un electrón de valencia desapareado y desempeñan un papel importante en reacciones químicas adicionales que ocurren durante la etapa química de la radiólisis del agua [1].

Durante la etapa química de la radiólisis del agua, que dura aproximadamente  $1\ \mu\text{s}$ , los radicales hidrógeno e hidroxilo y el electrón acuoso que se produjeron en la etapa intermedia, experimentan una de varias docenas de posibles reacciones químicas. Estas reacciones dan como resultado diversos productos químicos en forma de radicales, iones y moléculas oxidadas y reducidas que impulsan las reacciones de importancia en la dosimetría de radiación química [1].

En resumen, durante la etapa física de la radiólisis del agua, la radiación ionizante interactúa con una molécula de agua, lo que da como resultado una molécula de agua excitada o ionizada, donde este último además emite un electrón energético. El electrón energético se propaga a través del agua, pierde su energía cinética a través de interacciones de Coulomb con otras moléculas de agua y, finalmente, los productos alcanzan la temperatura del medio circundante. Durante la etapa intermedia, la inestable molécula de agua excitada se disocia en un radical hidrógeno y un radical hidroxilo. Por otro lado, el ion de agua positivo interactúa con una molécula de agua neutra, dando como resultado un radical hidroxilo y un ion hidronio. Los electrones libres termalizados pueden unirse a un grupo de seis moléculas de agua y formar una especie reactiva llamada electrón solvatado. Las especies radicales finales son extremadamente reactivas y contribuyen a varias docenas de reacciones químicas durante la etapa química de la radiólisis del agua. Las diez reacciones más comunes de éstas finalmente eliminan las especies químicamente reactivas del agua [1]. En la figura 2.7, se muestra un diagrama de las etapas de la radiólisis, así como los radicales y productos que surgen en cada etapa.

Los radicales de agua reaccionan con la molécula de ADN de diversas maneras. Los radicales  $\text{OH}\bullet$  y los átomos de  $\text{H}\bullet$  pueden agregarse a nucleobases para producir una gran cantidad de diferentes radicales denominados colectivamente como  $\text{ADN}(+\text{OH})\bullet$  y  $\text{ADN}(+\text{H})\bullet$ . Además el radical  $\text{OH}\bullet$  el cual es producido con una energía de aproximadamente 17 eV extrae un átomo de H del resto de azúcar con una eficiencia notable. En estas reacciones de extracción de H, se forman cinco radicales de azúcar diferentes, denominados colectivamente  $\text{ADN}(-\text{H})\bullet$  [27].

Como ya se ha mencionado, entre las especies de radicales libres inducidas por radiación presentes en soluciones acuosas que contienen ADN, la única especie que tiene reacciones significativas con el ADN es el radical hidroxilo,  $\text{OH}\bullet$ . Los mecanismos químicos de tipos específicos de daño se han estudiado ampliamente. Por ejemplo, la rotura de la cadena de ADN puede deberse al ataque del radical hidroxilo a un resto de azúcar (es decir, la columna vertebral del ADN) o, como se ha planteado la hipótesis, el daño a un par de bases puede migrar al azúcar adyacente. La velocidad exacta a la que la radiación daña las bases o los azúcares sigue siendo en gran medida desconocida y la evidencia experimental, cuando está disponible, es sólo indirecta. Para examinar estas cuestiones con el enfoque químico estocástico descrito anteriormente, se puede superponer a las huellas de radicales inducidas por la radiación generadas en el agua una representación tridimensional de la molécula de ADN que consiste en nucleótidos dispuestos, por ejemplo, en la forma B del ADN. Los radicales interactúan entonces no sólo entre ellos sino también con restos de ADN [4].

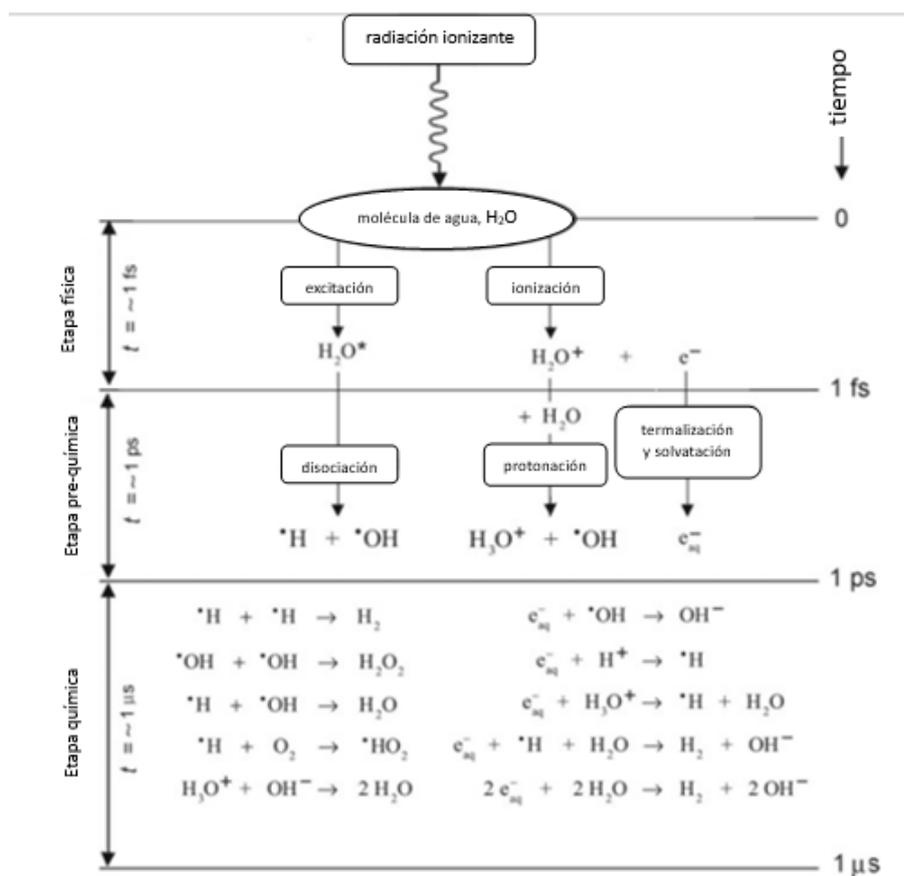


Figura 2.7: Diagrama esquemática de las etapas física, intermedia y química de la radiólisis del agua [1].

La comprensión de la radiólisis del agua es vital para el estudio de los mecanismos asociados con el daño del ADN de las células biológicas [27]. El agua es el principal constituyente de todos los sistemas biológicos y cuando interactúan con la radiación ionizante la mayor parte de la energía es absorbida por el agua; por tanto, la química de la radiación de esta molécula es fundamental para la comprensión de los fenómenos radiobiológicos [21].

Cuando las células de los mamíferos se exponen a la radiación, la energía se deposita en varias moléculas (proteínas, enzimas, agua entre otras), incluido el ADN. Estas moléculas están presentes dentro del núcleo celular y en particular, la energía absorbida por las moléculas de agua constituye una fracción significativa de la energía depositada. Experimentos han demostrado que los productos de la radiólisis del agua pueden provocar indirectamente cambios bioquímicos en una molécula de ADN. Estos procesos se denominan “efectos indirectos” del daño por radiación. La energía también puede depositarse de manera directa sobre la molécula de ADN, creando estados ionizados y excitados de las diversas moléculas (como azúcares o bases). Estos procesos físicos, que también pueden provocar daños en el ADN, se conocen generalmente como “efectos directos” de la radiación. Existe una diferencia crucial entre estos dos efectos y para comprenderlos, es necesario modelar los distintos tipos de daños a una molécula de ADN a partir de los fundamentos de la física atómica y molecular para posteriormente correlacionarlas con los cambios bioquímicos y biomoleculares [27].

Cuando la energía de la radiación ionizante se deposita en una determinada macromolécula asociada con efectos biológicos observables, como el ADN, se denomina “efecto directo” de

la radiación [18]. Sin embargo, como la porción del ADN presente en la célula es pequeño, la probabilidad de interacción directa entre la radiación y el ADN es mínima [4]. Así, la energía de la radiación ionizante puede ser absorbida en el agua de un organismo, provocando excitación y ionización en las moléculas de agua. Los radicales formados por la radiólisis del agua, y en particular el radical hidroxilo  $\text{OH}\bullet$ , son capaces de difundirse lo suficientemente lejos como para alcanzar y dañar los objetivos críticos [18]. De este modo, es más probable que el ADN sufra daños de manera indirecta, es decir, interacciones por una separación espacial y temporal mediante la interacción mediada por los productos de la radiólisis del agua [4].

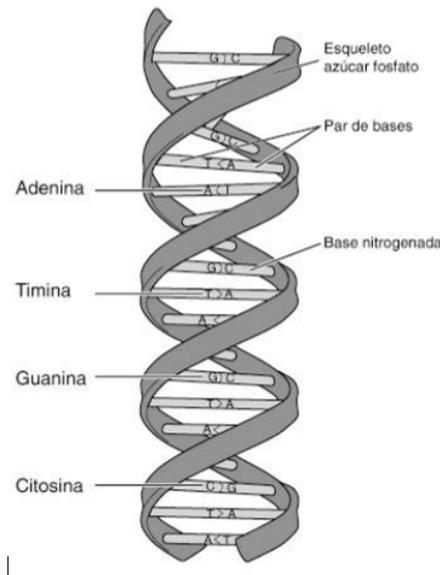


Figura 2.8: Estructura y componentes principales del ADN [22].

Dado que el ADN dentro de una célula es el objetivo más crítico, la evaluación del daño o lesión a esta importante molécula es de principal preocupación. La lesión inducida por los radicales libres del agua generalmente desaparece en aproximadamente  $10^{-6}$  segundos, y el cambio químico resultante en una molécula de ADN puede producir muerte, mutación o transformación celular. En un complejo celular, la distancia de migración promedio de un radical de agua es de aproximadamente 30 Armstrong [27].

El daño a un polímero de ADN también puede resultar como consecuencia de la deposición directa de energía en los diversos sitios (azúcares y bases) de la molécula. Este proceso también tiene lugar en aproximadamente  $10^{-15}$  segundos. Sin embargo, el daño al ADN debido a estos procesos rápidos puede evolucionar en varios órdenes de magnitud en el tiempo [27].

El ácido desoxirribonucleico (ADN) es una molécula grande que contiene la información genética de la célula y tiene una estructura característica de doble hélice que consta de dos cadenas, cada una formada por una secuencia de nucleótidos (Figura 2.8). La columna vertebral de la cadena de ADN está formada por grupos alternos de azúcar y fosfato. Un nucleótido es una subunidad del ADN y está compuesto por una base unida a un azúcar (desoxirribosa) y un grupo fosfato. Las cuatro bases son adenina (A), guanina (G), citosina (C) y timidina (T). Estas bases se pueden clasificar en dos grupos: purinas (A y G) y pirimidinas (T y C). La información genética de la célula se transporta en una secuencia lineal de nucleótidos que forman el conjunto de genes del organismo [18].

En una célula de mamífero, una molécula de ADN contiene del orden de 108 pares de nucleótidos. La masa atómica de cada par de nucleótidos es de aproximadamente 660. De ello se deduce

que una célula humana con 46 cromosomas contiene aproximadamente  $5 \times 10^{-15}$  kg de material de ADN (en peso, esto es el 6% del núcleo celular, suponiendo que todo el núcleo, de  $5 \mu\text{m}$  de diámetro, tenga la densidad del agua). Si el ADN de una célula humana estuviera muy empaquetado, ocuparía un volumen de casi  $4 \mu\text{m}^3$  [4].

El daño al ADN es la causa principal de la muerte celular inducida por la radiación. La exposición a la radiación produce una amplia gama de lesiones en el ADN, como roturas de una sola hebra, roturas de doble hebra (DSB), daños en las bases, entrecruzamientos proteína-ADN y entrecruzamiento proteína-proteína entre otras. El número de lesiones del ADN generadas por la irradiación es grande, pero existen varios mecanismos para la reparación del ADN. Como resultado, el porcentaje de lesiones que causan muerte celular es muy pequeño [18]. Existe un acuerdo general en que el daño por radiación en el ADN celular se produce principalmente en forma de roturas de una sola cadena (SSB) y de doble cadena (DSB) [4]. Los DSB desempeñan un papel fundamental en la destrucción celular, la carcinogénesis y los efectos hereditarios [18].

Los mecanismos de reparación del ADN son importantes para la recuperación de las células de la radiación y otros agentes dañinos. Existen múltiples mecanismos enzimáticos para detectar y reparar el daño en el ADN inducido por la radiación. Las proteínas, enzimas, etc. contenidas en las células biológicas pueden evitar que los diversos productos radicales formados como resultado de la deposición de energía en las moléculas de agua interactúen con la molécula de ADN, y este fenómeno se denomina “efecto eliminador”. Este efecto no puede despreciarse porque la concentración de los radicales de agua producidos también es muy pequeña [27].

Una vez que el daño se ha estabilizado químicamente, la célula responde intentando reparar las lesiones mediante procesos enzimáticos y el éxito de este esfuerzo depende de la naturaleza del cambio químico [27]. El daño no reparado o mal reparado al ADN provocará mutaciones y/o daño cromosómico en la célula expuesta. Las mutaciones pueden provocar cáncer o efectos hereditarios, mientras que el daño cromosómico grave a menudo conduce a la muerte celular. Por lo tanto, la evaluación del daño temprano a una molécula de ADN es de crucial importancia en la radiobiología [18].

#### **2.4.4. Aplicaciones médicas**

De acuerdo con las secciones anteriores, se puede percibir que la deposición de dosis en agua es una de las características más importantes de la interacción de los haces de radiación con la materia. Esto es cierto en la física de la radiación en general y aún más en la física médica, donde las propiedades de deposición de dosis en el tejido gobiernan tanto el diagnóstico de enfermedades con radiación como el tratamiento de enfermedades con radiación [1].

La obtención de imágenes con radiación ionizante se limita al uso de haces de rayos X en radiología de diagnóstico y haces de rayos  $\gamma$  en medicina nuclear, mientras que en radioterapia el uso de la radiación es más amplio y cubre esencialmente todos los tipos de radiación ionizante, desde los rayos X, rayos  $\gamma$  y electrones, hasta neutrones, protones y partículas cargadas más pesadas [1].

En el diagnóstico por imágenes de radiología uno está interesado en el haz de radiación que se propaga y se transmite a través del paciente, mientras que en las imágenes de medicina nuclear uno está interesado en el haz de radiación que emana del paciente. En radioterapia, por otro lado, lo que interesa es la energía depositada en el paciente por una fuente de radiación que se encuentra fuera del paciente (radioterapia de haz externo) o dentro del tumor (braquiterapia) [1]. Dado que el efecto biológico de una dosis de radiación depende de la transferencia de energía, conocer este parámetro de un haz de radiación determinado es importante al prescribir una dosis tumoral en radioterapia. A medida que aumenta la transferencia de energía de la radiación,

también aumenta la capacidad de la radiación para producir daño biológico [1].

Los haces de electrones más comúnmente disponibles en los departamentos de radioterapia tienen energías de entre 4 MeV y 25 MeV como los producidos por aceleradores lineales clínicos estándar [23]. Los haces de electrones de megavoltaje representan una modalidad de tratamiento importante en la radioterapia moderna y, a menudo, brindan una opción única para el tratamiento de tumores superficiales que tienen menos de 5 cm de profundidad debido a las características de sus curvas de dosis de profundidad (figura 2.9) [1]. Administran dosis aceptablemente uniformes en una región relativamente bien definida que se extiende desde la superficie hasta el rango terapéutico (tomado como el 85 % o 90 % de distancia), que puede modificarse para adaptarse a la situación clínica variando la energía del haz, seguido de una caída pronunciada en la dosis relativa. El enfoque general para la medición y dosimetría con haces de electrones es similar al de los haces de rayos X de megavoltaje. Sin embargo, existen una serie de diferencias significativas.

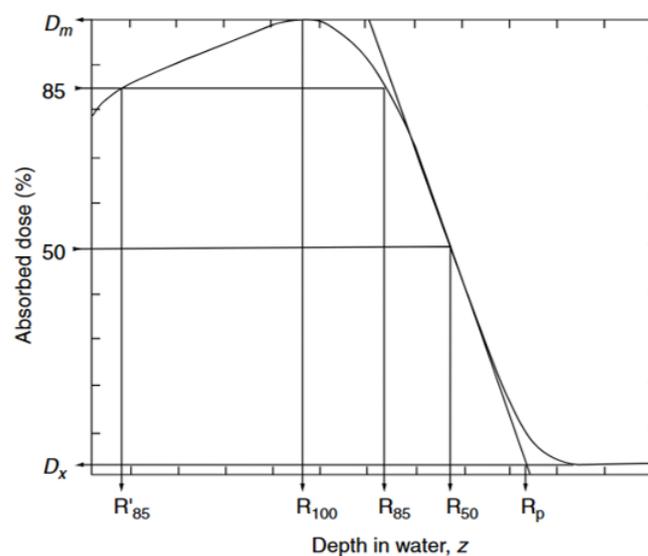


Figura 2.9: Curva de dosis-profundidad de un haz de electrones en agua que ilustra los parámetros característicos importantes. Dependiendo del tratamiento, se considera que el rango terapéutico es el 90 % distal (R90) o el 85 % distal (R85) [10].

La figura 2.9 muestra la forma general de una curva profundidad-dosis de un haz de electrones. Aquí se ilustra la región de dosis relativamente uniforme desde la superficie hasta el rango terapéutico, que normalmente se considera la profundidad de la dosis distal del 90 % o del 85 % dependiendo de la práctica, y la parte de la curva que cae rápidamente más allá de eso [23].

Los electrones se utilizan en la radioterapia de haz externo para el tratamiento de lesiones superficiales, por lo que es importante un conocimiento preciso del alcance de los electrones en el agua y los tejidos. Dado que las mediciones directas no invasivas con un dosímetro de radiación son difíciles de realizar en un paciente, normalmente se llevan a cabo en un medio adecuado equivalente a tejido denominado maniquí y es el agua el material sustituto de tejidos blandos más comúnmente utilizado para mediciones de dosis absorbidas en haces de fotones y electrones. Sin embargo, el uso de agua en dosimetría no siempre es práctico y las mediciones dosimétricas a menudo se llevan a cabo en materiales sólidos más prácticos, como poliestireno, lucita y “agua sólida”, los cuales se aproximan mucho al agua y los tejidos blandos en términos de sus propiedades de absorción y dispersión [1].

La predicción precisa de la dosis de radiación administrada a los pacientes es el paso más

importante para generar estrategias efectivas de tratamiento con radioterapia. Los físicos médicos, que son responsables de los aspectos físicos de la planificación del tratamiento, tienen que establecer los datos físicos necesarios para la radioterapia antes de que alguien pueda ser tratado e incluso durante el tratamiento real. Para determinadas fuentes de radiación, los físicos médicos deben saber cuánta energía o dosis de radiación se absorbe en cualquier punto del cuerpo del paciente. Generalmente, se utilizan equipos computacionales para predecir la distribución de dosis. Una computadora puede calcular dosis utilizando datos físicos específicos de la fuente de radiación incorporados en el software. Los datos necesarios varían según el modelo de cálculo utilizado por el programa informático. En general, se necesita la dosis absoluta en cualquier punto o profundidad del cuerpo humano y la dosis relativa en todo el cuerpo. Los físicos médicos han desarrollado muchos conceptos físicos desde que se introdujeron las fuentes de radiación en la clínica. Para la radioterapia que utiliza aceleradores de electrones, los físicos médicos introdujeron tres conceptos importantes: *factor de salida*, *dosis de profundidad* y *perfil del haz*. Los modelos físicos de la fuente de radiación y del cuerpo humano no son perfectos e implica que los cálculos de dosis en un cuerpo humano real resulten difíciles debido a la variación en la forma y las densidades de los tejidos. En consecuencia, es necesario medir los datos necesarios generalmente en un medio uniforme y grande, como un maniquí de agua [36].

## 2.5. El método de Monte Carlo (MC) en la física de la radiación

### 2.5.1. Introducción

El método de Monte Carlo (MC) desarrollado por John von Neumann, Stanislaw Ulam y Nicholas Metropolis (quien lo nombró) e, independientemente, por Enrico Fermi [24]; consiste en una serie de técnicas matemáticas para muestrear valores de una variable aleatoria  $x$ , dada su función de distribución acumulativa,  $F(x)$  [4]. Originalmente no se trataba de un método de simulación, sino más bien, de un enfoque matemático destinado a resolver una ecuación integro-diferencial multidimensional mediante un proceso estocástico. Tal ecuación no necesariamente tiene que describir un proceso aleatorio; sin embargo, cuando el método se aplica a un proceso estocástico físico, como la difusión de neutrones, el modelo (en este caso un camino aleatorio) podría identificarse con el propio proceso. En esas circunstancias, el método MC representa una técnica de simulación, ya que cada paso del modelo pretende imitar un paso idéntico del proceso físico real; en otras palabras, este método proporciona una solución numérica a un problema que modela objetos que interactúan con otros objetos o su entorno basándose en las relaciones objeto-objeto u objeto-entorno más esenciales y simples. Por tanto, el método MC es intuitivamente muy sencillo. La solución se determina mediante un muestreo aleatorio de estas relaciones e iterando hasta que el resultado converge, aprovechando al máximo toda la potencia informática que se puede tener de los ordenadores modernos [13]. El transporte y la interacción de partículas representan un proceso estocástico típico y, por tanto, es perfectamente adecuado para la simulación MC. Ésta y otras muchas aplicaciones, se basan en simulaciones en las que se reproduce en detalle la historia de cada partícula (trayectoria, interacciones). Sin embargo, en otros tipos de aplicaciones, típicamente estudios de deposición de energía, o diseño de blindajes, el usuario sólo está interesado en los valores esperados de algunas cantidades particulares en algún punto o región espacial, que se calculan como soluciones de una ecuación matemática. Así, el método MC permite sustituir el proceso real por otro modificado, que dé como resultado los mismos valores medios con una mayor eficiencia mediante el muestreo a partir de distribuciones convenientemente ajustadas [24].

Una de las diferencias entre el método de MC, por un lado, y los enfoques analíticos y numéricos, por el otro, es el uso de un generador de números aleatorios y un conjunto de distribuciones de probabilidad (principal característica de este método) para muestrear valores de parámetros y así calcular una posible solución al problema para un caso “único” o “evento” [40]. Una variable

aleatoria es una cantidad que resulta de un proceso repetible y cuyos valores reales no se pueden predecir con certeza. En el mundo real, la aleatoriedad se origina ya sea a partir de factores no controlados (como ocurre, por ejemplo, en los juegos de azar) o de la naturaleza cuántica de los sistemas y procesos microscópicos (por ejemplo, la desintegración nuclear y las interacciones de radiación) [3]. Estos números aleatorios representan la base de todas las integraciones de MC de una variable distribuidos según una función de densidad de probabilidad (PDF). En el mundo físico real, un experimento muestrea un gran número de resultados aleatorios de procesos físicos; estos corresponden, en un cálculo por computadora, a números pseudoaleatorios (PRN) muestreados de una PDF [24]. Los PRN son secuencias que reproducen la distribución uniforme y se construyen a partir de algoritmos matemáticos (generadores de PRN). Una secuencia PRN parece aleatoria, pero no lo es; se puede comprobar con éxito su aleatoriedad estadística, aunque se genere de forma determinista, siendo este proceso más fácil de producir que uno aleatorio verdadero ya que tiene la ventaja de que puede reproducirse exactamente [24].

En los tratamientos de radioterapia para pacientes con cáncer es fundamental contar con una medida precisa de la dosis administrada al paciente, ya que las tasas de supervivencia alcanzan su punto máximo dentro de un rango estrecho de dosis. Establecer esta dosis con precisión consta de 3 pasos vinculados. El primer paso es el establecimiento de estándares primarios de Kerma en aire o dosis absorbida en agua. El segundo paso es el uso de protocolos dosimétricos basados en cámaras de iones calibradas utilizando estos estándares primarios para establecer la dosis en condiciones de referencia en un haz de terapia clínica. El paso final es establecer la distribución de dosis en pacientes individuales especificada por los datos de tomografías computarizadas (TC). La simulación MC del transporte de electrones y fotones ha desempeñado durante mucho tiempo un papel en los tres componentes de esta cadena y su papel está aumentando sustancialmente a medida que mejoran la velocidad del procesador y la precisión del algoritmo. El método MC ha desempeñado un papel importante en la dosimetría de la radiación durante muchos años, siendo la estimación de los espectros de fluencia para su uso en los cálculos de las relaciones de potencia de frenado una de las primeras aplicaciones de las técnicas MC, los cuales desempeñan un papel central en la teoría de la cavidad de Spencer-Attix, que se utiliza para relacionar la dosis en un medio con la dosis en una pequeña cavidad de ese medio [38]. Por tanto, la precisión de los cálculos de dosis es crucial para la calidad de la planificación del tratamiento y, en consecuencia, para las dosis administradas a los pacientes sometidos a radioterapia [41].

Esta precisión de los cálculos estadísticos por el método de MC depende del número de eventos incluidos en el cálculo, cuanto mayor sea este número, mejor será la precisión del cálculo y, por supuesto, mayor será el tiempo de cálculo [1]. Aunque el método de MC se utiliza típicamente para simular un proceso aleatorio, con frecuencia se aplica a problemas que no tienen una interpretación probabilística inmediata [42]. En el campo de la física de las radiaciones la mayor parte de los fundamentos teóricos y matemáticos del método de MC, así como la mayoría de la literatura sobre esa técnica, se centraron históricamente en el transporte de neutrones y fotones de baja energía. Sin embargo, varios programas modernos han extendido los mismos conceptos matemáticos al transporte de partículas cargadas y a las interacciones a energías más altas [24]. Con la velocidad computacional y la rápida capacidad de memoria de las computadoras digitales, las técnicas de MC están adquiriendo cada vez mayor importancia en la dosimetría de la radiación, abriendo nuevas brechas de investigación en el estudio del transporte de partículas más complejas, así como en los cálculos de distribuciones de dosis en pacientes tratados con rayos X, rayos  $\gamma$  y haces de partículas ligeras o pesadas [1].

### **2.5.2. El método MC como alternativa a la ecuación de transporte**

Hoy en día, los métodos MC se utilizan ampliamente para resolver problemas físicos y matemáticos complejos, particularmente aquellos que involucran múltiples variables independientes donde

los métodos numéricos más convencionales demandarían cantidades formidables de memoria y tiempo de procesamiento computacional [3]. Como se mencionó anteriormente, el uso de técnicas de muestreo aleatorio es la característica distintiva del método MC. El problema central de la técnica de MC es la generación de una muestra aleatoria de  $x$  distribuidas según una PDF de la variable  $x$ ,  $f(x)$ , en donde  $x$  puede ser una variable multidimensional [24].

El estudio de los problemas del transporte de radiación se abordó inicialmente basándose en la ecuación de transporte lineal de Boltzmann. Sin embargo, este procedimiento tropieza con considerables dificultades cuando se aplica a geometrías limitadas, de modo que los métodos numéricos a partir de la ecuación de transporte sólo han tenido cierto éxito en geometrías simples, principalmente para medios ilimitados y semi-infinitos. A finales de los años cincuenta, con la disponibilidad de ordenadores, se desarrollaron los métodos de simulación de MC como una poderosa alternativa para abordar los problemas de transporte [3]. La resolución de la ecuación de transporte de Boltzmann mediante MC consta de dos partes esenciales: describir la geometría y los materiales del problema y muestrear aleatoriamente el resultado de los sucesos físicos a partir de distribuciones de probabilidad [24]. La evolución de una “lluvia” de electrones y fotones es de naturaleza aleatoria, por lo que es un proceso particularmente susceptible a la simulación de MC. La simulación detallada de todas las interacciones experimentadas por una partícula es exacta, es decir, el método de MC produce la misma información que la solución de la ecuación de transporte de Boltzmann, con el mismo modelo de interacción, pero resultado más fácil de implementar. En particular, la simulación del transporte de radiación en geometrías complejas es sencilla, mientras que incluso las geometrías finitas más simples (por ejemplo, láminas delgadas) son muy difíciles de abordar mediante la ecuación de transporte. El principal inconveniente del método MC radica en su naturaleza aleatoria, todos los resultados se ven afectados por incertidumbres estadísticas, que pueden reducirse a expensas de aumentar la población muestreada y, por tanto, el tiempo de cálculo [3].

Esta fuente de incertidumbre no está presente cuando se utilizan métodos analíticos. Por supuesto, la respuesta obtenida con métodos analíticos todavía está asociada con una incertidumbre, que surge de fuentes comunes como incertidumbres en los parámetros de entrada y posibles errores sistemáticos en el modelo. Una posible desventaja de los métodos analíticos es que puede resultar difícil obtener soluciones para problemas complejos. Los cambios (menores) en la relación entre parámetros, o la introducción de un nuevo parámetro, pueden crear un problema importante a la hora de encontrar una nueva solución analítica [40]. Los métodos numéricos son generalmente menos sensibles a tales cambios. Si, por ejemplo, una relación cambia, el algoritmo numérico puede permanecer igual, porque sólo utiliza los valores de la función en ciertos puntos [40]. En la práctica, los programas MC contienen frecuentemente elementos analíticos o *métodos de sesgo* para acelerar el cálculo y dedicar el tiempo de cálculo a los resultados importantes buscados. Los métodos analíticos suelen tener la ventaja de ser más rápidos desde el punto de vista del cálculo y permitir una mejor comprensión de los elementos que afectan el resultado del cálculo [39].

El inconveniente es que no puede proporcionar información directa sobre las fluctuaciones y correlaciones de las distribuciones estadísticas. Además, la convergencia más rápida en algunas regiones del espacio de fases se compensa con una convergencia más lenta en otras. Sin embargo, gracias a la disponibilidad de ordenadores más rápidos y baratos y de códigos informáticos de mejor calidad, un número cada vez mayor de cálculos de transporte de partículas en campos científicos y aplicados se realizan mediante programas de MC. La ventaja del método MC es su capacidad para tratar problemas de prácticamente cualquier grado de complejidad. Mientras que antes de la década de 1990 el enfoque típico de MC consistía en simplificar los problemas al máximo, los códigos MC modernos, en cambio, requieren menos aproximaciones (una excepción son las historias condensadas, que se describen más adelante) y proporcionan soluciones más

precisas. La posibilidad de enfrentarse a problemas que antes no podían resolverse ha abierto el camino a un gran número de nuevas aplicaciones [24].

Al resolver un caso particular de la ecuación de transporte de Boltzmann por técnicas MC, los datos obtenidos difieren considerablemente de otras técnicas numéricas estándar, debido a la cantidad limitada de información que se puede obtener. Una característica única en la resolución de problemas de transporte de MC es que se simulan las historias de partículas individuales. El modelado de los procesos físicos se puede lograr sin siquiera hacer referencia a la ecuación de transporte lo cual es conceptualmente simple para un proceso de Markov ya que la simulación en cualquier punto de la historia de la partícula no depende de cómo la partícula llegó a ese punto [42].

Consideraciones como éstas indican la necesidad de una descripción matemática satisfactoria del método de MC. La forma integral de la ecuación de transporte proporciona un punto de partida útil para establecer una simulación de MC matemáticamente sólida. En la literatura también se hace referencia con frecuencia a la forma integro-diferencial de tal ecuación que se muestra a continuación

$$\frac{1}{v} \frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla F + \mu F = \int_E dE' \int_{4\pi} d\mathbf{u}' F(E', \mathbf{u}', \mathbf{r}, t) + \psi(E', \mathbf{u}', E, \mathbf{u}), \quad (2.54)$$

Ésta forma ha sido particularmente útil como punto de partida para construir un esquema de muestreo para resolverla. Para comprender la aplicación del método MC a la ecuación de transporte es fundamental comprender el espacio fase del sistema. El espacio fase es un concepto de la mecánica estadística clásica en la que cada dimensión de éste corresponde a un grado de libertad de una partícula: tres dimensiones corresponden a la posición en el espacio (real)  $(x, y, z)$ , y otras tres dimensiones corresponden al momento:  $(p_x, p_y, p_z)$  (o a la energía y dirección:  $(T, \theta, \phi)$ ). Más dimensiones pueden corresponder a otros posibles grados de libertad como números cuánticos (por ejemplo, espín), tipo de partícula, etc. Cada partícula está representada por un punto en el espacio fase. El tiempo también puede considerarse como una coordenada, o bien una variable independiente: La variación de las demás coordenadas del espacio fase en función del tiempo (la trayectoria de un punto de dicho espacio) constituye una “historia” de la partícula [24].

La cantidad básica que describe una población de partículas es la densidad del espacio fase  $n(t; x; y; z; p_x; p_y; p_z)$ , la cuál es el número de partículas en un volumen infinitesimal del espacio fase. Sin embargo, desde el punto de vista del transporte de partículas, el producto  $n\mathbf{v}$  de la densidad de espacio fase y la velocidad de las partículas es más importante porque representa la tasa de la densidad de longitud de trayectoria y, por tanto, se relaciona con la tasa de interacción de las partículas con la materia. La cantidad  $\Psi = n\mathbf{v}$  se denomina flujo angular y es la magnitud radiométrica más general [24].

Todos los cálculos de transporte de partículas de MC son intentos de resolver la ecuación de Boltzmann, llevando a cabo la integración sobre todas las historias posibles de partículas [24]. Las complejidades matemáticas para la resolución de tal problema son considerables, debido al gran número de variables (mínimo seis) que entran en la ecuación de transporte, y debido a la variedad de interacciones que pueden tener que considerarse conjuntamente: dispersión elástica por núcleos atómicos, dispersión inelástica por electrones atómicos, producción de electrones secundarios, Bremsstrahlung y, posiblemente, interacciones nucleares. Al atravesar incluso una capa delgada de materia, un electrón o un protón provocará una enorme cantidad de colisiones

que resultarán en pequeñas pérdidas y desviaciones de energía, y una cantidad relativamente pequeña de colisiones “catastróficas” en las que pueden perder una fracción importante de su energía o puede dispersarse en un ángulo grande. El efecto combinado de todas las colisiones es un proceso complejo de difusión y degradación de energía cuya descripción realista requiere una teoría elaborada [43].

En la derivación de la ecuación de transporte entran en juego varias suposiciones, que también se toman en cuenta para los cálculos de MC: (1) Los centros de dispersión (átomos y electrones) se distribuyen al azar, aunque no necesariamente con una densidad uniforme; no se tienen en cuenta las correlaciones entre las posiciones de diferentes átomos y electrones; (2) La partícula cargada, al atravesar el medio, interactúa con un único centro de dispersión a la vez. Esto implica despreciar las interferencias mecánico-cuánticas (difracción de electrones) resultantes de la dispersión coherente entre varios centros. La trayectoria de la partícula se idealiza, así como una trayectoria en zigzag, que consiste en vuelos libres interrumpidos por colisiones repentinas en las que se cambia la energía y la dirección de la partícula [43]. Es decir, mediante interacciones repetidas con el medio, una partícula de alta energía va originando a lo largo de su trayectoria una cascada o lluvia de partículas; en cada interacción, la energía de la partícula se reduce y se pueden generar más partículas, de modo que la evolución de la lluvia representa una degradación efectiva de la energía. A medida que pasa el tiempo, la energía inicial se va depositando progresivamente en el medio, mientras que la restante es compartida por un número cada vez mayor de partículas [3].

Es interesante observar que, si bien el modelado físico se basa en un proceso de Markov, el cual es un modelo conceptualmente simple, un tratamiento matemático más riguroso de la aplicación del método de MC para resolver problemas de transporte de partículas más detallados y complejos no es trivial [42]. La dificultad para resolver con la precisión necesaria (para medios finitos no homogéneos) la ecuación de transporte de Boltzmann, junto con los avances en la potencia informática, han motivado la aplicación generalizada de códigos MC para la simulación (estocástica) de trayectorias de partículas. Para desarrollar tales códigos es vital que la física de la penetración y difusión de partículas cargadas en la materia, en términos, por ejemplo, de distribuciones dispersas y secciones transversales de interacción, sea adecuadamente conocida y susceptible de una descripción computacionalmente conveniente [38].

### 2.5.3. El método MC aplicado al transporte de radiación

Los cálculos detallados por MC proporcionan una descripción precisa de las interacciones del campo de radiación con el medio, que con métodos analíticos no sería posible [18]. Este método de simulación se ha convertido en una herramienta importante en el modelado biofísico de los efectos de la radiación en células de mamíferos inmersas en soluciones acuosas. La importancia crítica de las propiedades agrupadas de las trayectorias de radiación para determinar sus propiedades biológicas no puede medirse en dimensiones inferiores a decenas de nm mediante los métodos experimentales actuales. La disponibilidad de códigos de estructura de recorridos de MC que simulan trayectorias de radiación, interacción molecular tras interacción, ha hecho posible en años más recientes realizar investigaciones teóricas de esas propiedades agrupadas hasta dimensiones de menos de 1 nm [39].

La simulación de MC reproduce fielmente las trayectorias de partículas individuales, en un sentido estadístico, dentro del conocimiento con el que se cuenta de las leyes físicas, es decir, las secciones transversales de dispersión y pérdida de energía. Las características macroscópicas de los campos de radiación se calculan como un promedio de muchas simulaciones o historias de partículas individuales. Si el verdadero promedio  $\bar{x}$  existe y la distribución en  $x$  tiene una varianza finita verdadera,  $\sigma_x^2$ , el Teorema del Límite Central para energías desde 0,001 MeV hasta

50 MeV garantiza que el estimador de MC para  $\bar{x}$  al que se refiere aquí como  $\langle x \rangle$ , puede acercarse arbitrariamente a  $\bar{x}$  aumentando el número  $n$  de historias de partículas simuladas. Además, el teorema del límite central predice que la distribución de  $\bar{x}$  es gaussiana, caracterizada por una varianza  $\sigma_{\langle x \rangle}^2$  que puede estimarse simplemente en la simulación [23, 44].

Son estos hechos los que han sido en parte responsables del rápido aumento en el uso del método MC en aplicaciones de radioterapia y dosimetría [23]. En la medida en que se conocen secciones transversales precisas para la interacción de las partículas ionizantes con el medio, este método representa el mejor procedimiento para obtener cantidades microdosimétricas [4]. Además, los recursos informáticos necesarios para la mayoría de las aplicaciones son modestos y pueden ejecutarse con suficiente precisión en computadoras de escritorio y estaciones de trabajo asequibles. Las potentes PC actuales, que generalmente funcionan con Linux, funcionan efectivamente como motores de cálculo MC. Esta relación de teoría y capacidad computacional coloca al método MC en la caja de herramientas estándar de los físicos médicos, especialmente si participan en investigaciones. A continuación, se ofrece una descripción de esta técnica [23, 44].

La técnica de MC consiste en utilizar el conocimiento de las distribuciones de probabilidad que rigen las interacciones individuales de electrones y fotones en materiales para simular las trayectorias aleatorias de partículas individuales. Se realiza un seguimiento de las cantidades físicas de interés para una gran cantidad de historias para proporcionar la información requerida sobre las cantidades promedio y sus distribuciones asociadas [7]. Al simular una gran cantidad de historias, se puede obtener información sobre valores promedio de cantidades macroscópicas, como la deposición de energía. Además, dado que se siguen las historias de partículas individuales, la técnica se puede utilizar para obtener información sobre las fluctuaciones estadísticas de tipos particulares de eventos [7].

Para simular estas historias necesitamos un “modelo de interacción”, es decir, un conjunto de secciones transversales diferenciales (DCS) para los mecanismos de interacción relevantes. Los DCS determinan las funciones de distribución de probabilidad de las variables aleatorias como son, el camino libre entre sucesos de interacción consecutivos, el tipo de interacción que tiene lugar y la pérdida de energía y desviación angular que caracterizan un recorrido (y estado inicial de las partículas secundarias emitidas, en su caso) [3].

Introduciendo estas DCS en un código MC típico de transporte de radiación cada partícula es seguida en su camino a través de la materia. En cada paso, la aparición y el resultado de las interacciones se deciden por selección aleatoria a partir de las distribuciones de probabilidad apropiadas. Todas las partículas secundarias emitidas desde la misma partícula primaria se almacenan en una “pila” y se transportan antes de que se inicie una nueva historia. La mayoría de los códigos de transporte MC se basan en una serie de suposiciones, no siempre explícitas, que pueden limitar su campo de aplicación o requerir alguna aproximación [24].

Generalmente se supone que los medios y la geometría son estáticos, homogéneos, isotrópicos y amorfos. Una geometría estática dificulta el manejo de problemas con objetivos en movimiento, aunque se han realizado algunos intentos con éxito para superar esta limitación. El transporte de partículas es considerado un proceso markoviano; es decir, el destino de una partícula depende sólo de sus propiedades actuales y no de acontecimientos o historias anteriores o futuras. Las partículas proyectadas no interactúan entre sí. Esta es una suposición razonable en situaciones normales, pero no en campos de radiación extremadamente intensos como los que se pueden encontrar en un plasma o dentro de una estrella. Además, no se pueden simular efectos como la zona de carga espacial y algunas interacciones atípicas de radiación que ocurren a altas energías [24].

Las partículas proyectadas interactúan con electrones, átomos, núcleos y moléculas de manera individual. Esta limitación no permite la simulación de efectos coherentes, además que las propiedades de los materiales no se ven afectadas por las reacciones de las partículas. La mayoría de los programas MC requieren una definición de material estático. La precisión y confiabilidad de una simulación MC dependen de los modelos o datos en los que se basan las funciones de densidad de probabilidad [24].

En un cálculo de dosis de MC, se simula la trayectoria de cada partícula ionizante individual (en radioterapia generalmente fotones y electrones) a través del volumen de interés. A lo largo de su camino, la partícula puede interactuar con la materia por la que pasa, por ejemplo, mediante dispersión de Compton (para fotones) o dispersión de Coulomb (para electrones). Utilizando un generador de números aleatorios y distribuciones de probabilidad para los diferentes tipos de interacción, el programa toma muestras de la distancia  $s$  hasta la próxima interacción para una partícula en una posición determinada y con un vector de velocidad  $\mathbf{v}$  en una determinada dirección. Luego, la partícula se propaga con velocidad  $\mathbf{v}$  a lo largo de la distancia  $s$  hasta el lugar de interacción. A continuación, el programa elige el tipo de interacción que se realizará [40].

La técnica de MC ofrece un medio para desarrollar una simulación estocástica por computadora de los cambios microscópicos detallados en los objetivos irradiados [45]. Y aunque en muchos cálculos de dosimetría radiológica, el uso de resultados macroscópicos medios es suficiente, hay cálculos que requieren tener en cuenta la naturaleza estocástica de las interacciones de la radiación con la materia para poder replicar con precisión el caso físico. Si bien esto se puede hacer a través de medios analíticos para escenarios simples, el método de MC para simular el transporte de radiación es el medio más común utilizado para modelar el transporte de radiación en la física de radiación médica moderna [25].

En definitiva, los métodos de simulación MC abordan una amplia gama de esfuerzos científicos en problemas de dosimetría de radiación, física de radioterapia y protección radiológica debido a la complejidad del transporte de electrones y fotones en el material por medio de métodos de solución analíticos. Aunque el problema de los largos tiempos de cálculo ha llevado tradicionalmente a que el método MC sea visto en la comunidad de la física médica como un enfoque clínicamente inviable, el desarrollo de códigos MC optimizados para cálculos de radioterapia, así como la disponibilidad de ordenadores mucho más rápidos y asequibles, han reducido sustancialmente los tiempos de procesamiento [41], aumentando la aplicación de técnicas MC a pesar de las graves deficiencias de los datos de entrada fundamentales en forma de secciones transversales diferenciales precisas en entornos como el agua líquida, ADN y células biológicas [39]. No obstante, ya se cuentan con grandes paquetes de software de uso general. Además, el uso de haces de fotones y electrones de alta energía para la radioterapia hace que sea esencial tener en cuenta el transporte de radiación para la comprensión global del daño físico y químico en el ADN en la dosimetría y planificación del tratamiento [7].

#### 2.5.4. Algoritmos de simulación MC

La simulación por computadora de trayectorias de partículas cargadas ha contribuido significativamente a la comprensión de la micro y nanodosimetría de las radiaciones en materia similar a los tejidos. Históricamente, la atención se ha centrado en el agua como sustituto del tejido blando, ya que el tejido tiene más del 80% de agua. Debido a la necesidad percibida de simulaciones de trayectorias de radiación en materiales adicionales, como ADN, hueso, etc., y debido a que los datos de entrada y el hardware informático han avanzado considerablemente, en los últimos años la comunidad científica ha tenido el propósito de mejorar y ampliar estas herramientas de simulación [46].

Las historias de las partículas son secuencias de diversos acontecimientos o procesos. Algunos de ellos son físicos (por ejemplo, la interacción de una partícula con un átomo o con un núcleo); otros están relacionados con el transporte o, mejor dicho, con la descripción geométrica, por ejemplo, el cruce de una frontera entre dos materiales. Los sucesos pertenecen a dos categorías: discretos (o puntuales) y continuos. Los sucesos físicos reales son esencialmente discretos, pero por comodidad ciertas secuencias de muchos sucesos microscópicos similares se describen como un suceso macroscópico continuo, muestreado a partir de una distribución adecuada [24].

El transporte de electrones es de importancia central para los cálculos en física de radioterapia. Independientemente de si se utilizan haces incidentes de fotones o electrones, es a través de los electrones que gran parte de la energía se transfiere finalmente al medio. Sin embargo, el transporte de electrones y positrones resulta ser más difícil de simular que el de fotones. La razón principal es debido a dos características físicas de los electrones que complican su simulación; por un lado, su carga eléctrica y por el otro su masa ligera [47]. Esto hace que la pérdida de energía promedio de un electrón en una sola interacción sea muy pequeña y su desviación angular sea relativamente grande (del orden de unas pocas decenas de eV). Como consecuencia, los electrones de alta energía sufren un gran número de dispersiones antes de ser absorbidos eficazmente en el medio [3].

Los procesos físicos que se modelan al simular el transporte de electrones a través de la materia son la dispersión elástica por núcleos atómicos (apantallados), colisiones inelásticas con electrones atómicos que causan excitación o ionización, producción de Bremsstrahlung y la emisión de rayos X y electrones Auger después de la ionización por impacto del electrón. Los procesos nucleares (que sólo ocurren con altas energías electrónicas) a menudo se pasan por alto [40].

Un código de transporte de radiación debe contener algoritmos que simulen las interacciones que tienen las partículas con su entorno [13]. Sin bien, los algoritmos MC son fáciles de implementar y dependen del propósito general que tenga el código, cada algoritmo debe incluir:

- preparación de secciones transversales: tablas de interacciones y relaciones.
- trazado de rayos a través de geometrías.
- muestreo de distribuciones de probabilidad.
- recuento, puntuación, acumulación de resultados.
- interfaz para la interpretación humana.

En la práctica, una simulación detallada, es decir una simulación que describa el transporte interacción por interacción es factible sólo cuando el número promedio de colisiones por recorrido no es demasiado grande (digamos, hasta unos pocos cientos). Las situaciones experimentales que son susceptibles a simulaciones detalladas son aquellas que involucran fuentes de electrones con energías cinéticas iniciales bajas (hasta aproximadamente 100 keV) o geometrías especiales, como haces de electrones que inciden sobre láminas delgadas. Para energías iniciales más grandes y geometrías gruesas, el número promedio de colisiones experimentadas por un electrón hasta que se detiene efectivamente se vuelve muy grande, y la simulación detallada resulta ineficiente [3]. Por tanto, la simulación detallada (analógica, *evento-por-evento*) es factible en circunstancias restringidas (energías relativamente bajas, objetivos delgados y homogéneos) y ofrece un método directo para validar los DCS adoptados en comparación con los datos experimentales disponibles. Para electrones de alta energía (digamos, por encima de unos pocos cientos de keV), el número

de interacciones que sufre un electrón a lo largo de su trayectoria es demasiado grande para una simulación detallada; la práctica habitual es utilizar métodos de simulación “condensada” (clase I), en los que el efecto global de múltiples interacciones se describe mediante teorías de dispersión múltiple aproximadas. Alternativamente, se pueden utilizar esquemas “mixtos” (clase II) en los que se simulan individualmente interacciones duras (catastróficas), con pérdida de energía o deflexión angular por encima de umbrales determinados. Para un conjunto dado de DCS, los esquemas de clase II son intrínsecamente más precisos que las simulaciones de clase I. La dificultad de utilizar DCS precisos (es decir, numéricos) en un código de propósito general es que el tamaño de la base de datos requerida (que cubre, por ejemplo, el rango de energía de 1 keV a 1 GeV) puede ser excesivamente grande [13].

Ambas técnicas de simulación MC tienen en común un mínimo de pasos necesarios que deberá seguir una simulación, los cuales son:

- i) La configuración geométrica del área espacial a investigar debe definirse con todos los detalles necesarios. Esta configuración consiste en una descripción de la forma geométrica de los distintos elementos y su posición relativa, así como de los materiales utilizados para construirlos.
- ii) Definición del tipo de partícula que se va a rastrear en su camino a través de la materia, es decir, la partícula fuente o primaria.
- iii) Dado un determinado material, se debe determinar el camino libre medio de la partícula fuente en este material. Este camino libre medio define el siguiente punto en el espacio en el que la partícula fuente sufrirá una interacción.
- iv) Si este punto de interacción está dentro de la geometría que se va a investigar y si no hay fronteras internas que cruzar en el camino hacia este punto de interacción, entonces será posible determinar el tipo de interacción que generalmente depende del material en el que se mueve la partícula. La interacción podría dar como resultado partículas secundarias que se “almacenan” para su seguimiento posterior. Después de la interacción, la partícula fuente tiene una nueva energía y una nueva velocidad como resultado del proceso de interacción.
- v) Si este punto de interacción está fuera de la geometría, se termina el rastro de la partícula primaria y la primera partícula en el almacenamiento (una partícula secundaria como resultado de una de las interacciones) se convierte en la partícula fuente para el seguimiento.
- vi) Si se cruza un límite interno en el camino hacia el punto de interacción, la partícula se mueve en línea recta hasta alcanzar el límite interno. Se determina un nuevo camino libre medio si hay un cambio de material en este límite y esto define un nuevo camino libre medio posterior al punto de interacción; y la simulación pasa al punto iv de esta lista [48].

El tratamiento de cada proceso físico según el tipo de algoritmo de simulación es en realidad una clara ventaja del método MC y es, en principio, tan preciso como las incertidumbres en las secciones transversales, siempre que el trazado de rayos, el muestreo y las acumulaciones sean confiables [42].

El término *evento-por-evento* denota una representación tridimensional completa de las interacciones que tienen lugar durante el proceso de desaceleración de las partículas, en términos de posición, tipo y transferencia de energía, según secciones transversales apropiadas de una sola colisión. Este análisis debe contrastarse con los códigos MC comunes utilizados para aplicaciones macroscópicas. El término macroscópico implica que la resolución espacial adquirida es grande en

relación con el camino libre medio de las partículas cargadas. En este caso, el algoritmo adopta el enfoque de historia condensada mediante el cual el camino se divide en una serie de pasos durante los cuales el efecto de varias interacciones se maneja en conjunto mediante teorías de dispersión múltiple apropiadas [46]. Por tanto, si el método es microscópico las geometrías, los límites y las fuentes no alteran la estructura fundamental de los algoritmos. De este modo, el método MC es la realización más rápida y eficiente de un resultado macroscópico a partir de un modelo microscópico [13].

Los avances recientes en la terapia con radionúclidos dirigidos y la radioterapia de protones y rayos X mejorada con nanopartículas despertaron un gran interés en comprender los efectos biológicos de las partículas cargadas de baja energía en la microdosimetría y la radioterapia. Existe un acuerdo general en que la simulación MC del transporte de radiación en un medio absorbente es el método más preciso para calcular las dosis. Algunas de las estrategias que emplean estos algoritmos son la técnica de historia condensada y el método de reducción de varianza. Las simulaciones microdosimétricas requieren cálculos de dosis en la escala de nanómetros y, por lo tanto, se prefieren los algoritmos de interacción única. Se han propuesto varios modelos teóricos para calcular las secciones transversales que son aplicables a las simulaciones MC de seguimiento de electrones y protones. Sin embargo, la principal deficiencia de estos métodos es su gran necesidad de tiempo de cálculo y, en consecuencia, su bajo rendimiento [49].

#### **2.5.4.1. Técnica de historia condensada**

La técnica de la historia condensada (CH) es un algoritmo de simulación de transporte de electrones de MC que consiste en agrupar un número suficientemente grande de colisiones (prácticamente al menos 20) a lo largo de cada trayectoria y tratar su efecto mediante un sistema de teorías de dispersión múltiple (MST) adecuado. Esta técnica macroscópica denota, en esencia, que cada trayectoria se simula como una colección de segmentos de trayectoria suficientemente largos en comparación con la trayectoria libre media de las partículas cargadas para que sea factible justificar el uso de de la MST adoptada [38].

La justificación de la aplicabilidad de esta técnica propuesta inicialmente por Berger (1963) se basa en la comprensión de que, mientras que los electrones experimentan muchas interacciones, relativamente pocas de estas interacciones causan una gran pérdida de energía o cambios de dirección. Por lo tanto, el efecto de la mayoría de estas interacciones es pequeño e implica poca pérdida de energía o pequeñas deflexiones angulares. De esta forma, se pueden combinar los efectos de interacciones de pequeños efectos en interacciones virtuales únicas de grandes efectos. Estas interacciones de grandes efectos pueden predecirse teóricamente mediante teorías de eventos acumulativos [4, 23, 44]. Además, Larsen (1992) demostró que el método de historia condensada converge a la solución exacta de la ecuación de transporte de Boltzmann en el límite de las longitudes de trayectoria de los electrones pequeños. En realidad, esto es una advertencia de que la CH es una aproximación y su uso puede conducir a artefactos de cálculo cuando se aplica fuera de su rango de validez. Esto ha llevado a que la investigación en esta área siga siendo bastante activa respecto al desarrollo de métodos de historia con de alta precisión y su aplicación en la física médica tal como lo hizo Nahum (1999) en su momento [23, 44].

La técnica de la historia condensada es el tipo de algoritmo de transporte de electrones más frecuentemente utilizado para cálculos de radioterapia ya que evita el problema de demasiadas interacciones “condensando” el efecto de numerosas colisiones en un solo “paso” a través del medio. En lugar de intentar modelar todas las interacciones, se realiza una representación del efecto agregado de múltiples colisiones después de un tamaño de paso determinado. En los métodos de historia condensada, hay tres categorías de aproximaciones relativas al efecto neto de muchas interacciones sobre la pérdida de energía y el posicionamiento espacial del electrón. Se

utiliza una distribución de deflexión angular de dispersión múltiple, generalmente la de Moliere (1940) o la de Goudsmit-Saunderson (1948) para seleccionar el ángulo de dispersión al final de un paso. Se incluye una aproximación en línea recta, modificada por una corrección para tener en cuenta que el electrón no viaja exactamente en una trayectoria recta durante el paso. Y finalmente, también se requiere una expresión para la pérdida de energía durante un paso, que debería tener en cuenta la variación estadística en la energía depositada para una distancia recorrida determinada [47]. En otras palabras, este método utiliza teorías de dispersión múltiple que permiten la simulación de la desviación global de electrones y la pérdida de energía después de todas las colisiones que ocurren en un determinado segmento de trayectoria o paso que es mucho más largo que el MFP entre las interacciones [50].

El paso de cada electrón, a menudo elegido por el usuario, es la distancia que recorre cada electrón simulado entre colisiones. Muchos métodos actuales de historia condensada utilizan una rutina de división en el rango  $0 \leq s \leq s_0$ . Por ejemplo, el método PENELOPE divide cada paso en dos subpasos; uno con longitud  $\xi s_0$  y otro con longitud  $(1 - \xi)s_0$ , donde  $\xi$  es un número aleatorio entre 0 y 1. Berger propuso anteriormente un método más simple, quien sugirió que los dos subpasos deberían tener iguales longitudes:  $s_0/2$  [13]. Debido a que los métodos de historia condensada se aproximan al proceso de transporte físico, las soluciones obtenidas de simulaciones de historia condensada contienen tanto errores estadísticos como un error de truncamiento, que presumiblemente es proporcional a alguna potencia de la longitud del camino. Además, como los esquemas de historia condensada no son equivalentes a los esquemas de transporte, contienen características que generan dificultades en algunos cálculos prácticos. En particular, no siempre es fácil simular con precisión electrones con la técnica de historia condensada a través de una interfaz de material. Por ejemplo, cuando una partícula MC se acerca a una interfaz, el método PRESTA en EGS2 considera una secuencia de pasos más pequeños, hasta que la partícula casi viaja en modo analógico. Después de que la partícula pasa a través de la interfaz, los pasos se incrementan gradualmente hasta  $s_0$  [13]. De esta forma, resulta necesario imponer correcciones de longitud de trayectoria y de desplazamiento transversal al final del paso y modificaciones algorítmicas en las interfaces o límites de materiales, donde las distribuciones infinitas del medio dejan de ser válidas, para lograr una precisión aceptable en el método de historia condensada [51].

Las simulaciones por el método de historia condensada se basan en dos esquemas diferentes. El esquema de la aproximación de desaceleración continua (CSD) es el más simple y el que menos exige potencia informática. Cada colisión elástica se modela explícitamente, mientras que entre tales eventos se estima la pérdida de energía de las colisiones inelásticas a partir de la teoría del poder de frenado. Una grave deficiencia de este esquema es el completo descuido del rezago de energía. El siguiente nivel de sofisticación es el llamado esquema de camino aleatorio condensado. De acuerdo con la terminología original de Berger podemos distinguir dentro de este esquema entre algoritmos de clase I y clase II. En los algoritmos de simulación de clase I, tanto la pérdida de energía como la deflexión angular de las partículas después de atravesar un paso preseleccionado se muestrean a partir de la MST apropiada. Aunque los códigos de clase I tienen plenamente en cuenta el rezago y, por lo tanto, se consideran más avanzados que los esquemas CSD, su principal inconveniente son las limitaciones que plantea la adopción del tamaño de paso adecuado. Por ejemplo, cerca de las interfaces (entre medios de diferente composición), es posible que sea necesario reducir considerablemente el tamaño del paso, de modo que se puedan cuestionar las suposiciones inherentes a las MST. Además, la aplicación de la MST produce errores sistemáticos en lo que respecta al desplazamiento lateral de partículas después de cada paso [38].

Por otro lado, los algoritmos de clase II, o procedimientos mixtos, agrupan sólo colisiones menores

donde las pérdidas o desviaciones de energía son pequeñas, pero considera el muestreo individual de eventos menores o colisiones catastróficas, donde se produce una gran pérdida o desviación de energía. Andreo y Brahme (1984) introdujeron una extensión de los procedimientos de clase II para tener en cuenta las pérdidas de energía y las deflexiones por debajo del umbral de colisiones catastróficas, utilizando dispersión restringida de pérdida de energía y dispersión múltiple restringida durante la clasificación entre eventos mayores y menores [14, 7].

Como resultado de basarse en aproximaciones empíricas, los métodos de historia condensada tienen un rango de validez limitado. Por ejemplo, Ballinger ha demostrado que a bajas energías (por debajo de unos pocos keV) los resultados de los códigos de historia condensada de clase I, como ETRAN, ITS y MCNP, son inexactos. Esto se debe principalmente a que dependen de una distribución de Landau para la pérdida de energía, lo que ocasiona la posibilidad de grandes pérdidas de energía, las cuales se depositan localmente en lugar de transferirlas a electrones secundarios. Por tanto, no es válido para situaciones que impliquen emisión de radiación secundaria. Los códigos de transporte de electrones de clase II, como el EGS4, transportan explícitamente electrones secundarios por encima de un umbral de energía, pero también se descomponen a bajas energías. Esto se debe en parte a los pequeños tamaños de los subpasos que se utilizan a bajas energías; los subpasos muy pequeños no contienen suficientes interacciones para que las distribuciones de dispersión múltiple sean válidas. Los subpasos cortos no sólo hacen que la simulación se ralentice, sino que a menudo provocan una pérdida de energía de electrones imprecisa. Tanto en los algoritmos de clase I como en los de clase II, los subpasos grandes aumentan la eficiencia, pero los resultados pueden ser inexactos debido a una mala representación de la ubicación del electrón, ya que la aproximación de la trayectoria de vuelo recta empeora a medida que aumenta el tamaño del paso [47].

De este modo, aunque los códigos de clase II son más adecuados para el transporte cerca de interfaces que los códigos de clase I y también más precisos en términos de distribución espacial la principal deficiencia asociada con los códigos de clase II es el hecho de que, aunque el rezago en eventos difíciles se contabiliza naturalmente, los eventos suaves deben tratarse sobre la base de un esquema CSD apropiado o emplear distribuciones rezagadas restringidas que se conocen sólo de manera aproximada. Obviamente, para tratar mejor las interfaces, en última instancia habrá que eliminar el corte. Luego, los códigos de clase II se reducen al régimen microscópico y se obtiene una simulación *evento-por-evento* (también denominado clase III) [38]. Para tener en cuenta todas las colisiones individuales, es obligatorio desarrollar secciones transversales de dispersión única, lo que aumenta el tiempo de cómputo requerido, sin embargo, en la actualidad, el poder informático ha hecho posible que las simulaciones tipo *evento-por-evento* sean viables para el transporte de partículas en la región de unos pocos MeV, en donde el rezago se incluye de forma natural en todos los niveles. La principal dificultad es construir secciones transversales elásticas e inelásticas fiables para todo el rango de velocidad de impacto y pérdida de energía. De hecho, aquí es donde radican esencialmente las diferencias entre los códigos de clase III existentes [38].

#### **2.5.4.2. Técnica del *evento-por-evento***

Mediante una simulación MC analógica también denominada *evento-por-evento* se puede obtener una solución exacta al problema del transporte de partículas en la materia, dentro del conocimiento existente sobre los procesos elementales de colisión. En una simulación analógica se simulan explícitamente todas las interacciones de las partículas con los átomos y moléculas circundantes, incluidas las de las partículas secundarias creadas en las colisiones. Una técnica MC analógica es, por tanto, una simulación fiel de la realidad física en un ordenador digital [41], es decir, la simulación MC de la estructura del recorrido sigue la partícula incidente, así como todas las partículas secundarias producidas, desde las energías de arranque (MeV) o de eyección hasta

la parada total (unos pocos eV), mediante el procesamiento de eventos de dispersión elástica e inelástica. Este tipo de simulación requiere secciones transversales fiables para la interacción de la radiación con los átomos y moléculas del material en estudio. En las células biológicas de los tejidos blandos, el agua es el componente dominante y se encuentra en gran medida en estado líquido. Las secciones transversales de electrones son de especial interés porque los electrones se generan como partículas secundarias mediante todo tipo de radiación primaria [13]. El algoritmo analógico microscópico utiliza modelos teóricos para describir los procesos físicos siempre que es posible, toma muestras de las distribuciones reales del espacio de fases y predice las cantidades medias, así como los momentos superiores, lo que permite comprender las fluctuaciones significativas que pueden esperarse en un sistema real y que no pueden describirse utilizando la ecuación de Boltzmann debido a su naturaleza estadística [48]. Las simulaciones de este tipo, que preservan las correlaciones y reproducen las fluctuaciones de la mejor manera que permiten los modelos físicos utilizados, pueden considerarse simulaciones fieles a la realidad, esto quiere decir que, no sólo la media de las contribuciones converge con la media de la distribución real sino también la varianza y todos los momentos de orden superior; así pues, las fluctuaciones y correlaciones se conservan en principio como en el proceso físico real y es en este caso (y sólo en este caso) que se tiene una simulación real [24].

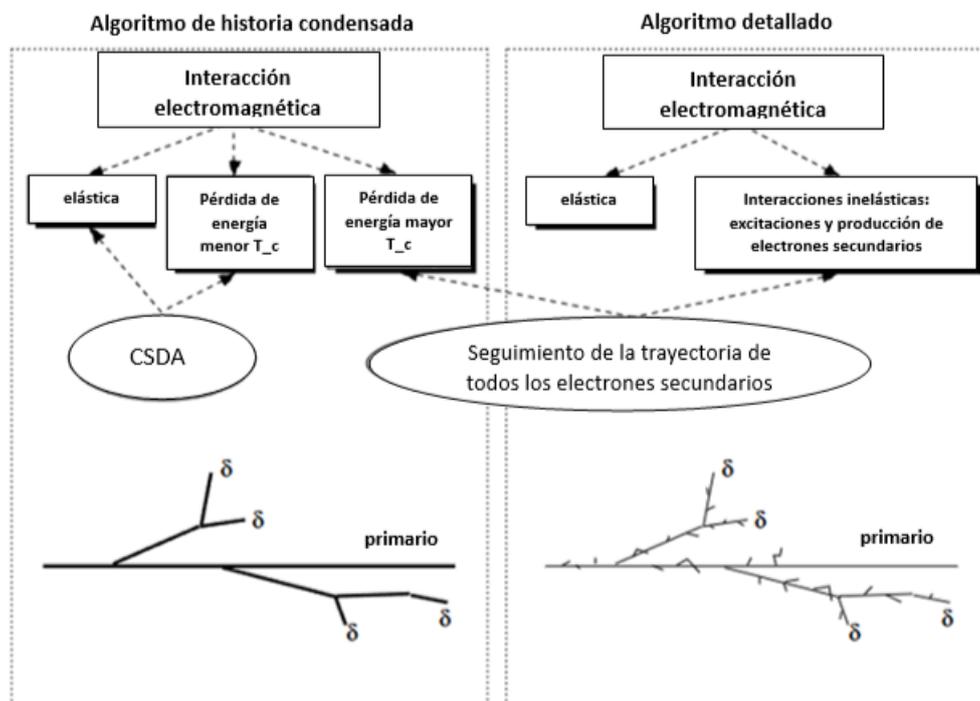


Figura 2.10: Comparación esquemática entre el algoritmo de historia condensada y el algoritmo analógico [52].

En este sentido, la técnica en sí es más simple que el modelo macroscópico ya que no depende de parámetros adicionales que gobiernan la agrupación y la distancia entre colisiones (Figura 2.10). Sin embargo, dependiendo de la energía de los electrones, la física implicada podría volverse considerablemente más complicada. Todavía hay una serie de secciones transversales poco conocidas a muy baja energía y, en ciertos casos, la simulación en medios condensados debe basarse en datos experimentales extrapolados de datos de la fase gaseosa. La complejidad de las técnicas utilizadas en el modelado microscópico varía considerablemente, aunque un enfoque común es ignorar las interacciones Bremsstrahlung. Los modelos simples utilizados en las primeras aplicaciones, en microscopía electrónica, por ejemplo, se han basado en la simulación exclusiva de eventos de dispersión elástica, calculando la longitud del paso entre colisiones consecutivas con la

trayectoria libre media elástica. Las pérdidas de energía se determinaron a partir de la teoría de Bethe de la potencia de frenado y, en algunos casos, se ha incluido una aproximación para tener en cuenta el rezago de las pérdidas de energía. La mejora de este modelo ha consistido en tener en cuenta las colisiones inelásticas, basándose el camino libre medio en la suma de las secciones transversales totales de cada tipo de interacción, que es la técnica básica comúnmente utilizada en la actualidad. A partir de este punto, la principal diferencia entre las aplicaciones microscópicas de MC existentes radica principalmente en las diferentes teorías, modelos o datos experimentales utilizados para explicar los procesos únicos de pérdida de energía que contribuyen (como la ionización y excitación electrónicas) y los refinamientos en las interacciones a bajas energías en la estructura de la capa atómica. También se pueden mencionar otras diferencias como la precisión de las secciones transversales elásticas (desde las secciones transversales apantalladas de Rutherford hasta las expansiones de onda parcial de Mott) o la generación y transporte de electrones secundarios y de orden superior [14].

La trayectoria o historia detallada de una partícula puede ser descrita por el siguiente arreglo

$$\begin{aligned}
 &T_0, T_1, T_2, \dots, T_n, \dots \\
 &\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n, \dots \\
 &\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n, \dots,
 \end{aligned} \tag{2.55}$$

donde  $T_n$  es la energía,  $\mathbf{u}_n$  la dirección, y  $\mathbf{r}_n$  la posición inmediatamente después de la  $n$ -ésima colisión, y donde el índice cero se refiere al estado inicial de la partícula. Dicha trayectoria puede generarse mediante muestreo aleatorio. La distribución de probabilidad para las transiciones de un estado al siguiente, es decir, de una columna de la matriz a la siguiente, viene determinada por las probabilidades de dispersión. En caso de que la partícula realice colisiones inelásticas en las que se pongan en movimiento electrones secundarios, la historia de estos últimos debe seguirse por separado. Muestreando muchas historias, es posible (en principio) resolver cualquier problema de difusión [43].

El objetivo de una simulación de MC *evento-por-evento* es obtener muestras de trayectorias de partículas a partir de una descripción de la posición del centro de dispersión y el proceso físico responsable de la interacción [48]. Este procedimiento de cálculo se repite secuencialmente para las partículas primarias y secundarias de mayor generación resultantes de la ionización por impacto. Las partículas, en este caso los electrones, son seguidos desde que disminuyen su velocidad hasta alcanzar un umbral de energía preestablecido, o simplemente hasta que se alcanza una determinada profundidad de penetración [4]. El resultado neto de un cálculo de transporte de MC es una trayectoria simulada que consta de las posiciones geométricas de todos los eventos de deposición de energía, así como la cantidad de energía depositada en cada punto de interacción [4]. Esta descripción muestra que la contabilidad es una tarea importante en la simulación del transporte de partículas [48].

De tal forma una simulación del transporte *evento-por-evento* de partículas consta de cuatro pasos principales:

- i) Selección de la distancia hasta la siguiente interacción.
- ii) El transporte de la partícula al sitio de interacción.
- iii) Selección del tipo de interacción.

#### iv) Simulación de la interacción seleccionada.

Las secciones transversales total y doblemente diferencial (DDCS) para todo el rango energético y angular necesarios para establecer una simulación analógica sólo están disponibles para varias moléculas pequeñas como  $\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{CO}_2$  [52], debido a que históricamente las mediciones y cálculos de dosis de radioterapia se habían realizado o especificado en términos de la dosis absorbida en el agua [41]. Esta es la razón por la que la mayoría de los códigos analógicos rastrean huellas de electrones en un entorno molecular de agua, y por la que los materiales reales suelen ser sustituidos por agua en la mayoría de las simulaciones [52].

Para los cálculos microdosimétricos, los métodos MC *evento-por-evento* se consideran los más precisos. La principal deficiencia de estos métodos es la gran necesidad de tiempo de cálculo [49]. Sin embargo, los cálculos nanodosimétricos MC precisos y el modelado molecular de un tumor multicelular podrían proporcionar información única para la predicción de las propiedades radiobiológicas de las trayectorias de radiación, lo cual es importante en la radioterapia para una planificación precisa de la dosis y en la protección radiológica para la evaluación del riesgo inducido por el cáncer [49].

Es bien sabido que la simulación MC analógica o *evento-por-evento* de electrones en geometrías de materiales complejas es generalmente poco práctica debido a la deflexión angular altamente puntiaguda y las secciones transversales diferenciales de pérdida de energía (DCS) y los MFP de colisión extremadamente pequeños que resultan de interacciones de Coulomb entre el electrón incidente y los núcleos y electrones objetivo [51]. Aunado a esto, las simulaciones son razonablemente seguras y, en general, no requieren precauciones particulares por parte del usuario, pero suelen ser ineficaces y convergen lentamente si no se cuenta con el poder informático adecuado. Dado que este tipo de cálculos MC toma muestras de las distribuciones físicas reales modelizadas, pueden fallar a la hora de predecir las contribuciones debidas a sucesos poco probables pero importantes [24].

En definitiva, el método analógico es potencialmente el método más preciso de simulación MC del transporte de partículas siempre y cuando la fuente de radiación y el medio se modelan con precisión y se ejecuta una gran cantidad de historias. Sin embargo, también requiere mucho tiempo debido a la cantidad de interacciones que se deben modelar; incluso cuando se excluyen las excitaciones del modelo de interacción, los electrones aún colisionan con el medio entre  $10^4$ - $10^5$  veces más a menudo que las partículas neutras en el rango de energía radioterapéutica. La mayoría de estas interacciones individuales sólo cambian ligeramente la energía y la trayectoria del electrón, pero su efecto acumulativo es significativo [47]. Y aunque puede ser posible obtener distribuciones estadísticas de ciertas cantidades estocásticas por medios analíticos, la simulación por computadora *evento-por-evento* ofrece una versatilidad y amplitud de detalle incomparables. Hoy en día existen varios códigos de este tipo que simulan el transporte de partículas cargadas en el agua (seleccionados debido a su relevancia biológica). Además, los efectos de fase y las interacciones de biomoléculas específicas también se han considerado con diversos grados de aproximación. Su sofisticación está, en principio, simplemente limitada por la disponibilidad de información física relevante. En el mejor de los casos, los resultados obtenidos son tan buenos como la información incorporada en el código, sobre todo las distintas secciones transversales de interacción [46].

#### 2.5.5. Códigos de simulación MC

A medida que las computadoras ganaron velocidad y capacidad de memoria, los códigos de MC se volvieron más sofisticados. La primera versión estaba escrita en código máquina, pero a

principios de los años 1960 se empezaron a utilizar lenguajes de programación como FORTRAN. Los rápidos avances en hardware, software informático y en estadística tuvieron gran influencia en la aplicación de las técnicas de MC que, a su vez, ayudó a mejorar el hardware y el software informático y se convirtieron en una de las herramientas más importantes de los estadísticos [40]. Al principio, el desarrollo de códigos de transporte de radiación para cada problema específico requirió mucho esfuerzo. Hoy en día, esto ya no es necesario debido a la disponibilidad de códigos de propósito general. La mayoría de los sistemas MC dedicados a la radioterapia se basan, parcialmente, en tales códigos. Por lo tanto, esta sección ofrece una descripción de algunos de estos códigos de simulación MC que utilizan como algoritmo base los descritos en la sección anterior [40].

El primer conjunto de códigos de simulación denominados como “la primera generación de códigos de transporte”, se ocupaba de las interacciones en el vapor de agua, con una densidad escalada a la del líquido. El agua, como se mencionó en la sección 2.4, ha sido vista a menudo como el arquetipo del material tisular. El uso de la fase de vapor permite que las deposiciones de energía (ionizaciones, excitaciones) estén bien localizadas; por otro lado, no se pudieron incluir fenómenos específicos de la fase condensada, como las excitaciones plasmónicas, que se cree que son importantes en el ADN rodeado por agua estructural. En la segunda generación de códigos se notó el cambio de la fase gaseosa a la fase líquida o sólida del agua; y la inclusión de una estructura geométrica que representa una pieza oligomérica de ADN. Implícita en este enfoque está la suposición de que la física del ADN puede aproximarse bien a la del agua (líquido o vapor) [39]. Los avances en la física del estado sólido, así como la mayor disponibilidad de supercomputadores de alta velocidad, hacen que la perspectiva de obtener una descripción mecánico-cuántica del ADN y su inclusión en el código de transporte sea bastante realista. Esta etapa se denomina como “la tercera generación de códigos de transporte” [48]. Los códigos MC desarrollados para el transporte de partículas cargadas a partir de los datos experimentales de las fases líquida y gaseosa (esta última más extensa) han ofrecido una valiosa oportunidad para comprender de mejor manera la física simulada en cada entorno [39].

Los modelos informáticos de MC que simulan el transporte detallado de electrones en agua líquida son valiosos para la interpretación y comprensión de hallazgos en la química y biología de la radiación. Debido a la escasez de datos experimentales, tales esfuerzos deben basarse en principios teóricos y un juicio considerable en su desarrollo. La verificación experimental de entradas numéricas sólo es posible de forma limitada. Se puede obtener apoyo indirecto para la validez del modelo comparando los detalles entre dos códigos de computadora desarrollados independientemente, así como los resultados observables calculados con ellos [45].

Los códigos de estructuras de recorridos de MC que utilizan agua en sus diferentes fases (vapor, líquido, hielo) como sustituto del tejido biológico han sido de interés durante mucho tiempo [45]. El primer paso en la construcción de un modelo de simulación de estructura de seguimiento de electrones es la determinación de los coeficientes de atenuación parcial, o caminos libres medios inversos, asociados con los procesos de ionización, excitación y dispersión elástica de electrones en agua líquida como funciones de energía. Si bien se dispone de considerables datos experimentales sobre el vapor de agua, las mediciones para el líquido presentan problemas formidables y en gran medida faltan [45].

Estos procesos de interacción son fundamentales para el interés básico en muchos campos, pero su inclusión en los códigos de transporte de MC de propósito general impone el requisito de que estén disponibles datos de secciones transversales razonablemente precisos en una gama muy amplia de energías y para prácticamente cualquier material [53].

De manera general las simulaciones de MC proporcionan alternativas convenientes ya que permiten reproducir la característica estocástica de las interacciones de partículas primarias y secundarias en los medios irradiados. En el caso de los electrones, varios códigos informáticos se basan en el muestreo de distribuciones dispersas de energía y de dispersión múltiple (historia condensada), mientras que para los fotones y en algunos casos los electrones se practica la simulación de interacciones individuales (*evento-por-evento*). Los códigos de historia condensada como ETRAN, EGS, MNCP, PENELOPE, entre otros, pueden calcular distribuciones de deposición de energía y se utilizan para resolver una amplia gama de problemas dosimétricos, pero fallan en situaciones específicas donde la composición fisicoquímica de la materia es importante en las interacciones de los electrones. Su exactitud puede depender de ciertas condiciones restrictivas. En particular, estos métodos resultan inadecuados en lo que respecta al transporte de electrones en placas muy delgadas o en materiales con un número atómico elevado [38].

El código PENELOPE (del acrónimo PENetration and Energy LOSS of Positrons and Electrons) desarrollado por la Universitat de Barcelona, el Institut de Tècniques Energètiques, la Universitat Politècnica de Catalunya en Barcelona, España, y la Universidad Nacional de Córdoba, Argentina [40], es un sistema de código MC de uso general para la simulación del transporte acoplado de electrones y fotones en estructuras de materiales complejos. Su rasgo más característico es el uso sistemático de simulación mixta (esquemas de clase II en la terminología de Berger) para electrones y positrones. Esto no sólo mejora la precisión de la simulación, sino que también simplifica la estructura y el funcionamiento del código. La fiabilidad del código ha sido probada mediante extensas comparaciones con datos experimentales y con resultados de códigos detallados [13].

El código ETRAN (Electron TRANsport), desarrollado y mantenido en el Instituto Nacional de Estándares y Tecnología (NIST), contiene los algoritmos básicos para simular las trayectorias de electrones y fotones que viajan a través de la materia. El código se desarrolló originalmente como una herramienta para resolver problemas de transporte de electrones que implicaban energías de hasta unos pocos MeV. Posteriormente se añadió la producción y propagación de radiación Bremsstrahlung secundaria, para ampliar el cálculo a energías superiores. Los métodos utilizados para generar trayectorias de electrones se remontan a un artículo de Berger (1963), que describe el muestreo a partir de distribuciones de dispersión múltiple. A principios de la década de 1970 el código ETRAN se hizo más fácil de usar, especialmente en lo que respecta a la especificación de la geometría del problema, y se hicieron extensiones para energías más bajas al incluir modelos de ionización y relajación más elaborados. El software combinado se denominó sistema Integrated TIGER Series (ITS) (Halbleib et al 1988). El Laboratorio Nacional de Los Álamos (LANL) integró los algoritmos de transporte de electrones de ITS 3.0 en su código MCNP3 (Monte Carlo Neutron Photon), generando el sistema MCNP4 (Monte Carlo N-Particle), que se lanzó por primera vez en 1990. Basado en este código, un grupo diferente en LANL desarrolló MCNPX, que puede usarse para simular muchos tipos adicionales de partículas [40].

Por otro lado, los estudios computacionales de estructuras de seguimiento de partículas cargadas en medios condensados realizados con los llamados códigos MC *evento-por-evento* (o detallados), como MOCA14 y TRION [54], o para simulaciones de seguimiento de electrones en agua como; MOCA8b OREC, CPA100, DELTA, ETRACK y KURBUC [46], utilizan una variedad de métodos para construir las secciones transversales necesarias para el transporte de la partícula cargada o la simulación de seguimiento. La mayoría de los códigos emplean el mismo conjunto de datos experimentales publicados pero diferentes métodos teóricos y computacionales [46].

Estos códigos son esencialmente equivalentes, aunque pueden existir diferencias en cuanto al tratamiento de procesos particulares; por ejemplo, en algunos códigos, los electrones de

subexcitación no se siguen más, mientras que en otros los electrones se transportan hasta alcanzar energías térmicas. La decisión de incluir dichos procesos (que pueden requerir tiempos de ejecución más prolongados) depende del tipo de cantidades microdosimétricas que se calcularán: por ejemplo, si el propósito del cálculo es reproducir espectros microdosimétricos obtenidos con un contador proporcional (en el que sólo se detectan ionizaciones) se pueden ignorar con seguridad los electrones de subexcitación. Por otro lado, el tratamiento de la interacción y difusión de especies radicales inducidas por la partícula cargada en agua es muy sensible a la posición final del electrón (electrones acuosos) [4].

El código OREC, desarrollado en el Laboratorio Nacional de Oak Ridge, fue diseñado desde el principio para aplicarse al agua en forma líquida, y utiliza secciones transversales de interacción inferidas de datos experimentales sobre este material. Se ha utilizado para muchos problemas interesantes y los resultados de este código se han comparado con pruebas experimentales y con resultados de cálculos de MC realizados por otros grupos [39].

Los cálculos con OREC comienzan con un tipo específico de partícula cargada primaria, que tiene una posición inicial y una velocidad determinadas en un medio líquido-agua. Se selecciona una distancia de vuelo para la ubicación de la primera colisión, basándose en el camino libre medio inverso total para la dispersión elástica e inelástica. Los valores numéricos para las trayectorias libres medias inversas, así como todos los demás datos numéricos, se basan en una combinación de mediciones (cuando estén disponibles) y teoría. Estos extensos datos de entrada al código están bajo revisión continua a medida que se realizan más estudios de detalles [39]. Por ejemplo, las secciones transversales inelásticas utilizadas en OREC se derivan de una función compleja de respuesta dieléctrica desarrollada específicamente para agua líquida en donde el código considera explícitamente las etapas fisicoquímicas y químicas [14].

Dado el lugar de la colisión, el código selecciona un tipo de interacción, elástica o inelástica. Si es lo último, entonces se debe elegir entre excitación o ionización; y se asigna una transición entre estados cuánticos específicos. Se han desarrollado algoritmos para tratar todas las posibilidades y proporcionar explícitamente el estado residual de la molécula de agua y el estado propio de momento de la partícula primaria dispersa, así como el del electrón secundario, cuando se produce la ionización. Todos los electrones secundarios son transportados hasta que sus energías caen por debajo del umbral supuesto de 7.4 eV para las transiciones electrónicas en agua líquida. Para simular el transporte de la partícula primaria, este proceso se puede repetir hasta que su energía se degrade por debajo del umbral; y así se genera toda la trayectoria [39].

En OREC, el paso de una partícula cargada primaria deja así a su paso una serie de moléculas de agua ionizadas y excitadas,  $\text{H}_2\text{O}^+$  y  $\text{H}_2\text{O}^*$ , en estados cuánticos explícitos y electrones de subexcitación,  $e_{sub}^-$ , con energías específicas  $< 7,4$  eV. Este arreglo se forma muy rápidamente ( $\leq 10^{-15}$  s) en varios cientos de angstroms en la trayectoria de la partícula primaria. A partir de los  $10^{-15}$  s, el código informático RADLYS, utilizando también técnicas de MC, simula luego el desarrollo de la trayectoria a través de las etapas prequímicas ( $10^{-15}$  s a  $10^{-12}$  s) y química ( $> 10^{-12}$  s). Los productos iniciales de OREC dan lugar a las siguientes especies químicas: OH, H,  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $e_{ac}$ , y  $\text{H}_2$ . El paso de la partícula primaria y de todos los electrones secundarios da como resultado una disposición espacial de estas especies en un tiempo de  $10^{-12}$  s. La identidad y posición de cada especie, determinada por los procedimientos de MC, se conoce explícitamente. A partir de  $10^{-12}$  s, RADLYS simula el paso posterior del tiempo mediante camino aleatorio (difusión) de los reactivos individuales y sus posibles reacciones entre sí, o con moléculas de soluto, si están presentes [39].

En 2003 se publicó un nuevo código MC *evento-por-evento* llamado NOREC, que reemplaza

el código de transporte de electrones OREC, después de una serie de modificaciones al código, incluida la sustitución de las secciones transversales elásticas de OREC originales según un conjunto de datos más reciente del Instituto Nacional de Estándares y Tecnología (NIST). Un estudio previo presentó una serie de comparaciones entre OREC y NOREC, concluyendo que las modificaciones a OREC tienen poco o ningún efecto en electrones de baja energía (por ejemplo, 10 keV), mientras que estas modificaciones sí afectan significativamente las características de penetración de los electrones (por ejemplo, distribución de dosis de profundidad), especialmente aquellos de electrones de alta energía (por ejemplo, 800 keV). Además, este estudio demostró que el código NOREC produce en buen acuerdo con un código de historia condensada ETRAN, resultados para la distribución de dosis en profundidad para electrones de alta energía ( $>800$  keV), mientras que OREC produce recorridos de electrones significativamente menos penetrantes con esta energía electrónica [54].

Los códigos *evento-por-evento* como NOREC pueden manejar energías electrónicas relativamente altas ( $\sim 1$  MeV) y proporcionar algunas ventajas sobre los códigos de historia condensada, porque podrían usarse para problemas tanto macro como micro-dosimétricos y superar las limitaciones típicas asociadas con los códigos de historia condensada, incluidos: (a) ausencia de transporte de electrones por debajo de la energía de corte típicamente en el rango de keV, (b) dependencia del tamaño del paso del transporte de electrones y (c) limitación de la resolución espacial de los volúmenes de puntuación de dosis [54].

El código NOREC calcula el transporte detallado de un electrón primario y todos sus secundarios en agua líquida en un rango de energías desde 1 MeV hasta menos de 7.4 eV, el umbral supuesto para las transiciones electrónicas en agua líquida. El código es capaz de simular los eventos físicos que ocurren localmente en un segmento de trayectoria dentro de unos  $10^{-15}$  s después del paso de un electrón [54].

El usuario necesita escribir un código de usuario que incluya una función, “generateTrack”, para iniciar el transporte de un electrón. Los parámetros de entrada para esta función son [54]:

- La energía cinética inicial del electrón en eV (es decir,  $7,4 < T < 1000000$ ).
- Las coordenadas de la posición inicial del electrón en micras.
- Los cosenos directores iniciales del electrón.

Los datos registrados incluyen la ubicación, el tipo de interacción, la energía depositada y otra información en cada punto de interacción. Lo ideal sería que la simulación informática coincidiera estadísticamente con el comportamiento real de una partícula primaria real y sus secundarias en la naturaleza. En principio, este objetivo puede alcanzarse si se incluyen en un código MC probabilidades y secciones transversales realistas para todos los sucesos posibles. Los resultados calculados deberían coincidir con los observados experimentalmente. Desgraciadamente, un programa computacional de este tipo no puede realizarse en la actualidad porque una gran parte de los datos de entrada necesarios para los cálculos nunca se han medido y siguen siendo inaccesibles a la observación directa. Por ejemplo, los caminos libres medios inversos doblemente diferenciales de los electrones en el agua líquida no se han medido experimentalmente, especialmente a bajas energías. Muchas de las secciones transversales y otros datos de los códigos se basan en modelos teóricos y aproximaciones con las consiguientes incertidumbres. Sin embargo, todavía se pueden hacer algunas comparaciones directas importantes entre los resultados calculados y los medidos, como los rendimientos químicos tras la irradiación de agua pura y soluciones. Aunque es esencial obtener una concordancia entre los cálculos y las mediciones, estas comparaciones sirven de poco

para validar los códigos o los datos de entrada detallados en los que se basan las simulaciones. La concordancia es una condición necesaria, pero no suficiente; de lo contrario, el código se rechazaría o modificaría [8].

Recientes investigaciones sobre la obtención de cantidades macroscópicas mostraron que la discrepancia entre los códigos MC de electrones de historia detallada y de historia condensada podría ser significativa (por ejemplo  $<10\%$ ), dependiendo de la energía del electrón. A lo largo de los años, las comparaciones entre los códigos de historia detallada con códigos de historia condensada se centraron principalmente en probar la capacidad de los códigos históricos condensados para generar cantidades microdosimétricas. Hasta donde se sabe, la comparación que muestra las características de los códigos detallados para el régimen de microdosimétrico aún es escasa en este momento. En principio, los códigos MC detallados pueden proporcionar resultados más precisos que los códigos de historia condensada, siempre que reflejen adecuadamente todos los procesos físicos [54].

Los motores de cálculo de dosis MC tienen el potencial de cumplir, o incluso funcionar mejor, mientras el requisito de incertidumbre sea menor o igual al 3%, independientemente de la geometría del haz y la composición del medio irradiado. Sin embargo, como ocurre con cualquier tipo de motor de dosis, la incertidumbre para un motor de dosis MC nunca será cero debido principalmente a la coincidencia imperfecta del haz MC con el haz del acelerador real, las incertidumbres en la base de datos de secciones transversales, la desviación estándar debido al número limitado de historias simuladas, entre otras. La calidad de la adaptación del haz es muy difícil de estimar, pero en general debería ser posible lograrla dentro del 1%. La mayoría de los autores suponen que la incertidumbre en las bibliotecas de secciones transversales es lo suficientemente pequeña como para ser insignificante [40]. Sin embargo, la incertidumbre estadística de cálculo que depende del número  $n$  de historias de partículas simuladas, puede disminuir en  $n^{-1/2}$  dependiendo de la precisión deseada o de la complejidad y tamaño de la geometría, lo cual conlleva a tiempos de cálculo muy largos [4]. La incertidumbre asociada con la caracterización de tejidos es otro factor importante a tomar en cuenta en un cálculo dosimétrico, ya que, si se desea lograr reducir este factor en lugar de utilizar agua con diferentes densidades para todos los tipos de tejido, se debe estimar la composición real del tejido para el cálculo de las secciones transversales de una manera más precisa [40].

Teniendo en cuenta todas las incertidumbres mencionadas anteriormente, se espera que la planificación del tratamiento MC pueda ofrecer una incertidumbre en el cálculo de la dosis dentro del 3% necesaria para una radioterapia precisa. Fraass et al (2003) presentaron otras ventajas, al observar que, sobre los motores de dosis convencionales, las incertidumbres son independientes de la configuración del tratamiento. Además, el método de MC es capaz de dar lugar a un aumento de la confianza en las distribuciones de dosis obtenidas. Esto podría conducir a la administración de una dosis tumoral más alta para evitar la recurrencia, teniendo fe en la dosis informada a los órganos críticos [40].

De este modo, cualquier tipo de problema dosimétrico se puede llevar a cabo en la medida en que se conozcan las secciones transversales y los mecanismos de interacción relevantes. Dado que el conocimiento de estos factores es incompleto, la simulación de MC se puede utilizar para probar varias hipótesis. De esta manera, se convierte en una herramienta importante y eficaz para estudiar los mecanismos de daño por radiación a las moléculas biológicas. Los resultados previstos se pueden comparar con las mediciones y la simulación puede sugerir nuevos experimentos. La concordancia con los datos medidos es una condición necesaria, pero no suficiente, para establecer la validez del modelo y sus supuestos relacionados. Sin embargo, las pruebas exitosas con una amplia variedad de mediciones en diferentes condiciones aumentan la confianza en su corrección

y utilidad [39].

A diferencia del método MC otros enfoques adolecen de incertidumbres sistemáticas cuya magnitud puede ser imposible de estimar. Sin embargo, estos métodos pueden resultar útiles si el tiempo de cálculo para un enfoque de MC es inasequible. Si un cálculo es factible mediante los métodos de MC, no es necesario estimar los errores sistemáticos y se puede proceder con cierta confianza para abordar otros problemas. Si se tiene en cuenta el esfuerzo humano, en última instancia, el enfoque del método MC puede resultar el más productivo [23, 44].

Se puede concluir que el método MC representa una herramienta matemática útil y eficaz en diferentes áreas de la física de las radiaciones y dosimetría. Las diferentes técnicas utilizadas en este campo han contribuido al desarrollo de sofisticadas herramientas de cálculo de gran valor en física de la radiación. La creciente disponibilidad de computadoras, redes de alta velocidad en los hospitales, y la existencia de códigos públicos bien documentados y respaldados, seguramente aumentarán el número de aplicaciones y comunicaciones científicas en el futuro. Sin embargo, es importante ser consciente de las limitaciones del método. El método MC no es una caja negra mágica que proporciona la respuesta correcta a todo tipo de simulaciones. Como se mencionó anteriormente, existen algunas deficiencias de las técnicas macroscópicas comúnmente utilizadas para el transporte de electrones. Éstos sugieren la combinación de técnicas macroscópicas y microscópicas en rangos de energía o geometrías donde cada técnica es más eficiente. Un problema importante referente a estas aproximaciones que sólo son válidas para determinadas aplicaciones se ha implementado en aplicaciones en las que no son válidas, arrojando resultados erróneos. Es por ello que, es obligatorio realizar pruebas y comparaciones del código MC con otros códigos y experimentos bien conocidos; incluso si la simulación real no se puede comparar, siempre es posible seleccionar casos relacionados para los cuales existan resultados disponibles [14]. No habría duda de cómo debería plantearse un problema dosimétrico si se dispusiera de una teoría completa; pero entonces el cálculo de MC se volvería innecesario. Lo importante es que incluso las teorías incompletas y parciales, cuando se combinan adecuadamente, pueden proporcionar suficiente información para ser utilizadas en muestreos con bastante precisión [43].



# Capítulo 3

## Metodología

En este trabajo, el código de simulación MC programado en el compilador Dev C++ denominado MCET\_mx tiene la finalidad simular el transporte electrones *evento-por-evento* de 0.001 a 3 MeV en un entorno rodeado completamente de agua. El módulo de transporte de electrones utiliza técnicas MC para seguir la historia de los electrones primarios y todos los electrones secundarios creados simulando colisiones elásticas, inelásticas (ionizaciones, excitaciones) y radiativas hasta que la energía del electrón simulado este por debajo del umbral de energía (1 keV). La obtención de información de todas las cantidades importantes de (todas) las interacciones, como el tipo y las coordenadas de la interacción, la energía depositada, la energía inicial del electrón secundario con su correspondiente dirección de emisión se realiza en regiones de puntuación esféricas de diferentes radios.

### 3.1. Supuestos

Para el desarrollo de una simulación del transporte de radiación primeramente se deben de tener en cuenta ciertas consideraciones y bajo qué supuestos se rige la simulación. En este caso la historia de un electrón a través del agua se rige bajo supuestos generales los cuales se enuncian a continuación:

- i) Los electrones primarios son emitidos isotrópicamente de una fuente puntual ubicada en el centro de las regiones esféricas de puntuación.
- ii) La trayectoria del electrón se define como una secuencia de segmentos de línea recta que conectan eventos de interacción sucesivos (colisiones elásticas, inelásticas o nucleares); estos últimos están representados por puntos geométricos que ignoran las incertidumbres de la mecánica cuántica.
- iii) El medio de transporte se define como una colección de objetivos puntuales (en este caso, moléculas de agua) que se distribuyen uniformemente con simetría cilíndrica y se tratan en la aproximación de la fase gaseosa, es decir, se desprecian las interacciones intermoleculares y los resultados son extrapolados en la fase condensada mediante un ajuste de densidad.

#### Supuestos específicos.

- a) Los eventos de excitación no inducen ninguna desviación angular. Esta es una condición suficiente, ya que la deflexión angular de los electrones está determinada abrumadoramente por eventos elásticos.
- b) Las transiciones no electrónicas, es decir, la excitación directa de los modos rotacional, vibratorio y traslacional, se han despreciado ya que su contribución es significativa para energías cinéticas  $T$  por debajo de aproximadamente 10 eV.

- c) La pérdida y deposición de energía resultan únicamente de eventos inelásticos y nucleares, ya que las colisiones elásticas electrón-átomo (o molécula) son responsables sólo de cantidades mínimas de deposición de energía.
- d) De acuerdo con la aproximación de la fase gaseosa y la geometrización puntual de los objetivos, se supuso que cualquier energía potencial resultante de un evento de ionización, excitación, nuclear se deposita “en el lugar” (es decir, en el punto de producción); lo mismo ocurre con la energía cinética residual de las partículas por debajo del valor de corte elegido. Ambos supuestos son obviamente una simplificación excesivamente conveniente, aunque necesaria.

Los supuestos anteriores han sido habitualmente adoptados de una forma u otra en el desarrollo de otros códigos similares [55]. Sin embargo, el uso de secciones transversales en fase gaseosa para el transporte de partículas en agua condensada es el que más ha sido cuestionado. Aunque debido a la falta de datos experimentales apropiados para probar secciones transversales evaluadas teóricamente para el estado condensado (que dependen en gran medida de cálculos de mecánica cuántica) la incertidumbre que acompaña a dichos cálculos parece por el momento ser mayor que cualquier discrepancia por corregir. De tal forma, esta suposición es un argumento serio a favor del uso continuo de la aproximación de la fase gaseosa, que está respaldada tanto por datos experimentales bien probados como por teoría establecida [56].

### 3.2. Simulación de eventos de interacción

El método MC aplicado al transporte de radiación en un medio particular consiste en muestrear a partir de números pseudoaleatorios generados por computadora una variable de interés (pérdida de energía, ángulo de dispersión, etc.) a partir de su distribución de probabilidad o función de distribución acumulativa. En este caso, el muestreo por MC permite determinar la distancia hasta la siguiente interacción, el tipo de interacción que ocurrió y la energía y dirección de los electrones resultantes posterior a una cierto tipo de colisión.

La simulación de la trayectoria o historia de cada electrón seguido requiere como datos de entrada secciones transversales diferenciales y totales para describir, paso a paso, todas las interacciones inducidas por los electrones con las moléculas del medio. La trayectoria libre media de la interacción dependiente de la energía se deduce de la sección transversal de interacción total, que a su vez depende de las secciones transversales individuales totales para todo tipo de interacciones. Luego, las secciones transversales diferenciales permiten determinar, después de un muestreo estocástico, el estado del sistema después de un cierto tipo de interacción. Cada una de las variables aleatorias (ángulo de deflexión, pérdida de energía, etc.), necesarias durante la simulación, se muestrean a partir de su ley de probabilidad específica derivada de la sección transversal correspondiente. En esta sección se describe el algoritmo seguido para la determinación del ángulo de deflexión y la pérdida de energía de los electrones tanto primarios como los secundarios en el rango de energía establecido.

Cuando un electrón energético interactúa de manera elástica con las moléculas de agua el ángulo de deflexión de los electrones emitidos posterior a la colisión es determinado al aplicar el método de transformación inversa a la PDF del ángulo de dispersión  $\theta$  dada por la ecuación (2.30). La función acumulativa normalizada de la sección transversal de dispersión elástica se calcula entonces en función del ángulo de dispersión de la siguiente manera [26]:

$$\begin{aligned}\sigma(\theta) &= \frac{2\pi}{\sigma_{el,tot}} \int_0^\theta \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta \\ &= \frac{A_{s,M} + 1}{A_{s,M} + \sin^2\theta/2} \sin^2\theta/2\end{aligned}\quad (3.1)$$

Luego el ángulo de deflexión angular se elige generando un número aleatorio  $\xi$  uniformemente distribuido entre 0 y 1, para establecer un valor a la función acumulativa (es decir,  $\xi = \sigma(\theta)$ ). De este modo se tiene que,

$$\xi = \frac{A_{s,M} + 1}{A_{s,M} + \sin^2\theta/2} \sin^2\theta/2 \quad (3.2)$$

Utilizando la identidad  $\sin^2\theta/2 = (1 - \cos\theta)/2$ , se tiene que el ángulo al que será dispersado el electrón incidente al interactuar con la molécula en conjunto dado un número aleatorio uniformemente distribuido esta dado por

$$\theta = \cos^{-1} \left( 1 - \frac{2A_{s,M}}{A_{s,M} + 1 - \xi} \right) \quad (3.3)$$

El muestreo del ángulo azimutal  $\phi$ , el cuál será el mismo para cada tipo de interacción, es muestreado en el intervalo  $(0, 2\pi)$  uniformemente de la siguiente forma [3]

$$\phi = 2\pi\xi \quad (3.4)$$

En el caso que el electrón simulado sufra una colisión inelástica suave o dura con las moléculas del medio el método consiste en realizar el muestreo en dos pasos, en donde primero se muestrea el oscilador activo y luego se muestrean los valores para  $W$  y  $\Omega$  de la sección transversal diferencial de ese oscilador. La primera etapa de la simulación es la selección del oscilador activo, por lo cual se requiere conocer la sección eficaz total [3].

Para que el algoritmo seleccione el oscilador activo, primeramente, se deben calcular las sección transversal total inelástica, esto es

$$\sigma_{in} = \int_0^{W_{max}} \frac{d\sigma_{in}}{dW} = \sigma_{in,l} + \sigma_{in,t} + \sigma_{in,c} \quad (3.5)$$

*i.e.*,

$$\sigma_{in} = \sum_k \sigma_k \quad (3.6)$$

El oscilador activo entonces se calcula a partir de la probabilidad puntual  $p_k = \sigma_k / \sigma_{in}$ . Después de seleccionar el oscilador activo, se determina el tipo interacción (distante o cercana) y, finalmente, se muestrean las variables  $W$  y  $\theta$  del DCS asociado [3].

En las interacciones tipo distantes la pérdida de energía debido a excitaciones del  $k$ -ésimo oscilador corresponden a la energía de dicho oscilador, es decir,  $W = W_k$ . Si la interacción es (distante) transversal, tal como se mencionó en los supuestos, el electrón proyectado no sufre ninguna deflexión angular, de modo que  $\theta = 0$ . Para interacciones tipo longitudinales la función de distribución de probabilidad de  $Q$  está dada por

$$P(Q) = \begin{cases} \frac{1}{Q(1+Q/2m_e c^2)} & \text{si } Q_- < Q < W_k, \\ 0 & \text{de lo contrario.} \end{cases} \quad (3.7)$$

El muestreo aleatorio de esta función se realiza aplicando el método de transformación inversa, que proporciona la siguiente función de muestreo [3]:

$$Q = Q_s \left( \left[ \frac{Q_s}{W_k} \left( 1 + \frac{W_k}{2m_e c^2} \right) \right]^\xi - \frac{Q_s}{2m_e c^2} \right)^{-1}, \quad (3.8)$$

donde

$$Q_s = \frac{Q_-}{1 + Q_-/2m_e c^2}. \quad (3.9)$$

Después de haber sido muestreadas la pérdida de energía y la energía de retroceso, el ángulo de dispersión polar  $\theta$ , se determina como

$$\cos(\theta) = \frac{T(T + 2m_e c^2) + (T - W_k)(T - W_k + 2m_e c^2) - Q(Q + 2m_e c^2)}{2\sqrt{T(T + 2m_e c^2)(T - W_k)(T - W_k + 2m_e c^2)}}. \quad (3.10)$$

Si el tipo de interacción es cercana, se introduce en el algoritmo una cantidad denominada *pérdida de energía reducida*, definida como  $\kappa = W/(T + U_k)$ . La PDF de  $\kappa$  para interacciones cercanas de electrones con el  $k$ -ésimo oscilador esta dado por [3]

$$P_k(\kappa) \equiv \kappa^{-2} F^-(T, W) \Theta(\kappa - \kappa_c) \Theta(1/2 - \kappa) \\ = \left[ \frac{1}{\kappa^2} + \frac{1}{(1 - \kappa)^2} - \frac{1}{\kappa(1 - \kappa)} + a \left( 1 + \frac{1}{\kappa(1 - \kappa)} \right) \Theta(\kappa - \kappa_c) \Theta(1/2 - \kappa) \right], \quad (3.11)$$

donde  $\kappa_c = W_k/T$ . Note que el máximo valor permitido que puede tomar  $\kappa$  es 1/2. Ahora se introduce la función de distribución

$$\Phi^-(\kappa) = (\kappa^{-2} + 5a) \Theta(\kappa - \kappa_c) \Theta(1/2 - \kappa), \quad (3.12)$$

la cual cumple con la desigualdad  $\Phi > P_k$  en el intervalo  $(\kappa_c, 1/2)$ . Con esta condición se puede muestrear la pérdida de energía reducida  $\kappa$  de la función  $P_k$  usando el *método de rechazo* con valores de prueba muestreados de la distribución  $\Phi$  con probabilidad de aceptación  $P_k/\Phi$ .

El muestreo aleatorio de la PDF  $\Phi$  se puede realizar utilizando el método de composición. Primero se realiza la descomposición de la FDP normalizada [3] :

$$\Phi_{norm}^-(\kappa) = \frac{1}{1 + 5a\kappa_c/2} [p_1(\kappa) + (5a\kappa_c/2)p_2(\kappa)], \quad (3.13)$$

con

$$p_1(\kappa) = \frac{\kappa_c}{1 - 2\kappa_c} \kappa^{-2}, \quad p_2(\kappa) = \frac{2}{1 - 2\kappa_c}.$$

Las cuales son funciones de distribución normalizadas en el intervalo  $(\kappa_c, 1/2)$ . Así, los valores aleatorios para  $\kappa$  de  $\Theta$  pueden ser generados usando el siguiente algoritmo:

- i) Generar un número aleatorio  $\xi$ .
- ii) Establecer  $\zeta = (1 + 5a\kappa_c/2)\xi$ .
- iii) Si  $\zeta < 1$  entrega el valor  $\kappa = \kappa_c/[1 - \zeta(1 - 2\kappa_c)]$ .
- iv) Si  $\zeta > 1$  entrega el valor  $\kappa = \kappa_c + (\zeta - 1)(1 - 2\kappa_c)/5a\kappa_c$ .

El algoritmo de rechazo para el muestreo aleatorio de  $\kappa$  a partir de  $P_k$  procede de la siguiente manera

- i) Muestrear  $\kappa$  de la distribución  $\Phi$ .
- ii) Generar un nuevo número aleatorio  $\xi$ .
- iii) Si  $\xi(1 + 5a\kappa^2) < \kappa^2 P_k(\kappa)$ , entonces se entrega el valor  $\kappa$ .
- iv) Si no ir al paso i) y repetir el proceso.

Cuando el algoritmo determina el valor para  $\kappa$ , entonces la pérdida de energía del electrón incidente es  $W = \kappa(T + U_k)$  y el ángulo polar de dispersión  $\theta$  con  $Q = W$  se calcula como

$$\cos^2(\theta) = \frac{T - W}{T} \frac{T + 2m_e c^2}{T - W + 2m_e c^2}. \quad (3.14)$$

Según el modelo GOS cada oscilador  $W_k$  corresponde a una capa con  $f_k$  electrones y energía de ionización  $U_k$ . Tras una colisión con un electrón del orbital interno, el electrón primario tendrá una energía cinética  $T - W$ , mientras que el electrón secundario (rayo  $\delta$ ) será expulsado con una energía cinética  $T_s = W - U_k$  y el ion residual queda en un estado excitado, con una vacante en la  $k$ -ésima capa, que corresponde a una energía de excitación igual a  $U_k$ . Esta energía se libera finalmente mediante la emisión de rayos X y electrones Auger. Sin embargo, debido a las limitantes de este modelo, se supone que el potencial de ionización  $U_k$  se depositada localmente [3].

Para establecer la dirección inicial del rayo  $\delta$ , se asume que el electrón objetivo está inicialmente en reposo, es decir, el rayo  $\delta$  se emite en la dirección de la transferencia de momento lineal  $\mathbf{q}$ . De modo que el ángulo polar de emisión del electrón secundario debido a una colisión cercana está dado por [3]

$$\cos_s \theta(Q = W) = \left( \frac{W}{T} \frac{T + 2m_e c^2}{W + 2m_e c^2} \right)^{1/2}, \quad (3.15)$$

el cual concuerda con el resultado de colisiones con electrones libres en reposo. Dado que la transferencia de momento se encuentra en el plano de dispersión (el plano formado por los momento inicial y final del proyectil), el ángulo azimutal de emisión es [3]

$$\phi_s = \pi + \phi. \quad (3.16)$$

Finalmente, si la interacción es de tipo nuclear, el algoritmo de muestreo está descrito por un DCS atómico diferencial en la pérdida de energía  $W$ , la cual se interpreta como la probabilidad de emisión de un fotón de energía  $W$  dado un electrón incidente con energía  $T$  y se expresa convenientemente de la forma [57]:

$$\frac{d\sigma_{br}}{dW} = \frac{Z^2}{\beta^2} \frac{1}{W} \chi(Z, T, \kappa), \quad (3.17)$$

donde  $\kappa$  es la energía del fotón “reducida” definida como  $\kappa = W/T$ , la cual toma valores entre 0 y 1. El término  $\chi(Z, T, \kappa)$  es conocido como la *sección eficaz diferencial de Bremsstrahlung total de pérdida de energía escalada*. Seltzer y Berger (1985, 1986) produjeron tablas extensas del DCS escalado para todos los elementos ( $Z=1-92$ ) y para energías de electrones de 1 keV a 10 GeV. Tabularon los DCS escalados para la emisión en el campo (apantallado) del núcleo (electrón-núcleo Bremsstrahlung) y en el campo de los electrones atómicos (electrón-electrón) por separado, así como su suma, el DCS total escalado. Estas tablas de Seltzer y Berger constituyen la representación teórica más confiable de los espectros de energía de Bremsstrahlung disponibles en la actualidad. Para una molécula el DCS de Bremsstrahlung molecular es la suma (principio de aditividad de Bragg) de los DCS de sus átomos constituyentes. Si una molécula  $XxYy$ , que comprende  $x$  átomos del elemento  $X$  e  $y$  átomos del elemento  $Y$ . El DCS de Bremsstrahlung molecular es entonces

$$\frac{d\sigma_{mol}(Z, T, W)}{dW} = x \frac{d\sigma_{b,X}(Z_X, T, W)}{dW} + y \frac{d\sigma_{b,Y}(Z_Y, T, W)}{dW}. \quad (3.18)$$

De aquí se define la cantidad  $\chi_{mol}$  como

$$\chi_{mol}(Z, T, W) = \frac{\beta^2}{Z_{eq}^2} W \frac{d\sigma_{mol}}{dW}(Z_{eq}, T, W) = x \frac{Z_X^2}{Z_{eq}^2} \chi(Z_X, T, W) + y \frac{Z_Y^2}{Z_{eq}^2} \chi(Z_Y, T, W), \quad (3.19)$$

donde  $Z_{eq} = (xZ_X^2 + yZ_Y^2)/(x + y)$ . Para la molécula de agua se tiene que  $Z_{eq} = 4,69$ . Así, la

sección transversal diferencial atómica del oxígeno y el hidrógeno contribuyen el 80 y el 20 % al valor de la sección transversal diferencial molecular respectivamente [58].

La base de datos de las secciones transversales de Bremsstrahlung tanto para el átomo de hidrógeno como para el de oxígeno fueron recopiladas de la referencia [59]. Estas tablas proporcionan los valores del DCS total de Bremsstrahlung producido en el campo del núcleo atómico apantallado y el producido en el campo de los electrones atómicos; y la relación entre dichas secciones transversales [3]. En el algoritmo de muestreo de la pérdida de energía del electrón incidente debido a la interacción únicamente con el campo del núcleo atómico apantallado de uno de los átomos constituyentes de la molécula se define la función de densidad  $p(\kappa)$  para la pérdida de energía reducida  $\kappa = W/T$  y número atómico  $Z$  como

$$p(\kappa) = \frac{1}{\kappa} \chi(Z, T, \kappa) \quad (3.20)$$

$\chi(Z, T, \kappa)$  tiene un comportamiento gráfico relativamente plano para los átomos en cuestión y puede usarse para el muestreo por el método de rechazo, mientras que el muestreo por transformación inversa se utiliza para muestrear  $\kappa$  de la distribución  $\kappa^{-1}$ . De este modo el algoritmo queda establecido de la siguiente manera [60]:

1. Calcular  $\chi_{max}$ , es decir, calcular el máximo valor de  $\chi$  en la tablas para valores de  $T$  y  $Z$  dados.
2. Generar dos números aleatorios uniformemente distribuidos  $\xi_1$  y  $\xi_2$  entre 0 y 1.
3. Muestrear  $\kappa$  de la distribución  $\kappa^{-1}$  como  $\kappa = (1/\kappa_c)^{\xi_1}$  siendo  $\kappa_c = W_c/T$  la energía de corte de simulación (1 keV).
4. Si  $\xi_2 \leq \chi(Z, T, \kappa)/\chi_{max}$  se acepta el valor de  $\kappa$ , si no, volver al paso 2.

### 3.3. Generación de trayectorias aleatorias

Sea un electrón con energía cinética  $T$  que se desplaza a través de un medio rodeado por moléculas de agua. En cada evento interacción, la partícula puede perder una cierta energía  $W$  y cambiar su dirección de movimiento. La desviación angular viene determinada por el ángulo polar de dispersión  $\theta$ , es decir, el ángulo entre las direcciones de la partícula antes y después de la interacción, y el ángulo azimutal  $\phi$ . La sección transversal total que incluye todos los eventos de interacción (elásticos, inelásticos y nucleares) considerados en este estudio está dado por

$$\sigma_T = \sigma_{el} + \sigma_{in} + \sigma_{nuc}. \quad (3.21)$$

La probabilidad de interacción por unidad de longitud es entonces

$$\lambda_T^{-1} = \lambda_{el}^{-1} + \lambda_{in}^{-1} + \lambda_{nuc}^{-1}, \quad (3.22)$$

donde  $N$  es el número de moléculas de agua por unidad de volumen. De este modo, la PDF de la longitud de la trayectoria  $s$  del electrón desde su posición actual hasta el lugar de la siguiente interacción es

$$p(s) = \lambda_T^{-1} \exp\left(-\frac{s}{\lambda_T}\right). \quad (3.23)$$

La trayectoria de cada electrón comienza en una posición determinada, con una dirección y energía iniciales acordes con las características de la fuente. El estado del electrón inmediatamente después de una interacción (o tras entrar en la muestra o iniciar su trayectoria) está definido por sus coordenadas de posición  $\mathbf{r} = (x, y, z)$ , la energía  $T$  y los cosenos directores de la dirección de vuelo, es decir, las componentes del vector unitario  $\hat{\mathbf{d}} = (l, m, n)$ , visto desde el sistema de referencia del laboratorio. Así, cada trayectoria simulada se caracteriza por una serie de estados  $\mathbf{r}_n, T_n, \hat{\mathbf{d}}$ , donde  $\mathbf{r}_n$  es la posición del suceso de dispersión  $n$ -ésimo,  $T_n$  es la energía cinética y  $\hat{\mathbf{d}}$  son los cosenos directores de la dirección de movimiento justo después de ese suceso [3].

La generación de trayectorias aleatorias procede como sigue. Si ya se ha simulado un recorrido hasta un estado  $\mathbf{r}_n, T_n, \hat{\mathbf{d}}$ , la longitud  $s$  del camino libre hasta el siguiente punto de interacción, el mecanismo de dispersión implicado, el cambio de dirección y la pérdida de energía en esta colisión son variables aleatorias que se muestrean a partir de las PDFs correspondientes. En lo sucesivo,  $\xi$  representa un número aleatorio distribuido uniformemente en el intervalo (0,1).

Los valores aleatorios de  $s$  generados al aplicar el método de transformación inversa a la ecuación 3.23, están dados por

$$s = -\lambda_T \ln \xi. \quad (3.24)$$

Por tanto, la siguiente interacción ocurre en la posición

$$\mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_n + s\hat{\mathbf{d}} \quad (3.25)$$

En esta nueva posición, el tipo particular de colisión se decide al muestrear la distribución acumulada discreta dictada por la condición

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\sigma(T)_i}{\sigma(T)_T} = \sum_{i=1}^3 p_i = 1 \quad (3.26)$$

siendo  $p_i$  la probabilidad puntual para cada tipo de interacción considerado (elástica, inelástica y radiativa). Y posteriormente se muestrean la pérdida de energía y cambio de dirección de acuerdo a los métodos descritos del tipo de interacción seleccionado [3].

Para describir con precisión la distribución espacial de los eventos de interacción, cualquier nueva dirección posterior a la colisión debe almacenarse en términos del sistema de coordenadas de laboratorio. Por tanto, con cada desviación, se construye un sistema de coordenadas local temporal que tiene la dirección previa a la colisión como uno de sus ejes. Cualquier nueva dirección se expresa entonces, primero, en el sistema temporal y, posteriormente, en términos del sistema de coordenadas permanente. Por lo tanto, el código es capaz de proporcionar como datos brutos (i) las coordenadas de todos los eventos de interacción junto con el tipo de colisión producida y (ii) la pérdida de energía y su partición en los distintos canales inelásticos [3].

Después de muestrear los valores de  $W$ ,  $\theta$  y  $\phi$ , la energía de la partícula se reduce a,  $T_{n+1} = T_n - W$ , y la dirección de movimiento después de la interacción,  $\hat{\mathbf{d}}_{n+1} = (l', n', m')$ , se obtiene realizando una rotación de  $\hat{\mathbf{d}}_n = (l, n, m)$  utilizando la matriz de rotación  $R(\theta, \phi)$  que está determinada por los ángulos de dispersión polar y azimutal. Por tanto, la nueva dirección de vuelo del electrón  $\hat{\mathbf{d}}_{n+1} = R(\theta, \phi)\hat{\mathbf{d}}$  obtenida después de realizar transformaciones a partir de matrices de rotación al vector de direcciones iniciales está dada por las direcciones

$$l' = l \cos(\theta) + \frac{\sin \theta}{\sqrt{1-n^2}}[ln \cos \phi - m \sin \phi], \quad (3.27)$$

$$m' = m \cos(\theta) + \frac{\sin \theta}{\sqrt{1-n^2}}[mn \cos \phi + l \sin \phi], \quad (3.28)$$

$$n' = n \cos(\theta) + \sqrt{1-n^2} \sin \theta \cos \phi. \quad (3.29)$$

La simulación de trayectorias aleatorias continúa repitiendo todos los pasos anteriores para cada electrón primario y secundario hasta que la energía se vuelve más pequeña que la energía de corte determinada, que es la energía donde se supone que los electrones depositan localmente dicha energía en el medio [3].

### 3.4. Descripción de la programación del código MCET\_mx

Un paso importante antes de la codificación de un algoritmo es desarrollar un diagrama de flujo que muestre la secuencia básica que seguirá el código de programación. A continuación, se muestra la representación diagramática que seguirá el código de programación.

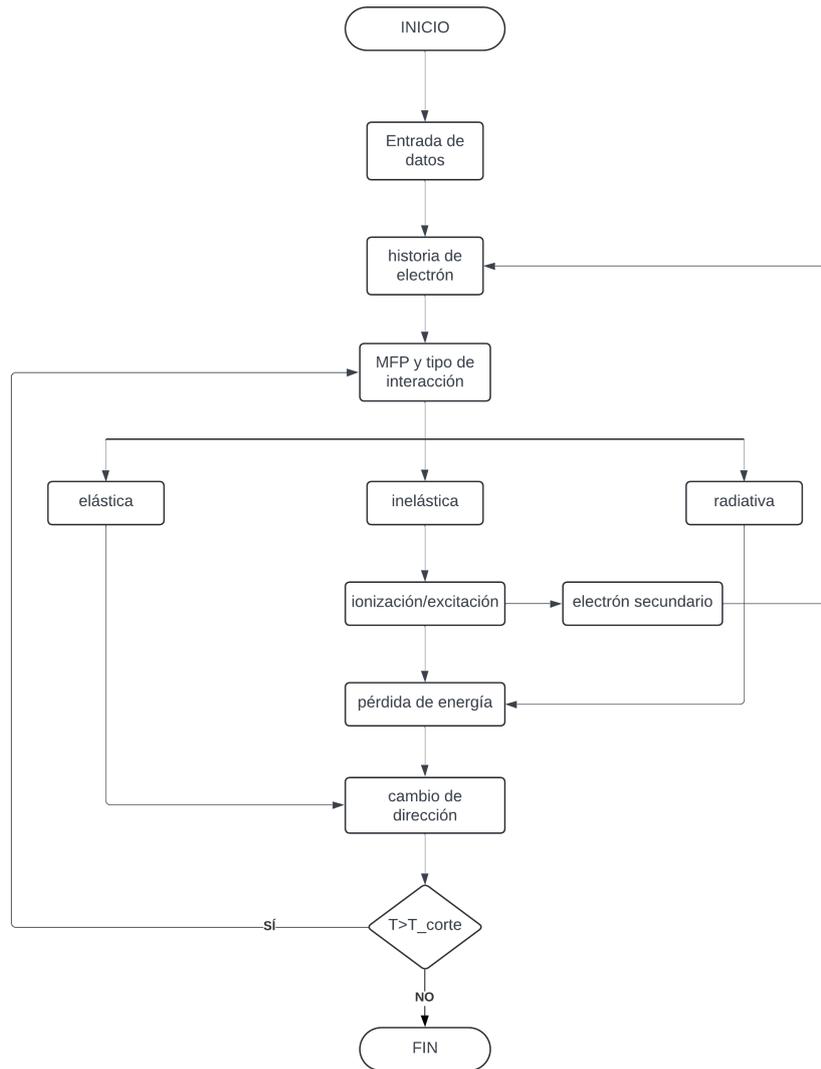


Figura 3.1: Diagrama secuencial del algoritmo utilizado para el transporte de electrones.

Ahora se describe la estructura del código de simulación del transporte de electrones denominado MCET.mx, ejecutado en el compilador DEV-C++ por un equipo de cómputo con procesador AMD A12 de 2.7 GHz y una capacidad de memoria RAM de 12 GB.

El código programado se divide en 7 bloques o funciones principales:

**Función *main*:** La función principal pide al usuario ingresar los parámetros necesarios para iniciar la simulación, como el número de electrones primarios a simular, la energía inicial de tales electrones y el valor del radio donde se calculará la energía depositada. Aquí se llama a la función *historia\_electron* la cual se encuentra en bucle hasta que cada electrón primario sea simulado.

**Función *historia\_electron*:** Esta función se encarga de determinar el tipo de interacción que sufrirá el electrón al calcular la sección transversal total, llamando a las funciones *disp\_elastica*, *disp\_inelastica* y *disp\_nuclear*. Posteriormente a partir del camino libre medio, el código determina la distancia desde su posición actual al punto de interacción y llama a la función *sim\_disp\_elastica*, *sim\_disp\_inelastica* o *disp\_nuclear* dependiendo del tipo de interacción seleccionado. Una vez finalizada la acción de alguna de las funciones anteriores determinado se almacena la energía que

es depositada dentro de la región esférica limitada por el radio ingresado.

Función *disp\_elastica*, *disp\_inelastica* y *disp\_nuclear*: Estas funciones se encargan de calcular el valor de la sección transversal total de acuerdo con los métodos descritos en la sección 2.3 para cada tipo de interacción.

Función *sim\_disp\_elastica*: Si se simula una interacción tipo elástica el código ingresa a esta función y devuelve a la función *historia\_electron* el ángulo de dispersión polar y azimutal al que es desviado el electrón. En esta función no hay pérdida de energía por lo cual la energía depositada y la energía del electrón simulado permanecen inalteradas.

Función *disp\_nuclear*: Si el electrón sufre una interacción tipo nuclear entra en acción esta función que calcula únicamente la pérdida de energía del electrón, la trayectoria del fotón y su dirección de emisión no son seguidos en este estudio.

Función *sim\_disp\_inelastica*: De acuerdo con el algoritmo descrito en la metodología, primero se selecciona el oscilador activo a partir de una estructura de selección simple (if), al mismo tiempo que se determina si la interacción es distante o cercana. Posteriormente la función calcula el ángulo de dispersión polar y azimutal y la energía depositada correspondiente al modo de interacción. Si en una ionización tipo cercana la energía que pierde el electrón simulado es mayor al valor de energía de corte (1 keV), entonces se determina el ángulo de dispersión polar [ecuación (3.15)] y azimutal [ecuación (3.16)] del electrón secundario y se llama a la función *historia\_electron* ahora con los parámetros de energía, dirección y posición generados por la función. De este modo se repite la secuencia de manera recursiva hasta que la energía del electrón simulado esté por debajo del valor de corte.

Cuando el código termina de simular todos los  $n$  electrones primarios y los secundarios generados, la función principal muestra la energía promedio depositada en la región esférica, de la forma

$$E_{dep} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i, \quad (3.30)$$

con

$$e_i = \sum_j e_{i,j}, \quad (3.31)$$

donde  $e_i$  es la energía depositada por cada  $j$ -ésimo electrón secundario generado por cada  $i$ -ésimo electrón primario [3]. Al mismo tiempo, la energía depositada generada en un cálculo por  $n$  electrones primarios está afectada por un error estadístico (desviación estándar) del cálculo MC dado por [3]

$$\sigma_{E_{dep}} = \sqrt{\frac{1}{n} \left[ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i^2 - E_{dep}^2 \right]}. \quad (3.32)$$

El código cuenta con funciones adicionales, pero no menos importantes, la cuales se encargan de generar las direcciones de los cosenos directores a partir de los ángulos polar y azimutal. También

el código cuenta con bloques de código que registran el tipo y la cantidad de interacciones que sufrió el electrón seguido, además de registrar las coordenadas espaciales de cada interacción de cada electrón simulado que pueden ser utilizados para generar de manera gráfica la trayectoria del electrón y sus secundarios generados.

# Capítulo 4

## Resultados

### 4.1. Generación de números aleatorios

Antes de iniciar con la ejecución del código MET\_mx primeramente se realizó una prueba de la generación de números aleatorios. Como el algoritmo de simulación sugiere una distribución uniforme de números aleatorios, se optó por utilizar la *función uniform\_real\_distribution* del compilador, la cual genera valores tipo flotantes aleatorios  $x$ , distribuidos en el intervalo  $[a, b)$  a partir de la función acumulada  $P(x|a, b) = 1/(b - a)$ .

De este modo a partir de la función `uniform_real_distribution` se generaron en el compilador DEV C++ 900 números aleatorios con un nivel de confianza de 95 % los cuales son mostrados a continuación.

```
0.000123584 0.000468471 0.00154074 0.00188266 0.00206224 0.00258257 0.00554442 0.0097194
0.00997191 0.0108009 0.0129707 0.013237 0.0148585 0.0153795 0.0157221 0.0161103 0.0165688
0.01827 0.0185296 0.0189851 0.0201489 0.0205646 0.0227166 0.0231084 0.0238376 0.0239447
0.0250386 0.0250437 0.0263841 0.0269462 0.0285086 0.028965 0.0297817 0.0303683 0.031302
0.0314468 0.0318049 0.035785 0.0370878 0.0383533 0.0394657 0.0400112 0.0404198 0.041246
0.0412691 0.041886 0.0432209 0.0433398 0.0479297 0.0497047 0.0507346 0.0507571 0.0510534
0.0514882 0.0518942 0.0534902 0.059874 0.0603076 0.0614992 0.0645828 0.0670985 0.0673515
0.0677352 0.0685992 0.0704904 0.070697 0.0724989 0.0730334 0.0742608 0.0746324 0.0816052
0.0818794 0.0886493 0.0903704 0.090468 0.0928963 0.0961354 0.0975481 0.0983766 0.0990514
0.0999649 0.100118 0.100586 0.100593 0.100676 0.103865 0.106573 0.108369 0.109354 0.109932
0.110846 0.114169 0.115442 0.116193 0.117534 0.119485 0.119615 0.119951 0.120316 0.120841
0.122038 0.12465 0.124987 0.125219 0.12556 0.128429 0.128845 0.130864 0.131279 0.132092
0.133163 0.133505 0.135204 0.13695 0.138479 0.139189 0.139259 0.142995 0.143115 0.14442 0.14521
0.146227 0.147214 0.148565 0.148676 0.149123 0.150486 0.152867 0.153421 0.153566 0.154427
0.155761 0.156585 0.158039 0.158845 0.159948 0.160277 0.161695 0.163339 0.163423 0.164433
0.164867 0.167823 0.171961 0.174443 0.174969 0.175116 0.175645 0.176297 0.176985 0.177019
0.17706 0.179693 0.180768 0.181557 0.181727 0.182686 0.183285 0.185082 0.18559 0.186621 0.19084
0.192202 0.195461 0.196077 0.196351 0.196788 0.198 0.199054 0.199896 0.201023 0.201643 0.2019
0.202361 0.202891 0.204223 0.204542 0.206216 0.206619 0.207203 0.208042 0.209597 0.209953
0.212767 0.212933 0.212959 0.213037 0.213037 0.213242 0.213941 0.214243 0.215806 0.216621
0.21727 0.217907 0.218787 0.21929 0.220893 0.220998 0.221835 0.223103 0.223725 0.226296
0.226547 0.226924 0.228294 0.228305 0.229243 0.229348 0.229386 0.229948 0.230546 0.230637
0.231677 0.234561 0.235437 0.236387 0.237063 0.23988 0.242338 0.242531 0.242768 0.243167
0.243487 0.243945 0.244501 0.246088 0.246177 0.248047 0.249459 0.24957 0.250784 0.252809
0.253247 0.255014 0.255094 0.257598 0.257962 0.258498 0.258733 0.260198 0.261516 0.263403
0.26454 0.264852 0.26777 0.269212 0.270178 0.270354 0.270458 0.272406 0.273838 0.274173
```

0.274513 0.274736 0.275438 0.276187 0.277439 0.278453 0.279327 0.279907 0.280191 0.28086  
0.284987 0.285863 0.285954 0.286269 0.287453 0.287869 0.28889 0.289387 0.289648 0.290006  
0.293163 0.293744 0.295813 0.297018 0.298298 0.299521 0.300551 0.301544 0.301655 0.303811  
0.303874 0.305196 0.305508 0.309524 0.310468 0.312178 0.312388 0.314861 0.315297 0.317301  
0.318131 0.318526 0.318713 0.318899 0.320536 0.321319 0.322726 0.322874 0.322957 0.323623  
0.323683 0.32473 0.325086 0.325846 0.32665 0.326872 0.330657 0.332773 0.332896 0.333897  
0.335095 0.336293 0.338769 0.339663 0.341328 0.341647 0.341912 0.342573 0.34384 0.345835  
0.346098 0.350724 0.352611 0.353675 0.354172 0.354394 0.35443 0.355754 0.35651 0.35824 0.358415  
0.360026 0.360558 0.362027 0.362427 0.363295 0.363326 0.365266 0.365478 0.365887 0.366736  
0.367471 0.368386 0.368608 0.368992 0.372205 0.372344 0.373041 0.37466 0.377723 0.378713  
0.378912 0.381663 0.381693 0.384909 0.385959 0.386583 0.387005 0.389563 0.389891 0.390586  
0.390715 0.390974 0.393404 0.393933 0.393949 0.39411 0.394352 0.395214 0.395582 0.396806  
0.397254 0.400145 0.400634 0.402194 0.402795 0.403918 0.404598 0.406178 0.406195 0.407308  
0.407346 0.4092 0.409984 0.411327 0.411746 0.411818 0.413017 0.413386 0.416128 0.416229  
0.416313 0.417692 0.418907 0.421138 0.423917 0.42423 0.424409 0.425639 0.425975 0.426023  
0.427535 0.428205 0.429707 0.43102 0.431214 0.431538 0.432133 0.433746 0.435055 0.435521  
0.436245 0.437479 0.438525 0.440204 0.441003 0.441389 0.442003 0.445223 0.448413 0.448562  
0.450027 0.454078 0.45504 0.457561 0.458159 0.458755 0.45969 0.461287 0.461608 0.462279  
0.462384 0.463237 0.463743 0.464203 0.466747 0.467337 0.467842 0.468674 0.470695 0.471492  
0.472603 0.473775 0.473893 0.475539 0.476843 0.477784 0.478946 0.47918 0.480584 0.480723  
0.481022 0.481583 0.483224 0.483619 0.48419 0.484572 0.484749 0.485054 0.485176 0.485936  
0.486507 0.488657 0.489453 0.489744 0.493908 0.49429 0.498561 0.500198 0.501206 0.501217  
0.501289 0.502157 0.503012 0.503207 0.503272 0.503756 0.504022 0.505412 0.506772 0.508651  
0.509526 0.509534 0.510981 0.512511 0.514859 0.515139 0.515351 0.517348 0.517431 0.518525  
0.522758 0.524703 0.524746 0.527459 0.529821 0.530837 0.531699 0.532144 0.532176 0.532385  
0.533218 0.534743 0.534956 0.536454 0.537307 0.538359 0.539183 0.539418 0.539698 0.540968  
0.542512 0.543579 0.545161 0.545873 0.546207 0.549176 0.550737 0.550886 0.552099 0.553634  
0.553881 0.553926 0.554403 0.554539 0.555024 0.557644 0.565765 0.566263 0.569888 0.573544  
0.573642 0.574446 0.574912 0.574954 0.575779 0.576244 0.577308 0.577403 0.579873 0.580768  
0.584415 0.585168 0.585776 0.586797 0.587174 0.587851 0.589097 0.589392 0.590725 0.590753  
0.592496 0.598546 0.59898 0.602545 0.602745 0.604141 0.608911 0.611319 0.61303 0.613631  
0.614082 0.616343 0.619453 0.621958 0.62242 0.622594 0.623272 0.62396 0.624041 0.624799  
0.628181 0.629301 0.630839 0.630843 0.631267 0.632738 0.634944 0.639497 0.640648 0.641117  
0.641573 0.64318 0.644737 0.645599 0.645981 0.647014 0.648779 0.650544 0.651092 0.651494  
0.652382 0.652746 0.654266 0.654808 0.6556 0.659748 0.66041 0.661061 0.663062 0.663608 0.663962  
0.666151 0.666554 0.667327 0.667426 0.667722 0.669037 0.670753 0.674623 0.676456 0.67714  
0.677634 0.678159 0.679421 0.680027 0.683026 0.68764 0.68854 0.688935 0.690527 0.69086 0.69174  
0.692472 0.692619 0.693185 0.693259 0.696256 0.698863 0.702042 0.702977 0.704781 0.705103  
0.705251 0.7057 0.706542 0.70748 0.708906 0.709669 0.710899 0.711021 0.711167 0.711217 0.711753  
0.714655 0.716446 0.716648 0.716894 0.717935 0.718364 0.718599 0.719089 0.719754 0.720217  
0.720348 0.720823 0.721519 0.721891 0.724902 0.72563 0.727028 0.727505 0.728063 0.728499  
0.730535 0.731178 0.732494 0.732822 0.734685 0.735351 0.736601 0.73866 0.740158 0.743862  
0.744875 0.744876 0.745038 0.745539 0.746379 0.746631 0.746898 0.747367 0.748965 0.749743  
0.750253 0.751652 0.753357 0.754181 0.756013 0.7565 0.757005 0.758086 0.758565 0.760014  
0.761624 0.76193 0.7632 0.767488 0.767491 0.767603 0.767901 0.769737 0.769834 0.772749 0.77289  
0.774337 0.774923 0.775175 0.780302 0.780758 0.782633 0.78419 0.784792 0.785741 0.785802  
0.786172 0.786274 0.787098 0.788259 0.789674 0.790522 0.791024 0.79309 0.795715 0.7982 0.798221  
0.799231 0.802029 0.803452 0.804719 0.807211 0.807967 0.808845 0.809175 0.809343 0.809934  
0.810773 0.812782 0.814138 0.814671 0.814966 0.818227 0.819465 0.822257 0.822802 0.822885  
0.826105 0.826368 0.826797 0.827453 0.828555 0.8292 0.829629 0.829945 0.832637 0.834348  
0.83489 0.834966 0.83569 0.836518 0.836744 0.837313 0.837831 0.838046 0.840345 0.841063

0.841167 0.841998 0.842612 0.847606 0.848462 0.849337 0.85043 0.851672 0.852281 0.852289  
0.856231 0.858117 0.858453 0.858468 0.85973 0.861028 0.861976 0.864256 0.865295 0.865558  
0.86618 0.867586 0.867918 0.869406 0.869709 0.871692 0.873127 0.874674 0.875681 0.87818 0.8783  
0.879202 0.879214 0.879235 0.87999 0.883522 0.884472 0.885827 0.887434 0.887664 0.888304  
0.889431 0.894977 0.895146 0.896221 0.896374 0.896405 0.897951 0.89883 0.902245 0.902802  
0.90339 0.903753 0.905923 0.907059 0.907935 0.910454 0.910656 0.912324 0.913718 0.914476  
0.917165 0.917719 0.921044 0.922429 0.92279 0.923063 0.923237 0.924223 0.925566 0.926547  
0.92914 0.929349 0.931541 0.932629 0.93407 0.935036 0.936219 0.936248 0.936499 0.940162  
0.941193 0.943667 0.944659 0.944875 0.946694 0.947423 0.947731 0.94809 0.949595 0.952656  
0.954188 0.95654 0.957846 0.959206 0.959706 0.959713 0.960314 0.96246 0.962865 0.964397  
0.964781 0.96526 0.967012 0.968146 0.968291 0.969632 0.970548 0.971265 0.97267 0.973551  
0.973999 0.976545 0.977633 0.97822 0.979249 0.980164 0.983946 0.986391 0.986776 0.987305  
0.988775 0.98983 0.990852 0.991492 0.991984 0.993266 0.993277 0.994768 0.999317 0.99957

## 4.2. Validación de números aleatorios generados

Tal como describió en la sección 2.5, la base de la aplicación del método MC en el transporte de radiación radica en tener un buen generador de números aleatorios. Por lo cual, antes de ejecutar una simulación del código primero fue necesario validar la generación de números aleatorios generados en el compilador DEV C++.

Para validar la generación de números aleatorios dados por la función, se realizó la prueba chi-cuadrada para la muestra 900 números aleatorios en el intervalo [0,1). Esta prueba busca determinar si los números del conjunto se distribuyen uniformemente en el intervalo a partir de

$$\chi_c^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(O_i - m_i)^2}{m_i}, \quad (4.1)$$

donde  $O_i$  es la frecuencia observada,  $m_i$  la frecuencia esperada y  $n$  el número de muestras [61].

Ahora se obtiene la frecuencia observada al dividir el número  $n$  de números generados en  $\sqrt{n}$  intervalos que cumplan la condición de estar entre los rangos dados, tal como se muestra en la siguiente tabla

rango menor	rango mayor	$O_i$	$m_i$	$(O_i - m_i)^2/m_i$
> 0,00	< 0,033	37	30	1.63333333
> 0,033	< 0,066	23	30	1.63333333
> 0,066	< 0,099	19	30	4.03333333
> 0,099	< 0,132	30	30	0
> 0,132	< 0,165	33	30	0.3
> 0,165	< 0,198	25	30	0.83333333
> 0,198	< 0,231	45	30	7.5
> 0,231	< 0,264	30	30	0
> 0,264	< 0,297	33	30	0.3
> 0,297	< 0,33	33	30	0.3
> 0,33	< 0,363	29	30	0.03333333
> 0,363	< 0,396	35	30	0.83333333
> 0,396	< 0,429	33	30	0.3
> 0,429	< 0,462	27	30	0.3
> 0,462	< 0,495	37	30	1.63333333
> 0,495	< 0,528	28	30	0.13333333
> 0,528	< 0,561	32	30	0.13333333
> 0,561	< 0,594	25	30	0.83333333
> 0,594	< 0,627	19	30	4.03333333
> 0,627	< 0,66	26	30	0.53333333
> 0,66	< 0,693	28	30	0.13333333
> 0,693	< 0,726	35	30	0.83333333
> 0,726	< 0,759	33	30	0.3
> 0,759	< 0,792	29	30	0.03333333
> 0,792	< 0,825	24	30	1.2
> 0,825	< 0,858	31	30	0.03333333
> 0,858	< 0,891	31	30	0.03333333
> 0,891	< 0,924	26	30	0.53333333
> 0,924	< 0,957	25	30	0.83333333
> 0,957	< 1,000	38	30	2.13333333
			$\chi_c^2$	31.3666667
			$\chi_{0,005}^2$	42.5569678

Tabla 4.1: Determinación de los parámetros estadísticos utilizados para la prueba de chi cuadrada.

Como se puede observar de la tabla 4.1 el valor de  $\chi_c^2=31.366$  es menor al valor de  $\chi_{0,05}^2=42.556$ ; de esta forma se comprueba que no existe diferencia entre la distribución de la muestra generada por la función *uniform\_real\_distribution* y la distribución uniforme. De modo que, es confiable utilizar esta función para generar números aleatorios uniformemente distribuidos entre cero y uno.

### 4.3. Energía depositada por electrones de 1, 2 y 3 MeV

Los cálculos se realizaron con tres energías iniciales diferentes, 1.0, 2.0, y 3.0 MeV para cubrir un rango de energía utilizado en el código NOREC y códigos de historia condensada. Los volúmenes de recolección de energía depositada y dosis son de capas esféricas concéntricas en la fuente con un espesor que oscila entre 0.07 y 16 mm, dependiendo de la energía cinética de los electrones iniciales. El tamaño de cada volumen de recolección se eligió para determinar la deposición total de energía y al mismo tiempo garantizar un error estadístico razonable. La ejecución del código MCET.mx se realizó para cada energía inicial un total de nueve veces hasta el volumen de máxima deposición, es decir, el volumen donde los electrones depositan toda su energía cinética.

En cada una de ellas se simularon  $2 \times 10^4$  electrones primarios hasta que su energía disminuyera a 1 keV. El tiempo de cada simulación aumentó de manera exponencial con el aumento de la energía, demorando en promedio para los tres valores de energía cinética y para el número de electrones primarios de 5 a 6 horas en el equipo de cómputo con las características ya mencionadas.

Las tablas 4.2 y 4.3 muestran los datos de energía depositada y dosis respectivamente producidos por electrones primarios de 1 MeV, en capas esféricas de radios entre 0.07 y 7 mm.

radio (mm)	Energía depositada (KeV)
0.1	348.831
0.2	378.986
0.3	409.526
0.5	470.338
1	616.80175
3	936.102
5	998.6495
6	1.00E+03
7	1.00E+03

Tabla 4.2: Energía media depositada en esferas de agua de diferentes radios por electrones de 1 MeV.

radio (mm)	Dosis depositada promedio (J/Kg)
0.1	1.3373E-05
0.2	1.80453E-06
0.3	5.81E-07
0.5	1.4425E-07
1	2.3719E-08
3	1.3292E-09
5	3.0630E-10
6	1.7812E-10
7	1.1177E-10

Tabla 4.3: Dosis media absorbida en esferas de agua de diferentes radios por electrones de 1 MeV.

Las figuras 4.1 y 4.2 muestran los datos de las tablas 4.2 y 4.3 graficados respectivamente.

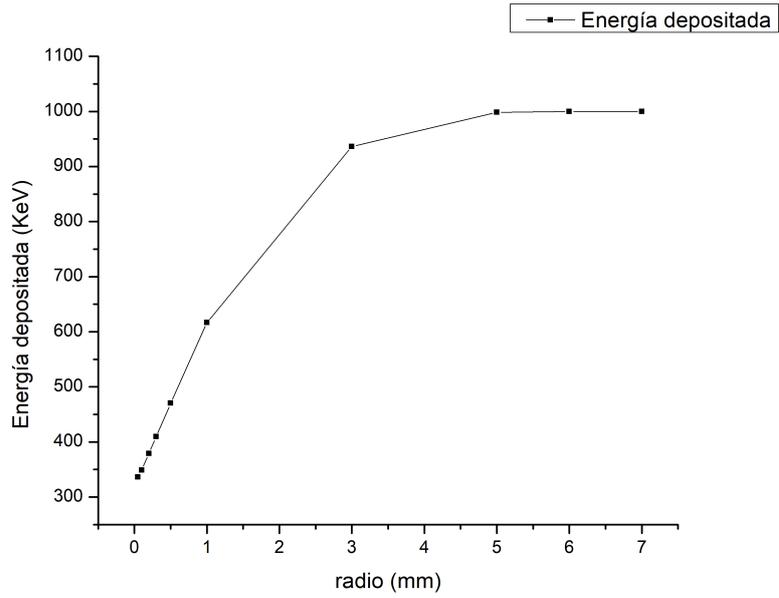


Figura 4.1: Energía depositada por electrones de 1 MeV en función de la distancia radial.

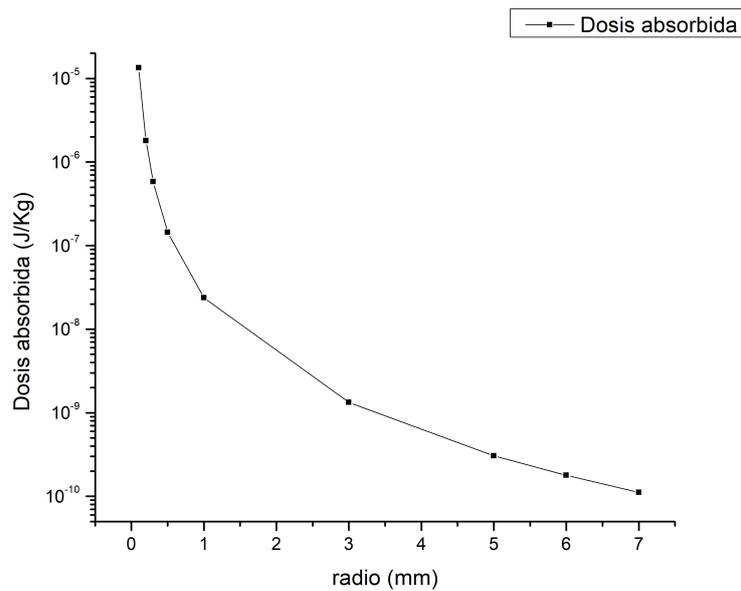


Figura 4.2: Resultados obtenidos de dosis absorbida en agua por electrones de 1 MeV en función de la distancia radial.

Las tablas 4.4 y 4.5 muestran los datos de energía depositada y dosis respectivamente producidos por electrones primarios de 2 MeV, en capas esféricas de radios entre 0.07 y 15 mm.

radio (mm)	Energía depositada (KeV)
0.1	673.931
0.5	794.772
1	874.646
3	1.28E+03
5	1.58E+03
7	1.77E+03
10	1.99E+03
13	2.00E+03
15	2.00E+03

Tabla 4.4: Energía media depositada en esferas de agua de diferentes radios por electrones de 2 MeV.

radio (mm)	Dosis depositada promedio (J/Kg)
0.1	2.58E-05
0.5	2.44E-07
1	3.35E-08
3	1.82E-09
5	4.83E-10
7	1.98E-10
10	7.16E-11
13	3.49E-11
15	2.27E-11

Tabla 4.5: Dosis media absorbida en esferas de agua de diferentes radios por electrones de 2 MeV.

Las figuras 4.3 y 4.4 muestran los datos de las tablas 4.4 y 4.5 graficados respectivamente.

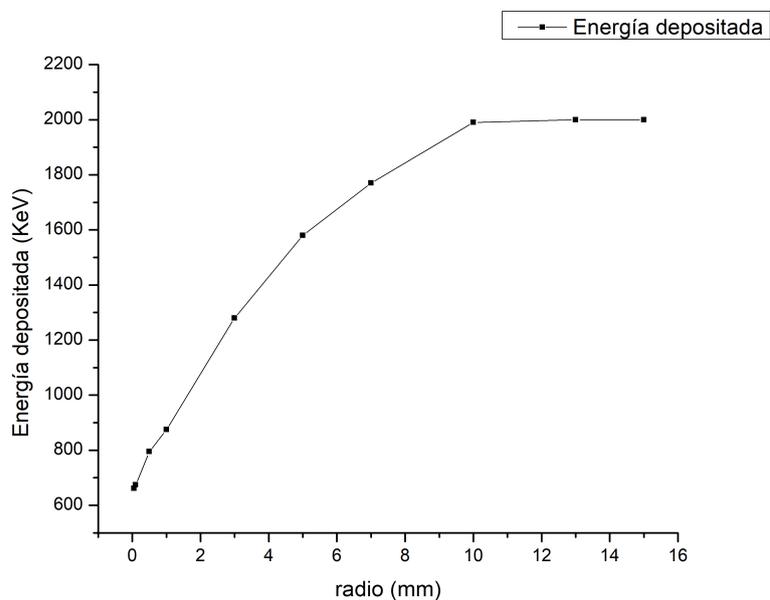


Figura 4.3: Energía depositada por electrones de 2 MeV en función de la distancia radial.

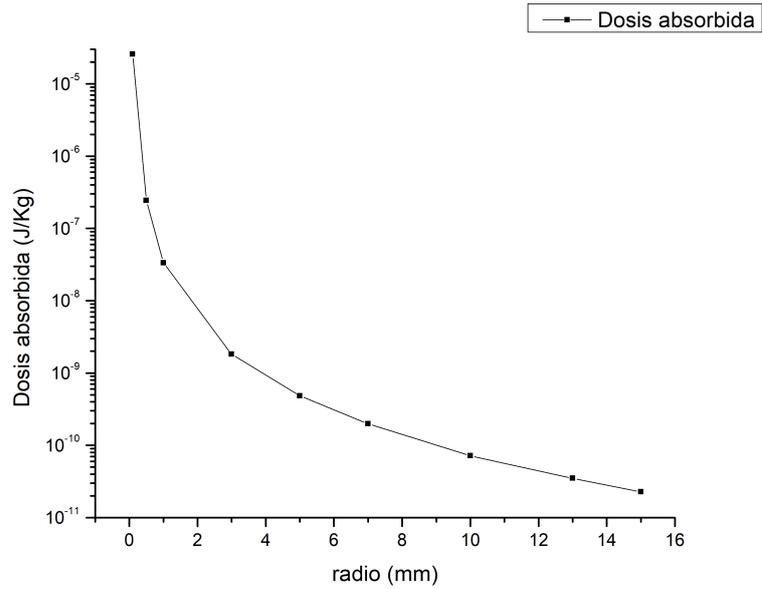


Figura 4.4: Resultados obtenidos de dosis absorbida en agua por electrones de 2 MeV en función de la distancia radial.

Las tablas 4.6 y 4.7 muestran los datos de energía depositada y dosis respectivamente producidos por electrones primarios de 3 MeV, en capas esféricas de radios entre 0.1 y 16 mm.

radio (mm)	Energía depositada (KeV)
0.1	999.99
0.5	1.10E+03
1	1.20E+03
3	1.64E+03
5	2.06E+03
7	2.42E+03
10	2.82E+03
13	2.98E+03
15	3.00E+03
16	3.00E+03

Tabla 4.6: Energía media depositada en esferas de agua de diferentes radios por electrones de 3 MeV.

radio (mm)	Dosis absorbida promedio (J/Kg)
0.1	3.83E-05
0.5	3.44E-07
1	4.61E-08
3	2.32E-09
5	6.32E-10
7	2.71E-10
10	1.08E-10
13	5.20E-11
15	3.41E-11
16	2.81E-11

Tabla 4.7: Dosis media absorbida en esferas de agua de diferentes radios por electrones de 3 MeV.

Las figuras 4.5 y 4.6 muestran los datos de las tablas 4.6 y 4.7 graficados respectivamente

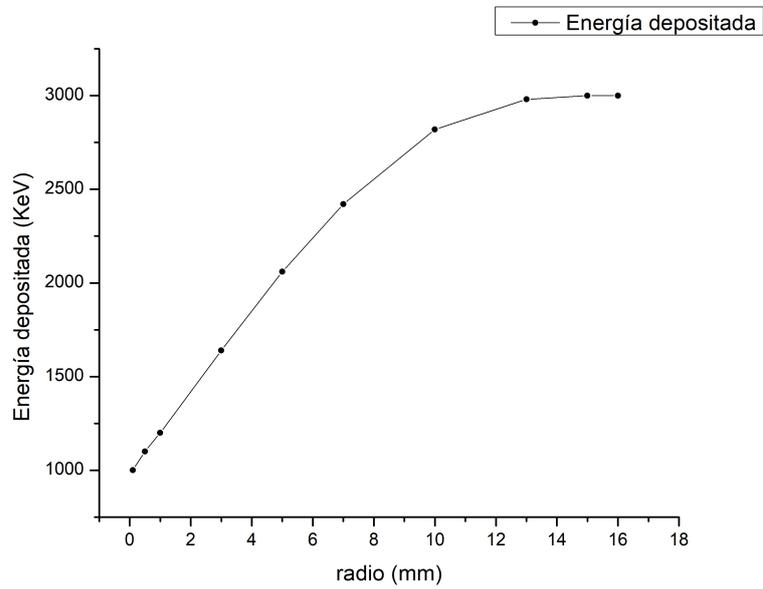


Figura 4.5: Curva de energía depositada por electrones de 3 MeV en función de la distancia radial.

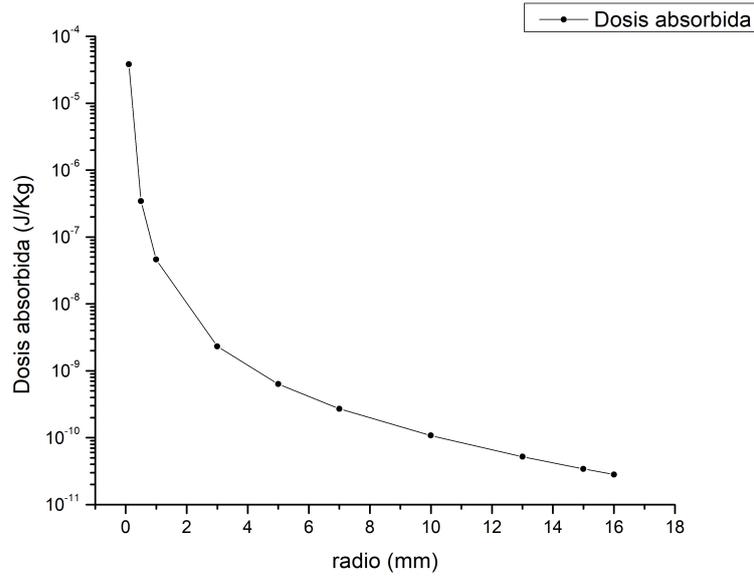


Figura 4.6: Distribución de la dosis absorbida en agua por electrones de 3 MeV en función de la distancia radial.

#### 4.4. Análisis de la energía depositada por electrones de 1, 2 y 3 MeV

Al comparar las curvas de deposición de energía por electrones de 1, 2 y 3 MeV en función de la distancia radial desde la fuente (Fig. 4.7) se puede observar que, los electrones depositan mayores cantidades de energía en esferas de radios iguales al incrementar la energía inicial de emisión. Esto se debe a que, como la energía de los electrones aumenta, también lo hace la sección transversal total de interacción provocando que la probabilidad de que los electrones interactúen con las moléculas del medio aumente proporcionalmente. Al mismo tiempo ya que el camino libre medio es inversamente proporcional a la sección transversal total, la distancia entre dos interacciones tiende a disminuir, ocasionando que el programa simule interacciones con mayor frecuencia y en distancias más cercanas. Estos datos obtenidos por el código programado *están en acuerdo* con los resultados reportados en la literatura como los presentados por las tablas de Attix [62]. Como el código NOREC simula el transporte de electrones en agua *evento-por-evento* hasta 1 MeV, sólo se puede comparar la distribución de energía y dosis depositada por electrones 1 MeV generadas por el código MCET\_mx. La longitud de trayectoria promedio de los electrones de 1 MeV en agua calculada por NOREC es de alrededor de 4.5 mm mientras que el presente código calculó una trayectoria media de aproximadamente 5 mm. La discrepancia entre resultados obtenidos por ambos códigos puede deberse a la base de datos de entrada, al modelo de las secciones transversales utilizadas, restricciones y limitaciones. Además, se debe remarcar que el código NOREC sigue electrones con energías mayores a 7.4 eV, mientras que el código MCET\_mx solo sigue electrones con energías hasta 1 KeV de energía. A pesar de estas diferencias se puede tener seguridad en los cálculos obtenidos por el código desarrollado, pues al ser muy limitado la fidelidad del fenómeno, reproduce resultados dosimétricos con ciertas limitaciones pero que están en acuerdo con los obtenidos por códigos que utilizan algoritmos de historia detallada e historia condensada.

La distribución física de la dosis absorbida en agua por electrones de 1,2 y 3 MeV la cual es mostrada en la figura 4.8 se obtuvo al realizar la conversión de energía depositada a dosis, es decir,

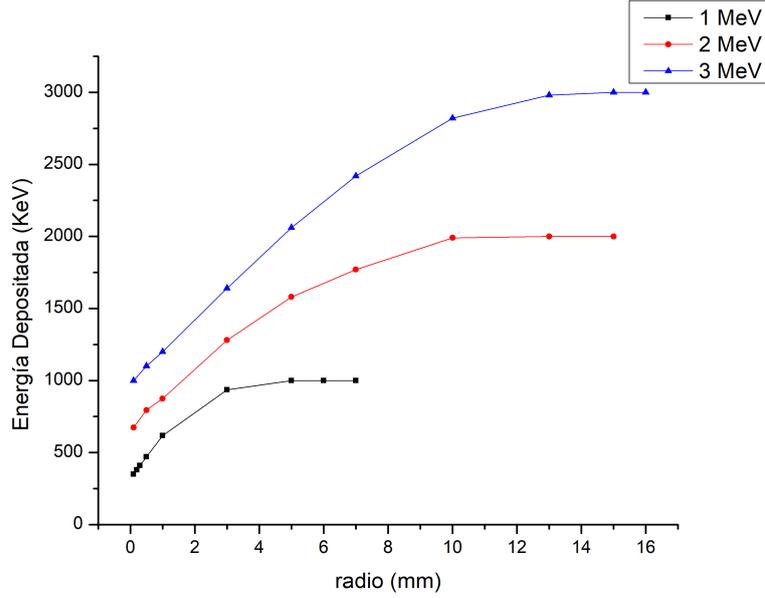


Figura 4.7: Distribución radial de la energía depositada en esferas de agua por electrones de 1, 2 y 3 MeV.

$$D_{abs} = \frac{E_{dep}}{M} = \frac{E_{dep}}{\rho V} \quad (4.2)$$

donde  $E_{dep}$  es la energía depositada en una región esférica de agua de masa  $M$  y volumen  $V$ . El agua, la cual es un sustituto radiológicamente idóneo al tejido biológico, tiende a absorber por unidad de masa mayor energía en regiones cercanas a la fuente de emisión; al aumentar el radio de deposición la dosis que absorbe el agua disminuye de forma exponencial hasta las zonas de máxima deposición de energía por los electrones energéticos considerados. Aunque los resultados de dosis absorbida hasta ahora no se pueden comparar con resultados de simulaciones *evento-por-evento* en el rango de energía establecido, la distancia radial de máxima deposición de dosis por electrones de 3 MeV (14 mm) concuerda con los resultados presentados en la referencia [63], el cual utiliza técnicas de historia condensada como algoritmo de simulación.

El espectro de dosis que absorbe el agua por electrones energéticos sugiere que, si se desea concentrar una mayor cantidad de energía en una región de menor masa y volumen de tejido radiológicamente equivalente al agua, se debe aumentar la energía de los electrones emitidos desde la fuente. Este aumento produce mayores depósitos de energía en regiones esféricas menores, Es por tal motivo que actualmente los electrones son una fuente de radiación adecuada para utilizarse en terapias para el tratamiento de lesiones que concentren grandes cantidades de energía ionizante cercanas a la superficie del cuerpo sin dañar potencialmente tejidos biológicos circundantes.

Un aspecto importante que puede contradecir el análisis anterior se debe a las longitudes de trayectoria de electrones de máxima deposición que se puede observar del gráfico 15. Mientras que la longitud de trayectoria media de electrones de 1 MeV es de 5 mm los electrones de 2 y 3 MeV depositan toda su energía a una distancia radial media de 13 y 14 mm respectivamente. Aunque la diferencia de longitud entre electrones de 1 y 2 MeV es comparable, la diferencia en longitud entre electrones de 2 y 3 MeV, no varía significativamente (aproximadamente 1 mm).

Al depositar los electrones rápidamente gran parte de su energía cinética, la probabilidad de interacción decrece reduciendo la frecuencia de depósitos de energía al aumentar el volumen del medio. De tal forma los electrones de bajas energía no son eficientes para concentrar grandes cantidades de energía en sistemas biológicos objetivos de dimensiones pequeñas, por ello se busca que la energía cinética aumente para una mayor eficiencia en el tratamiento con electrones.

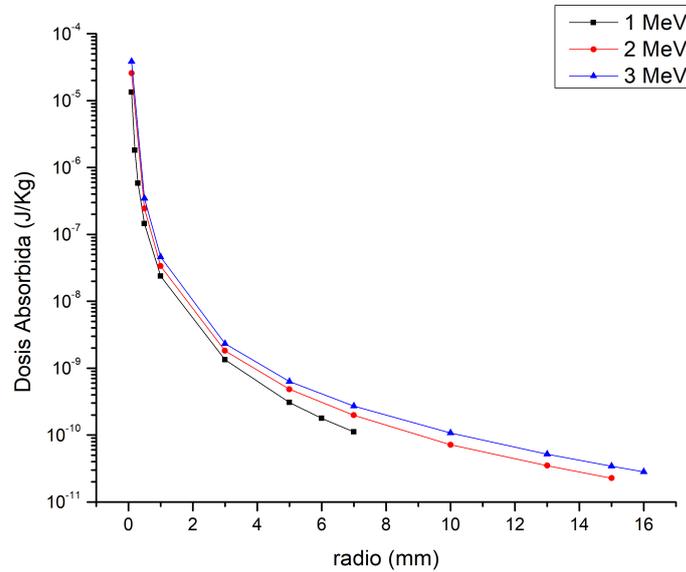


Figura 4.8: Distribución radial de la dosis absorbida en agua por electrones de 1, 2 y 3 MeV.

#### 4.5. Interacciones registradas por el código MCET\_mx

En la siguiente tabla se muestra en el número y tipo de interacciones promedio simuladas por el código desarrollado por electrones de 1, 2 y 3 MeV. EL código registró cada tipo de interacción hasta que la energía de los electrones primarios se redujera hasta el valor de corte considerado en este trabajo (1 KeV).

energía (MeV)	Tipo de interacción		
	elástica	inelástica	radiativa
1	6324	6716	0
2	13033	13560	0
3	19854	20280	0

Tabla 4.8: Número y tipo de interacciones promedio registradas en el código MCET\_mx por  $2 \times 10^4$  electrones primarios simulados para cada energía.

Finalmente, la figura 4.9 muestra la trayectoria espacial de un electrón primario de 1 MeV y sus electrones secundarios generados mediante el presente código. El electrón primario se posicionó en el punto  $x = y = z = 0$  y se emitió en la dirección  $z$ . Su trayectoria, junto con las de sus secundarios, fueron seguidos hasta que su energía cinética cayó por debajo de la energía de corte (1 KeV).

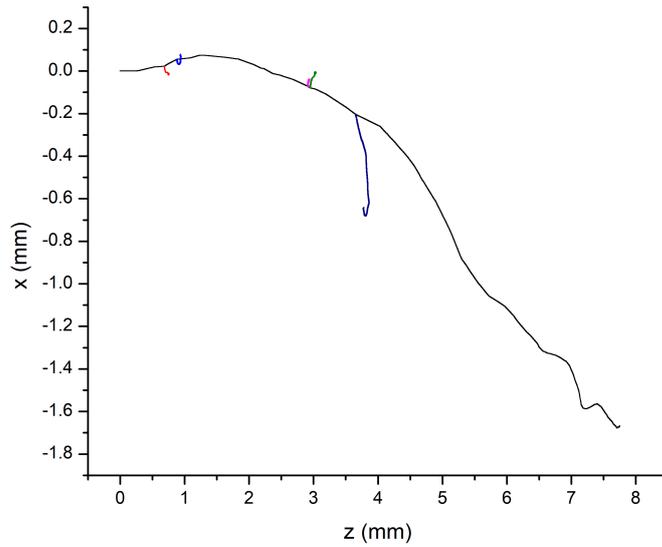


Figura 4.9: Gráfico bidimensional de la trayectoria de un electrón de 3 MeV en agua. El punto de emisión está en  $(x = 0, y = 0, z = 0)$  y la dirección inicial es en dirección  $z$ . Para propósitos ilustrativos aquí se muestran los electrones secundarios generados con energías mayores a 100 KeV durante la trayectoria del electrón primario.

#### 4.6. Análisis de las interacciones simuladas por electrones de 1, 2 y 3 MeV

Otro conjunto de datos microdosimétricos relevantes proporcionados por el código presentado radicó en el número de interacciones simuladas durante la trayectoria de los electrones energéticos. Se observó que, en cada simulación en el rango de energía establecido, el código únicamente registró interacciones tipo elásticas e inelásticas, contribuyendo al número total de interacciones por simulación en un 49.469 y 50.531 % respectivamente. La ausencia de interacciones tipo radiativas en cada una de las simulaciones se debe a que como los valores del número atómico del agua ( $Z = 10$ ) y el rango de energía de los electrones (1-3 MeV) resultan ser relativamente bajos, el valor de la sección transversal radiativa al depender fuertemente de estos parámetros decrece considerablemente, resultando ser aproximadamente cinco ordenes de magnitud menor a los valores la sección transversal de tipo elástico e inelástico. Por tal motivo, es de esperar que la aportación de la sección transversal radiativa al valor de la sección transversal total sea insignificante y resulte casi improbable que el código elija una interacción tipo Bremsstrahlung. Excluir en el código la función que calcula la sección radiativa puede disminuir el tiempo de simulación, pero se pretende que el modelo considere las interacciones establecidas en el modelo.

#### 4.7. Errores estadísticos y sistemáticos

Los cálculos por simulaciones MC inherentemente están expuestos a errores tanto estadísticos como computacionales, sobre todo en la forma en la cual el código registra y almacenaba la energía depositada durante la simulación. La incertidumbre estadística ( $1\sigma$ ) de la energía depositada en cada volumen de agua y cada energía presentadas en este estudio estuvo en un rango entre el 0.8507 % y el 3.24 % después de cinco cálculos de  $2 \times 10^4$  historias por cada distancia radial y por cada energía cinética inicial. El rango de incertidumbre obtenido por los cálculos MC está en

acuerdo con el obtenido por el código NOREC para electrones de 1 MeV [54].

Por otra parte, ya que la energía que podía perder un electrón era comparable con su energía cinética, el código realizaba un redondeo de la energía que perdía el electrón, provocando que la energía depositada y la energía cinética inicial del electrón fueran diferentes; por ejemplo, si la energía de un electrón de 2 MeV (2000000 eV) en colisión tipo inelástica disminuía 14 eV el código registraba esta última como energía depositada, sin embargo, la energía del electrón no disminuía en 1999986 eV si no en 1999990 eV. Esta diferencia, aunque es mínima, se vuelve significativa al aumentar el número de interacciones simuladas, provocando que el código proporcione un valor de la energía depositada mayor que la energía inicial del electrón primario. Aunque es una cuestión puramente computacional en la forma en cómo el código realiza sus operaciones aritméticas, se cree que puede ser mejorada la precisión de los resultados calculados por el código, con un equipo de cómputo mejor optimizado. Además de esto el código MCET\_mx al no registrar explícitamente las interacciones elásticas, inelásticas y nucleares de los electrones por debajo de la energía de corte, deposita la energía de estos electrones residuales en un solo paso y en un solo punto en el espacio. Este tratamiento afecta sustancialmente los resultados sólo para volúmenes muy pequeños (escala de micrómetros) y energías bajas, sin embargo, en el rango de energía y volumen considerado en este estudio, la exclusión del seguimiento de estos electrones no afecta los resultados significativamente.

# Conclusiones

La capacidad del código MCET\_mx de registrar explícitamente la posición y la transferencia de energía de eventos individuales elásticos, inelásticos y radiativos es probablemente la ventaja más importante que ofrece una simulación MC detallada. Mediante un estudio de este tipo, tanto el espectro espacial del recorrido como su deposición de energía pueden ser útiles en la comprensión mecanicista de la acción de la radiación, ya que la contribución de los diferentes modos de interacción permite extraer correlaciones en la forma en que los electrones se dispersan, ionizan y crean electrones secundarios durante su trayectoria.

Aunque la forma en que se ha programado la interacción de electrones con el agua es tal que puede extenderse de manera sencilla a un rango de energía más amplio, así como a otros medios, se cree que sería mejor probar su desempeño inicialmente en un rango donde los datos disponibles son conocidos, confiables y ya están en uso de otros grupos. La simulación *evento-por-evento* del transporte de electrones en agua expuesta en este estudio representa una versión muy simplificada para un modelo de aplicación terapéutica, sin embargo, el objetivo del código MCET\_mx es proporcionar información básica de parámetros y técnicas que puedan ser utilizados como referencia para el desarrollo de códigos de transporte de radiación más sofisticados. En la actualidad existe una cantidad limitada de códigos de simulación *evento-por-evento* en comparación con los códigos que utilizan el algoritmo de historia condensada debido a la escasa información detallada sobre las secciones transversal de interacción con el medio; es por ello por lo que, al desarrollar un código detallado del transporte de electrones o cualquier otro tipo de fuente de radiación se deben tener en cuenta diversos factores como propiedades de la fuente radiación y el medio irradiado, el rango de energía, el tipo de interacciones a simular y sus efectos posteriores, entre otras.

Los resultados de energía depositada obtenidos por los electrones de energía considerados no discrepan considerablemente de otros códigos de simulación a pesar de las limitantes computacionales y teóricas empleadas en este estudio. Sin embargo, la construcción de un conjunto de datos a partir de cálculos por la técnica del *evento-por-evento* puede resultar muy tardado y costoso computacionalmente. Se espera que el rápido avance computacional en un futuro pueda solventar esta y otras muchas cuestiones para que los códigos detallados puedan ser accesibles y óptimos en la calibración y tratamiento en centros terapéuticos.

## Trabajo a futuro

El enfoque descrito en este estudio parece satisfactorio para la mayoría de las aplicaciones de alta energía. Sin embargo, para electrones con energías inferiores a 1 KeV pueden ser necesarios métodos teóricos más sofisticados para el cálculo de las interacciones de los electrones con el medio. Uno de los puntos importantes que se pueden implementar como trabajo a futuro en el código presentado es incorporar un tratamiento de simulación de electrones de bajas energías para poder ampliar el intervalo de energía considerado en este estudio. Otro aspecto importante que puede ser implementado en el código es la simulación de la trayectoria no solo electrones de orbitales ionizados (rayos  $\delta$ ), sino también electrones Auger y rayos X característicos que se emiten después de la ionización por impacto de la capa interna además de simular la evolución de los iones creados con las moléculas del medio. La extensión del código puede aumentar considerablemente el tiempo de simulación, por tanto, se debe enfocar con precisión el objetivo del código para determinar cuáles son los aspectos más importantes que se deben incluir en el código de simulación.

# Bibliografía

- [1] E. B. Podgoršak *et al.*, *Radiation physics for medical physicists*, vol. 1. Springer, 2006.
- [2] J. G. Webster, *Encyclopedia of medical devices and instrumentation*. John Wiley & Sons, Inc., 1990.
- [3] D. Bank, *PENELOPE-2014: A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport*. OECD 2015, 2015.
- [4] M. Zaider, B. H. H. Rossi, and M. Zaider, *Microdosimetry and its Applications*. Springer, 1996.
- [5] G. J. Hine and G. L. Brownell, *Radiation dosimetry*. Elsevier, 2013.
- [6] D. Rogers, “The role of monte carlo simulation of electron transport in radiation dosimetry,” *International Journal of Radiation Applications and Instrumentation. Part A. Applied Radiation and Isotopes*, vol. 42, no. 10, pp. 965–974, 1991.
- [7] D. Rogers, A. Bielajew, *et al.*, “Monte carlo techniques of electron and photon transport for radiation dosimetry,” *The dosimetry of ionizing radiation*, vol. 3, pp. 427–539, 1990.
- [8] V. Semenenko, J. Turner, and T. Borak, “Norec, a monte carlo code for simulating electron tracks in liquid water,” *Radiation and environmental biophysics*, vol. 42, pp. 213–217, 2003.
- [9] Y. Watanabe and C. Constantinou, “Phantom materials in radiology,” *Encyclopedia of medical devices and instrumentation*, 2006.
- [10] A. R. T. Committee, F. M. Khan, *et al.*, *Clinical electron-beam dosimetry*. American Institute of Physics for the American Association of Physicists in Medicine, 1991.
- [11] D. White, “Tissue substitutes in experimental radiation physics,” *Medical physics*, vol. 5, no. 6, pp. 467–479, 1978.
- [12] T. Pawlicki, D. J. Scanderbeg, and G. Starkschall, *Hendee’s Radiation Therapy Physics*. John Wiley & Sons, 2016.
- [13] A. Kling, F. J. Barao, M. Nakagawa, L. Tavora, and P. Vaz, *Advanced monte carlo for radiation physics, particle transport simulation and applications: proceedings of the monte carlo 2000 conference, Lisbon, 23–26 October 2000*. Springer Science & Business Media, 2014.
- [14] P. Andreo, “Monte carlo techniques in medical radiation physics,” *Physics in Medicine & Biology*, vol. 36, no. 7, p. 861, 1991.
- [15] U. Fano, “Principles of radiological physics,” tech. rep., National Bureau of Standards, 1951.
- [16] F. H. Attix, *Introduction to radiological physics and radiation dosimetry*. John Wiley & Sons, 2008.

- [17] P. Andreo, D. T. Burns, A. E. Nahum, J. Seuntjens, and F. H. Attix, *Fundamentals of ionizing radiation dosimetry*. John Wiley & Sons, 2017.
- [18] I. A. E. AGENCY, *Diagnostic radiology physics: a handbook for teachers and students*. International atomic energy agency, 2013.
- [19] I. J. Das and K. R. Kase, “Higher energy: is it necessary, is it worth the cost for radiation oncology?,” *Medical physics*, vol. 19, no. 4, pp. 917–925, 1992.
- [20] K. Kase, *The dosimetry of ionizing radiation*. Elsevier, 2012.
- [21] J. Kiefer, *Biological radiation effects*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [22] M. Valente, “Fundamentos de física médica,” *Facultad de Matemáticas, Astronomía, Física y Computación, UNC*, 2020.
- [23] P. Mayles, A. Nahum, and J.-C. Rosenwald, *Handbook of radiotherapy physics: theory and practice*. CRC Press, 2007.
- [24] C. H. Marie Claire Cantone, *Radiation Physics for Nuclear Medicine*. Springer Berlin, Heidelberg, 2011.
- [25] B. J. McParland, “Medical radiation dosimetry,” (*No Title*), 2014.
- [26] G. Collaboration *et al.*, “Physics reference manual,” *Version: geant4*, vol. 9, no. 0, 2020.
- [27] R. Ritchie, R. Hamm, J. Turner, H. Wright, and W. Bolch, “Physical and chemical mechanisms in molecular radiation biology,” 1991.
- [28] M. Dingfelder, D. Hantke, M. Inokuti, and H. G. Paretzke, “Electron inelastic-scattering cross sections in liquid water,” *Radiation physics and chemistry*, vol. 53, no. 1, pp. 1–18, 1998.
- [29] R. Cooke and I. Kuntz, “The properties of water in biological systems,” *Annual review of biophysics and bioengineering*, vol. 3, no. 1, pp. 95–126, 1974.
- [30] D. Eisenberg and W. Kauzmann, *The structure and properties of water*. Oxford University Press, USA, 2005.
- [31] A. P. Gaiduk, T. A. Pham, M. Govoni, F. Paesani, and G. Galli, “Electron affinity of liquid water,” *Nature communications*, vol. 9, no. 1, p. 247, 2018.
- [32] C. F. Perry, P. Zhang, F. B. Nunes, I. Jordan, A. von Conta, and H. J. Worner, “Ionization energy of liquid water revisited,” *The journal of physical chemistry letters*, vol. 11, no. 5, pp. 1789–1794, 2020.
- [33] J. R. Sabin, J. Oddershede, and S. P. Sauer, “On the determination of the mean excitation energy of water,” in *Advances in Quantum Chemistry*, vol. 65, pp. 63–77, Elsevier, 2013.
- [34] L. Castillo-Rico, M. Flores-Mancera, and G. Massillon-JL, “Stopping power and csda range of electrons in liquid water, lif, caf2, and al2o3 from the energy gap up to 433 keV,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 502, pp. 189–197, 2021.
- [35] M. Kurudirek, “Effective atomic numbers, water and tissue equivalence properties of human tissues, tissue equivalents and dosimetric materials for total electron interaction in the energy region 10 keV–1 GeV,” *Applied radiation and Isotopes*, vol. 94, pp. 1–7, 2014.

- [36] Y. Watanabe and C. Constantinou, “Phantom materials in radiology,” *Encyclopedia of medical devices and instrumentation*, 2006.
- [37] M. Valente, J. Vedelago, D. Chacón, F. Mattea, J. Velásquez, and P. Pérez, “Water-equivalence of gel dosimeters for radiology medical imaging,” *Applied Radiation and Isotopes*, vol. 141, pp. 193–198, 2018.
- [38] M. Dingfelder and W. Friedland, “Basic data for track structure simulations: Electron interaction cross-sections in liquid water,” in *Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport Simulation and Applications: Proceedings of the Monte Carlo 2000 Conference, Lisbon, 23–26 October 2000*, pp. 267–272, Springer, 2001.
- [39] M. N. Varma and A. Chatterjee, *Computational Approaches in Molecular Radiation Biology: Monte Carlo Methods*, vol. 63. Springer Science & Business Media, 2013.
- [40] N. Reynaert, S. Van der Marck, D. Schaart, W. Van der Zee, C. Van Vliet-Vroegindeweij, M. Tomsej, J. Jansen, B. Heijmen, M. Coghe, and C. De Wagter, “Monte carlo treatment planning for photon and electron beams,” *Radiation Physics and Chemistry*, vol. 76, no. 4, pp. 643–686, 2007.
- [41] I. J. Chetty, B. Curran, J. E. Cygler, J. J. DeMarco, G. Ezzell, B. A. Faddegon, I. Kawrakow, P. J. Keall, H. Liu, C.-M. C. Ma, *et al.*, “Report of the aapm task group no. 105: Issues associated with clinical implementation of monte carlo-based photon and electron external beam treatment planning,” *Medical physics*, vol. 34, no. 12, pp. 4818–4853, 2007.
- [42] L. L. Carter and E. D. Cashwell, “Particle-transport simulation with the monte carlo method,” tech. rep., Los Alamos National Lab.(LANL), Los Alamos, NM (United States), 1975.
- [43] M. J. Berger, “Monte carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles,” *Methods in Computational Physics.*, vol. 135, 1963.
- [44] I. Kawrakow, “The monte carlo simulation of radiation transport,” in *AAPM Conference Presentation*, 2006.
- [45] M. Dingfelder, R. Ritchie, J. Turner, W. Friedland, H. Paretzke, and R. Hamm, “Comparisons of calculations with partrac and norec: transport of electrons in liquid water,” *Radiation research*, vol. 169, no. 5, pp. 584–594, 2008.
- [46] W. Wilson and H. Nikjoo, “A monte carlo code for positive ion track simulation,” *Radiation and environmental biophysics*, vol. 38, no. 2, pp. 97–104, 1999.
- [47] M. Svatos, W. Chandler, C. Siantar, J. Rathkopf, C. Ballinger, H. Neuenschwander, T. Mackie, and P. Reckwerdt, “Electron transport in radiotherapy using local-to-global monte carlo,” tech. rep., Lawrence Livermore National Lab., 1994.
- [48] I. I. Kolodner, “On the carleman’s model for the boltzmann equation and its generalizations,” *Annali di Matematica Pura ed Applicata*, vol. 63, no. 1, pp. 11–32, 1963.
- [49] H. Tachibana *et al.*, “Accelerated event-by-event monte carlo microdosimetric calculations of electrons and protons tracks on a multi-core cpu and a cuda-enabled gpu,” *Computer methods and programs in biomedicine*, vol. 113, no. 1, pp. 116–125, 2014.
- [50] R. Chakarova, “Detailed monte carlo simulation of electron elastic scattering,” tech. rep., Chalmers Univ. of Technology, 1994.

- [51] D. A. Dixon, A. K. Prinja, and B. C. Franke, “A computationally efficient moment-preserving monte carlo electron transport method with implementation in geant4,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 359, pp. 20–35, 2015.
- [52] Y. Ma, H. Zhou, and Y. Zhuo, “Condensed-history monte carlo simulation of the dosimetric distribution of electron microbeam,” *Radiation and environmental biophysics*, vol. 44, pp. 299–305, 2006.
- [53] S. M. Seltzer, “Cross sections for bremsstrahlung production and electron-impact ionization,” in *Monte Carlo transport of electrons and photons*, pp. 81–114, Springer, 1988.
- [54] S. H. Cho, O. N. Vassiliev, and J. L. Horton, “Comparison between an event-by-event monte carlo code, norec, and etran for electron scaled point kernels between 20 keV and 1 MeV,” *Radiation and environmental biophysics*, vol. 46, pp. 77–83, 2007.
- [55] C. Champion, “Theoretical cross sections for electron collisions in water: structure of electron tracks,” *Physics in Medicine & Biology*, vol. 48, no. 14, p. 2147, 2003.
- [56] D. Emfietzoglou, G. Papamichael, K. Kostarelos, and M. Moscovitch, “A monte carlo track structure code for electrons ( $\sim 10$  eV–10 keV) and protons ( $\sim 0.3$ –10 MeV) in water: partitioning of energy and collision events,” *Physics in Medicine & Biology*, vol. 45, no. 11, p. 3171, 2000.
- [57] F. Salvat, J. Fernández-Varea, J. Sempau, and X. Llovet, “Monte carlo simulation of bremsstrahlung emission by electrons,” *Radiation Physics and Chemistry*, vol. 75, no. 10, pp. 1201–1219, 2006.
- [58] I. Plante and F. A. Cucinotta, “Cross sections for the interactions of 1 eV–100 MeV electrons in liquid water and application to monte-carlo simulation of hze radiation tracks,” *New Journal of Physics*, vol. 11, no. 6, p. 063047, 2009.
- [59] S. M. Seltzer and M. J. Berger, “Bremsstrahlung energy spectra from electrons with kinetic energy 1 keV–10 GeV incident on screened nuclei and orbital electrons of neutral atoms with  $Z=1$ –100,” *Atomic data and nuclear data tables*, vol. 35, no. 3, pp. 345–418, 1986.
- [60] M. A. Wasay, H. Wang, and P. He, “An algorithm for monte carlo simulation of bremsstrahlung emission by electrons,” *Nuclear Science and Techniques*, vol. 28, no. 5, p. 71, 2017.
- [61] M. R. A. Esfandiari and E. G. Dunna, *Simulación y análisis de modelos estocásticos*. McGraw-Hill, 1996.
- [62] I. W. Party, D. Thwaites, A. DuSautoy, T. Jordan, M. McEwen, A. Nisbet, A. Nahum, and W. Pitchford, “The ipem code of practice for electron dosimetry for radiotherapy beams of initial energy from 4 to 25 MeV based on an absorbed dose to water calibration,” *Physics in Medicine & Biology*, vol. 48, no. 18, p. 2929, 2003.
- [63] U. Bliznyuk, A. Chernyaev, V. Ipatova, A. Nikitchenko, F. Studenikin, and S. Zolotov, “Electron beam processing of biological objects and materials,” *Ion Beam Technology and Applications*, 2023.