

# **Simulación de la dosis depositada en un biomaterial por isótopos de yodo radiactivos**

Trabajo de fin de grado

Grado en Física

**Autor :** Mario Mompean Herrero

**Tutores :** Pablo de Vera Gomis y Rafael Garcia Molina



Murcia, 29 de junio de 2021





D./Dña. ....Mario Mompean Herrero

....., estudiante del

Grado en .....Física.....de la Facultad de Química de

la Universidad de Murcia, **DECLARO:**

Que el Trabajo de Fin de Grado que presento para su exposición y defensa titulado

.....Simulación de la Dosis depositada en un biomaterial por isótopos  
radiactivos de yodo

..... y

cuyo/s tutor/es es/son

D./Dña. ....Pablo De Vera Gomis

..... D./Dña.

.....Rafael Garcia Molina

.....

**es original y que todas las fuentes utilizadas para su realización han sido  
debidamente citadas en el mismo.**

Murcia, a .....10.....de .....Junio..... de 2021.

Firma

## **Agradecimientos**

En primer lugar agradecer a mi familia, que siempre me han apoyado a lo largo de este camino. Sin vosotros nada de esto hubiera sido posible.

En segundo lugar a mis amigos, por creer en lo que hago y siempre que he necesitado algo estar ahí. A mi pareja, por conseguir motivarme en los momentos más complicados.

Gracias a Pablo y Rafa por haber estado siempre disponibles para ayudarme y motivarme a continuar a cada paso que dábamos hacia la mejora y perfeccionamiento de este trabajo. Sin vosotros este trabajo no habría llegado tan lejos.

Por último, hacer una mención especial a aquellas personas que ya no están, esto también es vuestro.

## Resumen

Actualmente, muchos de los avances que se dan en medicina van de la mano con la física. La medicina nuclear se encarga de intentar diagnosticar y curar enfermedades a partir de isótopos radiactivos. Estos isótopos radiactivos son núcleos atómicos inestables, los cuales emiten energía debido a varios procesos, como las desintegraciones  $\beta^-$  y otras emisiones de energía discretas. Esta energía es transportada principalmente por los electrones energéticos emitidos por el isótopo radiactivo. Los electrones van interaccionando con la materia, mientras van cediendo energía a esta, por lo que al final se produce un depósito de energía alrededor del punto de emisión. Dependiendo del tipo de proceso que haya tenido lugar y cuál sea el isótopo radiactivo, la energía emitida por este y la distribución alrededor del punto de emisión cambian completamente. Si conocemos cómo se distribuye la energía en función de cada isótopo, podemos elegir cuál será más conveniente usar en cada situación determinada.

Existen técnicas como la radio-inmunoterapia que, introduciendo en el cuerpo distintos isótopos radiactivos unidos a anticuerpos, buscan adherirse a los núcleos de células cancerígenas para provocar su muerte mediante la emisión de electrones energéticos. El problema de todo esto es que es complicado conocer cómo se distribuye la energía, especialmente a las escalas nanométricas características de las biomoléculas sensibles de ADN.

En el desarrollo de este trabajo, partiremos de conceptos fundamentales sobre cómo interactúan los electrones con la materia y cómo se producen las emisiones de los isótopos radiactivos, para modelar esta situación física, y estudiarla a partir de simulaciones por ordenador. Lo haremos a través de un código Montecarlo, que nos permitirá describir los distintos espectros de emisión de isótopos que emiten tanto de forma discreta como continua. En el desarrollo de este, seguiremos las trayectorias de los electrones en agua y veremos como depositan la energía en función de la distancia. En las trayectorias de los electrones tendremos en cuenta tanto colisiones elásticas como inelásticas.

## Abstract

Nowadays, many advances in medicine come hand in hand with new developments in physics. Nuclear medicine is responsible for trying to diagnose and cure diseases using radioactive isotopes. These radioactive isotopes are unstable atomic nuclei, which emit energy due to various processes, such as  $\beta^-$  decays and discrete emissions. This energy is carried mainly by electrons, which are emitted by the radioactive isotope. The electrons interact with matter, while they deliver energy to it, so that in the end a deposit of energy is produced around the emission point. Depending on the type of process that has taken place and what the radioactive isotope is, the energy emitted and the distribution around the emission point can change. If we know how the energy is distributed, depending on each isotope, we can choose which one will be more convenient to use in each given situation.

There exist techniques such as radio-immunotherapy, which introduce different radioactive isotopes bound to antibodies into the nuclei of cancer cells to cause their death due to the emission of electrons. The problem here is that it is difficult to know how the energy is distributed, especially at the small nanometer scales of the sensitive biomolecules such as DNA.

In the development of this work, we will start from fundamental concepts about how electrons interact with matter and how radioactive isotope emissions are produced, to model this physical situation, and study it from computer simulations. We will do it through a Monte Carlo code, which will allow us to describe the different emission spectra of isotopes that emit both discretely and continuously. In the development of this, we will follow the trajectories of the electrons in water and we will see how they deposit energy as a function of distance. In the trajectories of the electrons we will take into account both elastic and inelastic collisions.

# Índice

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>1</b>
1.1	Partículas subatómicas y radiactividad . . . . .	1
1.2	Conocimiento de la estructura y funcionamiento de la materia en medicina . . .	2
1.3	Objetivos y estructura del trabajo . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Marco teórico</b>	<b>6</b>
2.1	Interacción de partículas cargadas con la materia . . . . .	6
2.2	Sección eficaz . . . . .	7
2.3	Recorrido libre medio . . . . .	8
2.4	Poder de frenado . . . . .	9
2.5	Coeficientes de retrodispersión, transmisión y absorción . . . . .	9
2.6	Emisiones beta . . . . .	10
2.7	Emisiones discretas por isótopos radiactivos . . . . .	11
2.8	Método de Montecarlo . . . . .	12
2.9	Energía depositada en una región (DPK) y dosis . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Metodología y detalles de la simulación</b>	<b>15</b>
3.1	Principios de la simulación . . . . .	15
3.2	Interacción de un haz de electrones en materia condensada . . . . .	17
3.2.1	Tratamiento de colisiones elásticas . . . . .	17
3.2.2	Tratamiento para colisiones inelásticas . . . . .	18
3.2.3	Haz de electrones incidentes en un sólido elemental . . . . .	19
3.2.4	Haz de electrones incidentes en blanco compuesto: agua . . . . .	20
3.3	Emisión radiactiva de electrones en agua . . . . .	22
3.3.1	Emisión de electrones con la misma energía inicial . . . . .	22
3.3.2	Emisión de electrones por $^{131}\text{I}$ en agua . . . . .	23
3.3.3	Emisión de electrones por $^{125}\text{I}$ en agua . . . . .	27
<b>4</b>	<b>Resultados y discusión</b>	<b>29</b>
4.1	Evaluación del programa de simulación . . . . .	29
4.1.1	Coeficientes de retrodispersión y transmisión para el aluminio y agua . . .	29
4.1.2	DPK por electrones monoenergéticos . . . . .	33
4.2	Emisión electrónica de isótopos radiactivos de yodo . . . . .	35
4.2.1	Isótopo $^{131}\text{I}$ . . . . .	35

4.2.2	Isótopo $^{125}\text{I}$ . . . . .	37
<b>5</b>	<b>Conclusiones y perspectivas futuras</b>	<b>40</b>
5.1	Cumplimiento de objetivos . . . . .	40
5.2	Conclusiones . . . . .	40
5.3	Continuación y mejora de este trabajo . . . . .	42
	<b>Bibliografía</b>	<b>43</b>



# 1. Introducción

## 1.1. Partículas subatómicas y radiactividad

En 1896 Henri Becquerel (1852-1908), realizando experimentos sobre fosforescencia en los que colocaba sales de uranio sobre una placa fotográfica, se da cuenta de que la placa al cabo del tiempo pasaba a tener un color negro, por lo que dedujo que las sales de uranio emitían una radiación capaz de atravesar sustancias que para la luz parecían ser opacas. Años más tarde a este efecto se le denominó radiactividad. Las investigaciones en este campo fueron en aumento y posteriormente se dieron cuenta de que la radiactividad podía caracterizarse en tres tipos o clases distintas. Es el caso de las radiaciones tipo alfa, beta y gamma.

Ernest Rutherford decidió estudiar la estructura atómica bombardeando láminas delgadas de oro con radiación del tipo alfa [1]. Esto es lo que se conoce como el experimento de Rutherford (Figura 1 [2]). El propio Rutherford unos años antes había descubierto que este tipo de radiación no eran más que átomos de helio cargados positivamente que salían disparados de los núcleos radiactivos a velocidades y energías muy altas.

Rutherford observó que aunque muchas de las partículas alfa lanzadas seguían en la dirección original, había otras que eran dispersadas (desviadas) fuertemente e incluso algunas de ellas eran rebotadas hacia atrás. El resultado no se adecuaba al modelo atómico que había en la época y la única solución a esto era que la mayor parte de la masa y las cargas positivas se tendrían que

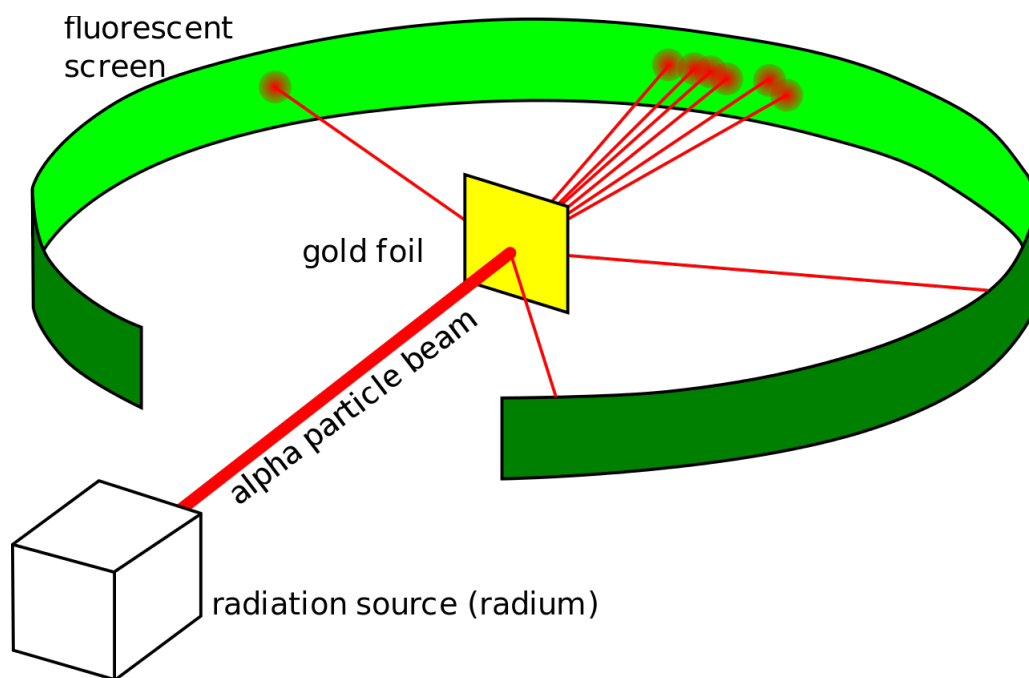


Figura 1: Esquema del experimento de Rutherford. Lámina de oro bombardeada con rayos de partículas alfa. Algunas de las partículas atraviesan la lámina pero otras se desvían e incluso rebotan hacia atrás [2].

concentrar en una región bastante pequeña del átomo. La carga negativa se debería distribuir en el volumen restante. A raíz de todo esto, Rutherford propuso un nuevo modelo atómico. También fue el descubridor del protón y propuso la existencia de otra partícula subatómica con aproximadamente la misma masa que el protón pero de carga neutra, que se conoce hoy en día como neutrón.

Años después se siguieron descubriendo cada vez más partículas y tipos de estas. A día de hoy se conocen centenares de partículas subatómicas, donde la gran mayoría no son indivisibles, sino que a su vez están formadas por otras partículas que denominamos elementales, las cuales no están formadas a su vez por otras partículas.

Actualmente gran parte del estudio sobre la estructura de la materia se realiza en aceleradores de partículas, donde la idea principal es acelerar estas hasta velocidades muy elevadas para hacerlas colisionar con la materia y ver qué ocurre en estos procesos. El acelerador de partículas más grande hoy en día es el Gran Colisionador de Hadrones (LHC) , situado en Ginebra (Suiza) y con un diámetro de unos 26 km.

## **1.2. Conocimiento de la estructura y funcionamiento de la materia en medicina**

El intento de comprender cómo funciona realmente la materia y la estructura de esta no es un problema reciente, ni puramente de carácter teórico. Desde hace bastantes siglos el ser humano ha intentado explicar el funcionamiento y la estructura atómica desde distintos puntos de vista pero, ¿puede tener esto implicaciones prácticas. como por ejemplo en medicina?

El conocimiento de la estructura y funcionamiento de la materia y, en particular, de la existencia del núcleo atómico y de su estabilidad, es realmente importante en el ámbito de la medicina debido a que nos abre las puertas de nuevos aparatos o técnicas que permitan detectar y curar enfermedades. La especialidad de la medicina que se encarga de diagnosticar y tratar enfermedades a partir de isótopos radiactivos (es decir, con núcleos inestables que decaen emitiendo radiación), se le conoce como medicina nuclear. Existen isótopos radiactivos como el  $^{137}\text{Cs}$  que se utiliza para realizar radiografías [3]. Cabe destacar que no todos los radioisótopos emiten electrones por el mismo tipo de desintegración (ver secciones 2.6 y 2.7).

Existen multitud de isótopos radiactivos que emiten electrones por desintegración  $\beta^-$  (emisión de electrones energéticos) y que se usan para el tratamiento de algunos cánceres (radioterapia). Un ejemplo de esto es el  $^{132}\text{I}$ . Este tipo de isótopos radiactivos son colocados en el cuerpo humano y van emitiendo electrones de forma isotropa. Los electrones emitidos interaccionan con el medio y van depositando energía en este.

Debido a esta pérdida, se va depositando la energía que llevan los electrones a distintas dis-

tancias del punto donde se han emitido y esto es lo que se utiliza para combatir enfermedades como el cáncer, destruyendo las células tumorales mediante el depósito de energía. Cada isótopo radiactivo distribuye la energía alrededor del punto de emisión de una manera distinta y viene determinada por el tipo de emisión y la energía con la que se produzca.

Existen otros isótopos radiactivos como el  $^{125}\text{I}$  que emiten electrones de una forma discreta [4] (veremos que la energía de los electrones emitidos es menor que para emisiones tipo  $\beta^-$ ). La energía depositada alrededor del punto de emisión se produce a distancias más pequeñas. Este tipo de isótopos radiactivos se utilizan en lo que se conoce como radioinmunoterapia [5].

La radioinmunoterapia es una especialidad dentro de la medicina nuclear que utiliza anticuerpos unidos a estos isótopos radiactivos para tratar algunos tipos de cáncer. Los anticuerpos cargados con isótopos radiactivos se unen de forma selectiva a las células cancerígenas (evitando las células sanas) y, potencialmente, son capaces de entrar en el núcleo de estas, donde se encuentra su material genético. Debido a que la energía se concentra en distancias más cercanas al punto de emisión (del orden de las moléculas de ADN), cuando se produce la emisión de electrones en el núcleo de una célula cancerígena se puede provocar la muerte de esta. Esto se consigue gracias a que el depósito de energía produce una lesión compleja del ADN celular, y consecuentemente la muerte de la célula cancerígena.

El conocimiento de cómo se distribuye la energía y a qué distancia del punto de emisión se produce nos abre muchas puertas en este contexto. Si conocemos esto seremos capaces de determinar qué isótopo radiactivo o qué técnica podemos usar en función de cuál sea la enfermedad o la zona a tratar. La penetración de los electrones en el medio viene determinada por la energía con la que se emiten.

El problema es que no siempre es sencillo determinar cómo distribuye la energía cada isótopo, sobre todo cuando las escalas espaciales en las que trabajamos son muy pequeñas (unas decenas de nm). Es aquí donde entra en juego el desarrollo de simulaciones que, a partir de modelos teóricos que se tienen sobre el funcionamiento y estructura de la materia, intentan reproducir la situación física y conocer aproximadamente cómo actúa cada radioisótopo en el cuerpo humano o en un determinado medio.

### **1.3. Objetivos y estructura del trabajo**

El objetivo general del trabajo es simular la desintegración radiactiva de isótopos de yodo con la finalidad de conocer cómo se distribuye la energía depositada alrededor del punto de emisión, así como la cantidad de energía absorbida por unidad de volumen.

Más específicamente, los objetivos concretos principales de este trabajo son:

- Analizar el depósito de energía por dos tipos de emisiones radioactivas: emisión  $\beta^-$  y emisiones discretas (debido a conversión interna o captura electrónica seguidas de emisión Auger).
- Estudiar dos isótopos radiactivos de yodo que decaen de forma diferente:  $^{131}\text{I}$  que decae principalmente por emisión  $\beta^-$  y  $^{125}\text{I}$  que decae por emisión discreta.
- Escribir un código de simulación Montecarlo que permita estudiar estos problemas.

Para llegar a estos objetivos principales partiremos desde situaciones físicas más sencillas, como es la de un haz de electrones incidentes en un sólido o la emisión en agua de electrones de una misma energía. A partir de estas situaciones más simples, aparecen también una serie de objetivos secundarios que pueden ayudar a validar los modelos y simulaciones utilizadas. Estos objetivos secundarios son:

- Calcular el coeficiente de retrodispersión y transmisión de los electrones en aluminio para varios espesores de una lámina.
- Calcular el coeficiente de retrodispersión de los electrones en aluminio, para una lámina semi-infinita (muy gruesa) en función de la energía del haz.
- Calcular el coeficiente de retrodispersión de los electrones para el agua en función de la energía.
- Comparar estos coeficientes con algunos datos experimentales y otras simulaciones.
- Calcular la cantidad de energía depositada, en función de la distancia, para electrones con una misma energía inicial. Comparar esto con otros programas de simulación Montecarlo bien establecidos.

En el desarrollo de este trabajo, partiremos de los principios básicos que subyacen a este tipo de procesos e intentaremos simularlos en el lenguaje de programación Fortran.

A lo largo de la sección 2 explicaremos todos los conceptos y magnitudes relevantes para poder construir un modelo teórico de cómo se producen las interacciones de los electrones en materia condensada. Posteriormente, en la sección 3 daremos una serie de aproximaciones que consideraremos para poder describir esto de una manera más sencilla. Seguidamente nos adentraremos en la suposición de un haz de electrones que incide sobre un sólido (situación más simple), que nos abrirá el camino para situaciones futuras. Iremos modificando la situación física poco a poco hasta llegar a simular la emisión de electrones de isótopos de yodo radiactivos.

En la sección 4 presentaremos, analizaremos y discutiremos los resultados obtenidos para cada uno de los cálculos que hemos realizado a lo largo del trabajo. También compararemos los resultados propios con algunos datos experimentales u otras simulaciones Montecarlo bien establecidas hoy en día.

Por último, en la sección 5 analizaremos del cumplimiento de objetivos, conclusiones y posibles mejoras a este trabajo.

## 2. Marco teórico

Después del experimento de Rutherford, cambió por completo la visión y la forma de estudiar la materia a escalas microscópicas. El modo de estudio a estas distancias se basa en enviar un haz de partículas hacia la materia para que interaccionen con ella. Todo el análisis de estos procesos forma en conjunto lo que se conoce como la teoría de la dispersión (*scattering theory*).

A lo largo de esta sección hablaremos de los conceptos que son más relevantes de la teoría de la dispersión, aplicados al caso de una simulación de la dosis depositada en un biomaterial por un isótopo radiactivo.

### 2.1. Interacción de partículas cargadas con la materia

Cuando las partículas cargadas interaccionan con la materia producen una serie de efectos que a su vez dependen de multitud de factores. Entre ellos podemos destacar el tipo de partícula (carga y masa), la energía y el medio con el que interacciona (componentes, densidad, etc.). En estas interacciones, las partículas cargadas intercambian energía y momento por colisiones coulombianas. Este tipo de colisiones son debidas a la interacción que hay entre cargas de las partículas incidentes con las cargas de los electrones y los núcleos de los átomos del medio [6, 7]. Se producen a través de tres tipos de interacciones:

- **Colisión elástica:** Choque contra los núcleos del medio material. La partícula cargada desvía su trayectoria además de cederle una pequeña cantidad de energía cinética al átomo de interacción. Este tipo de colisión no produce efectos en los átomos del medio.
- **Colisión inelástica:** Interacción con los electrones del átomo o molécula. Se produce transmisión de energía entre electrones lo que puede producir fenómenos de ionización o de excitación de electrones en el blanco.
- **Colisión radiativa:** Debido a la interacción de la partícula cargada con los átomos del medio, esta siente un efecto de "frenado" o "desvío". Este tipo de interacciones produce como resultado una emisión de ondas electromagnéticas que también se conoce como radiación de frenado. En el desarrollo de este trabajo despreciaremos este tipo de colisiones debido a que sólo son apreciables cuando las velocidades de las partículas involucradas son cercanas a la velocidad de la luz (partículas relativistas)

En este trabajo se va a utilizar la técnica Montecarlo (sección 2.8) para simular la propagación y colisiones de un conjunto de electrones en materia condensada, haciendo uso de los conceptos que se definen a continuación.

## 2.2. Sección eficaz

Tomando una visión macroscópica, la sección eficaz representa el área transversal de un objetivo que puede ser alcanzado por un proyectil [8]. Si pensamos en un objeto puntual que se dirige hacia un blanco esférico con radio  $r$ , la sección eficaz geométrica del blanco vendrá dada por  $\sigma = \pi r^2$ , que es la sección transversal de un blanco esférico.

Cuando adoptamos una visión microscópica, el concepto de sección eficaz es algo distinto. Supongamos un haz de partículas que se dirigen hacia un blanco microscópico de área  $S$  (figura 2 [7]). Si  $\sigma$  es la sección eficaz de un proceso (interacción), entonces  $\sigma/S$  hace referencia a la fracción de los proyectiles del haz que se ven afectados por este proceso debido a la interacción con el blanco [7]. El haz de partículas tiene una densidad de corriente  $J = \frac{N}{tS}$ , donde  $n$  es el número de partículas. Esto es el número de proyectiles por unidad de tiempo  $t$  y área. El material que actúa como blanco tiene una densidad de átomos o moléculas por unidad de volumen  $n$  y un volumen que vendrá dado por  $V = S \cdot x$ , siendo  $x$  el espesor del blanco. El producto:

$$JS \cdot nx\sigma = \frac{N_{\text{col}}}{t}, \quad (1)$$

es el número de colisiones que se producen por unidad de tiempo. Dividiendo por el número de partículas por unidad de tiempo,  $JS = \frac{N}{t}$ , tenemos que:

$$\frac{N_{\text{col}}}{N} = nx\sigma. \quad (2)$$

Es decir,  $\sigma$  es una medida del número de colisiones sufridas por parte de cada partícula incidente. Si en la ecuación (2) tomamos el límite para un espesor pequeño, el cociente  $N_{\text{col}}/N$  hace

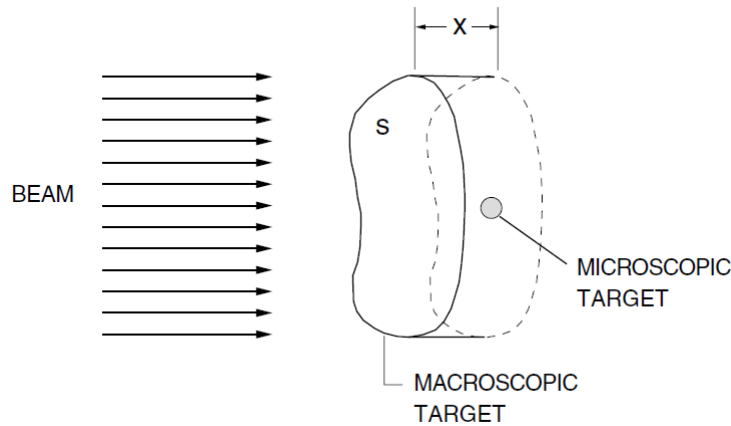


Figura 2: Esquema de un haz dirigido hacia un blanco con area  $S$  y espesor  $x$  [7].

referencia a la probabilidad de colisión [7]. Teniendo en cuenta esto, y que en este trabajo solo consideraremos las colisiones elásticas e inelásticas (ver sección 2.1) tendremos dos tipos de sección eficaz, la sección eficaz elástica e inelástica, las cuales nos describen estos dos tipos de colisiones.

Cabe destacar que la sección eficaz de un electrón actuando como proyectil depende la energía cinética que lleva (por lo tanto de su velocidad), por lo que al producirse una colisión (inelástica) la energía cinética cambiará y consecuentemente también lo hará la sección eficaz.

### 2.3. Recorrido libre medio

Tomemos ahora una partícula (electrón en nuestro caso) que viaja a través de un medio material. A lo largo de este viaje, la partícula sufrirá una serie de colisiones. El ángulo de dispersión debido a colisiones inelásticas es muy bajo, así que las colisiones inelásticas las podemos agrupar en lo que se denomina como poder de frenado (ver secciones 2.4 y 3.1). Entre colisión elástica y colisión elástica la partícula recorrerá una cierta distancia que podemos tomar como una línea recta pero, no tiene que ser la misma longitud en todas estas interacciones.

En la figura 3 podemos ver un esquema de la trayectoria de una partícula en un determinado medio. Los puntos azules representan que ha habido una colisión elástica y la partícula ha

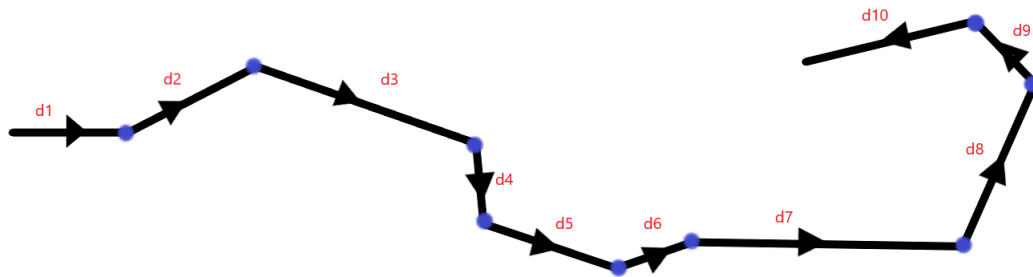


Figura 3: Esquema de una trayectoria de una partícula en un medio material. Los puntos azules hacen referencia a una colisión elástica y las flechas y líneas negras a la trayectoria que recorre el electrón en el medio. Las  $d_i$  representan las distancias que ha recorrido el electrón entre colisión elástica y colisión elástica.



cambiado su dirección de movimiento al haber recorrido las distancias  $d_1$ ,  $d_2$ , etc. Tomando la media de estas distancias podemos hacernos una idea de la longitud promedio que recorre una partícula entre dos colisiones consecutivas. Aplicando esto a contextos en los cuales hay un número muy alto de colisiones surge el concepto de recorrido libre medio.

Se define el **recorrido libre medio**,  $\lambda$ , como la longitud media recorrida por la partícula considerada antes de sufrir una colisión de cualquier tipo [8, 7]. Podemos deducir una relación entre la sección eficaz y el recorrido libre medio a partir de la ecuación (2). Tomamos  $N_{\text{col}} = N = 1$ , ya que suponemos que ha ocurrido una colisión elástica o inelástica y tomamos el espesor  $x = \lambda$  como la distancia característica a la que ocurre dicha colisión. De tal manera llegamos a la relación [7]:

$$\lambda = \frac{1}{n\sigma}. \quad (3)$$

## 2.4. Poder de frenado

Una partícula cargada que se mueve en un medio material pierde energía por interacciones inelásticas con este a través de varias formas, como son la ionización y excitación electrónica [8]. Una manera de cuantificar esta pérdida en promedio es a través del poder de frenado (*stopping power*).

El poder de frenado,  $-\frac{dE}{dx}$ , podemos definirlo como la cantidad media de energía perdida por una partícula cargada en movimiento por unidad de longitud en un determinado medio material. La expresión del poder de frenado no es única para todo tipo de partículas, sino que depende de factores como el número atómico del blanco o la masa y la velocidad de la partícula en movimiento. La energía perdida por un electrón y por un protón que viajan en un mismo material con velocidades iguales y recorren un mismo tramo, no es por tanto la misma.

El poder de frenado es realmente útil ya que, conocida la distancia recorrida por una partícula cargada en un determinado medio, podemos conocer la energía que ha perdido en promedio dicha partícula en su trayectoria debido a colisiones inelásticas. Si denotamos por  $d$  a la distancia recorrida en el medio, la energía perdida en promedio en la trayectoria,  $\Delta E$ , la podemos calcular a partir de la siguiente expresión:

$$\Delta E = d \cdot \left| \frac{dE}{dx} \right|. \quad (4)$$

## 2.5. Coeficientes de retrodispersión, transmisión y absorción

Supongamos un haz de electrones con una energía inicial dada que se dirige hacia un determinado material en una dirección concreta. El coeficiente de retrodispersión de los electrones se define como la fracción de electrones del haz que re-emergen de la superficie incidente del objeto

irradiado [8]. El haz puede generar otros electrones debido a interacciones con los átomos del medio. El coeficiente de retrodispersión no incluye este tipo de electrones.

Como ya sabemos, los electrones que inciden en un material con una cierta energía inicial irán perdiendo energía debido a colisiones inelásticas. La energía mínima o de corte que se suele tomar para que un electrón que emerge de la superficie del material contabilice como un electrón retrodispersado es de 50 eV. La elección de esta energía en concreto se debe a que realmente a ese rango no podemos distinguir si ese electrón es el que ha penetrado en el material o es un electrón que ha sido emitido por los átomos al interaccionar con el haz, ya que los electrones emitidos por ionización (o secundarios) suelen tener una energía de decenas de eV.

Análogamente, también se puede definir el coeficiente de transmisión de los electrones como la fracción del haz que traspasa una lámina de un espesor determinado y de un material concreto con una energía mayor que la energía de corte. El coeficiente de absorción de los electrones será la fracción del haz que, tras incidir sobre un material, alcanza una energía igual o menor que la energía de corte debido a las interacciones con los átomos.

Estos coeficientes dependen sobre todo de tres cosas: la energía inicial del haz de electrones, las propiedades del material (densidad, número atómico, etc.) y la geometría de este (espesor). A mayor energía inicial la distancia que recorren los electrones antes de ser absorbidos por el medio será mayor, por tanto estos coeficientes varían. A mayor densidad de átomos y mayor número de nucleones en cada uno de estos, la interacción de los electrones con el medio será mayor, por lo tanto los electrones recorrerán en promedio menos distancia que en un medio con menor densidad y número atómico. La suma de estos tres coeficientes debe ser la unidad, ya que cada uno de los electrones del haz incidente debe ser retrodispersado, absorbido o haberse traspasado transmitido a través del material.

Los coeficientes de retrodispersión, transmisión y de absorción son cantidades de las cuales se tiene mucha información experimental y teórica, sobre todo a partir de una energía inicial del haz del orden de 5-10 keV. Durante el desarrollo de este trabajo será interesante calcular estos coeficientes para comparar con valores experimentales y hacernos una idea de si los modelos y las suposiciones que estamos considerando en las simulaciones son correctas o se alejan demasiado de la realidad.

## **2.6. Emisiones beta**

Como comentamos en la introducción, existen tres tipos de radiación o emisión radioactiva, tipo alfa, beta y gama. Las dos primeras consisten en emisiones de partículas cargadas positiva o negativamente, la tercera consiste radiación de campos electromagnéticos (fotones de alta

energía) [3]. Rutherford probó que la emisión alfa estaba formada por núcleos de helio cargados positivamente que se emitían con una alta velocidad. La emisión beta consiste en emisión de partículas cargadas, pero de una masa menor. Dentro de este tipo de radiación se puede encontrar dos casos: "beta menos" si la partícula emitida se trata de una partícula cargada negativamente (electrón) o "beta más" en el caso de que esta partícula esté cargada positivamente (positrón).

La emisión beta ocurre cuando hay un desequilibrio entre el número de protones y el número de neutrones en el núcleo atómico. En el decaimiento "beta menos" un neutrón se desintegra en un protón, un electrón y un antineutrino electrónico. Por el contrario, en el decaimiento "beta más" un protón se desintegra en un neutrón, un positrón y un neutrino electrónico:

$$\begin{aligned}\beta^- : \quad n &\rightarrow p^+ + e^- + \bar{\nu}_e \\ \beta^+ : \quad p^+ &\rightarrow n + e^+ + \nu_e,\end{aligned}\tag{5}$$

En nuestro caso, interesa sobre todo la desintegración  $\beta^-$  ya que nos centraremos en la emisión de los electrones. Los neutrinos o antineutrinos son un tipo de partículas que interactúan muy poco con el medio material, así que podemos despreciarlos cuando hagamos cálculos con este tipo de desintegraciones. Las energías con las que se emiten los electrones oscilan entre un rango muy amplio de valores y depende, del átomo o isótopo en el cual se produce la emisión. Esto implica que cada vez que tomemos un átomo o isótopo distinto tendremos que ver en qué rango de energías y con qué probabilidad se producen las desintegraciones, para poder tener una descripción correcta del fenómeno.

Cabe destacar que las desintegraciones beta no emiten electrones con una energía concreta, sino que, en principio, dentro del rango en el que emite el isótopo, cualquier energía está permitida para la desintegración siguiendo una cierta distribución de probabilidad. En las secciones posteriores veremos cómo abordar este problema cuando queremos implementar desintegraciones beta en las simulaciones correspondientes.

## 2.7. Emisiones discretas por isótopos radiactivos

Algunos isótopos radiactivos presentan también desintegración por captura electrónica o por conversión interna.

La captura electrónica consiste en que un electrón interno de una cierta capa K es absorbido por otro núcleo con un alto número de protones. Tras esto se produce una conversión del protón y el electrón absorbido en un neutrón [5]. La especie resultante conserva su masa atómica, pero a costa de ello, el átomo se encuentra en un estado excitado y con una vacante o hueco en el orbital primario.

Por otro lado, la conversión interna consiste en un núcleo excitado e inestable que libera el exceso de energía que posee y se la transfiere a un electrón que se encuentra en un orbital interno [5]. Si la cantidad de energía transferida supera la energía de ionización, el electrón puede salir expulsado del núcleo con una energía cinética correspondiente a la diferencia de entre estas dos.

El efecto Auger describe el proceso en el cual un hueco o vacante en un orbital interno se llena por la desintegración de un electrón de una capa superior con menor energía de ligadura [5]. La diferencia de energía entre esta transición se emite como rayos x o transfiriéndose a un electrón que posteriormente es expulsado (electrón Auger).

Este tipo de emisiones se dan de una forma discreta, es decir, los electrones se emiten toman unos valores concretos de energía que, evidentemente varían en función de la especie atómica. Los electrones Auger pueden emitirse con energías de hasta unos 80 keV, aunque normalmente suelen tener una energía menor de 25 keV [5].

Este tipo de emisiones no son las más usuales, ni mucho menos, pero para el propósito de este trabajo será de gran utilidad tener en cuenta esto a parte de las emisiones beta, ya que ciertos isótopos decaen principalmente por estos procesos. Como vemos, la diferencia de energía entre los electrones emitidos tipo beta y los discretos es bastante considerable.

## 2.8. Método de Montecarlo

A lo largo del desarrollo de este trabajo, nos encontraremos en varias ocasiones que el valor de un parámetro en concreto no lo conocemos con exactitud, pero sí que sabemos que varía en un cierto rango, siguiendo una cierta distribución de probabilidad o simplemente con un componente que a priori puede ser aleatorio. Es aquí donde introduciremos el método de Montecarlo con la finalidad de obtener estimaciones sobre este.

Un ejemplo de esto es el ángulo de dispersión polar en una colisión elástica (ver sección 3.1), el cual no podemos conocer con exactitud, pero sí que sabemos que sigue una cierta distribución de probabilidad. Generando números aleatorios para recrear esta distribución de probabilidad y repitiendo el proceso un número elevado de veces, nos aseguramos de tener una buena representación del proceso aleatorio.

Supongamos ahora que tenemos dos procesos A y B los cuales pueden ocurrir con unas probabilidades de 0.3 y 0.7 respectivamente. La probabilidad acumulativa será  $P_{\text{Cum}}(i) = \frac{\sum_{j=1}^{n_i} P(j)}{\sum_{i=1}^N P(i)}$ . Tomamos  $i = 1 = A$  e  $i = 2 = B$ , obtenemos  $P_{\text{Cum}}(A) = 0.3$  y  $P_{\text{Cum}}(B) = 1$  y lanzamos un número aleatorio entre 0 y 1. Si el resultado es menor que 0.3 diremos que el proceso que ocurre es el A. Por el contrario si el número aleatorio resultante está entre 0.3 y 1 diremos que ocurre el proceso B. Realizando este proceso un número elevado de veces podremos tener una buena

aproximación estadística.

Este mecanismo lo podemos generalizar a  $N$  procesos, y será de vital importancia en secciones posteriores para modelar multitud de procesos como son el cálculo de los ángulos de dispersión elástica, la distancia de colisión, la energía con la que se emiten los electrones en los isótopos radiactivos de yodo, etc.

## 2.9. Energía depositada en una región (DPK) y dosis

Como ya hemos comentado antes, los electrones al viajar dentro de un sólido van interactuando con los átomos de este y van perdiendo energía debido a las colisiones. Visto desde otro punto de vista los electrones van depositando energía en distintas zonas del sólido debido al intercambio de energía entre los electrones y los átomos del medio. En este contexto se puede definir de distintas maneras la distribución de energía depositada en una cierta región del espacio. Una convención ampliamente utilizada es la de *dose point kernel* (DPK). Usaremos la definición siguiente [9] :

$$\text{DPK}(r) = \frac{\delta E(r)/E_0}{\delta r}, \quad (6)$$

donde  $r$  es la distancia radial del electrón al origen (punto de emisión),  $\delta E(r)$  es la cantidad de energía depositada a una distancia  $r$ ,  $E_0$  es la energía inicial del electrón,  $\delta r$  es el espesor (radial) de una capa esférica considerada. En la sección 3 discutiremos qué valor de  $\delta r$  es necesario escoger para poder realizar los cálculos de la simulación. Destacar también que como la energía  $E_0$  hace referencia a la energía inicial del electrón, si suponemos que estamos tratando un isótopo radiactivo dicha energía será distinta para cada electrón emitido.

Un concepto análogo a la distribución de energía depositada es el de dosis absorbida, que se puede definir como la cantidad de energía depositada por unidad de masa.

En nuestro caso particular nos centraremos en la dosis absorbida por unidad de volumen, siendo el volumen el de una capa esférica de espesor  $\delta r$ , es decir, el mismo espesor que consideramos en la definición de DPK. La elección de dosis absorbida por unidad de volumen se debe a que consideraremos medios homogéneos de tal manera que a partir de la densidad del material podemos hacer el cambio a dosis absorbida por unidad de volumen. La dosis podemos entenderla ahora como el cociente de la cantidad de energía almacenada en una capa esférica (DPK) entre el volumen de esta capa.

Esta magnitud es bastante importante ya que en la definición de DPK estamos considerando la distribución de energía depositada por cada capa esférica, pero conforme vamos tomando capas más alejadas del centro emisor, el volumen de cada capa considerada es mayor y este efecto no lo tenemos en cuenta. En el contexto de la medicina nuclear el concepto de dosis es de vital

importancia ya que en muchos casos queremos ver la energía depositada en un cierto volumen, ya sea para radioterapia o para algún otro caso.

### 3. Metodología y detalles de la simulación

#### 3.1. Principios de la simulación

Cuando simulamos las trayectorias de electrones en un sólido necesitamos dos componentes importantes de información para poder abordar el problema de una manera correcta, es el caso de los ángulos de deflexión del electrón tras sufrir una colisión elástica y la distancia que recorre el electrón entre una colisión y otra. Estos dos parámetros dependen de la energía con la que viaja el electrón. El ángulo polar de dispersión relativo respecto de la dirección previa al choque lo denotaremos por  $\theta$ , mientras que el ángulo de dispersión azimutal lo denotaremos por  $\phi$ . Destacar que estos ángulos vienen dados en el sistema de referencia de la colisión y no en el sistema de referencia de laboratorio.

En la figura 4 podemos observar un esquema entre dos colisiones elásticas sucesivas [10] donde los ángulos para la colisión  $n - 1$  en el sistema de referencia del laboratorio vienen denotados por  $\Theta_{n-1}$  y  $\Psi_{n-1}$  y los ángulos para la colisión  $n$  en el sistema de referencia del laboratorio son  $\Theta_n$  y  $\Psi_n$ . Los ángulos de dispersión en el sistema de referencia de la colisión vienen dados por  $\theta$  y  $\phi$  mientras que la distancia entre la colisión  $n - 1$  y la colisión  $n$  viene dada por  $L_{el}$ .

Una vez conocidos los ángulos de dispersión en el sistema de referencia de la colisión nuestro trabajo consiste en hacer un cambio de sistema de referencia al sistema de laboratorio para poder seguir la trayectoria que recorre el electrón en el sólido. Este cambio de coordenadas

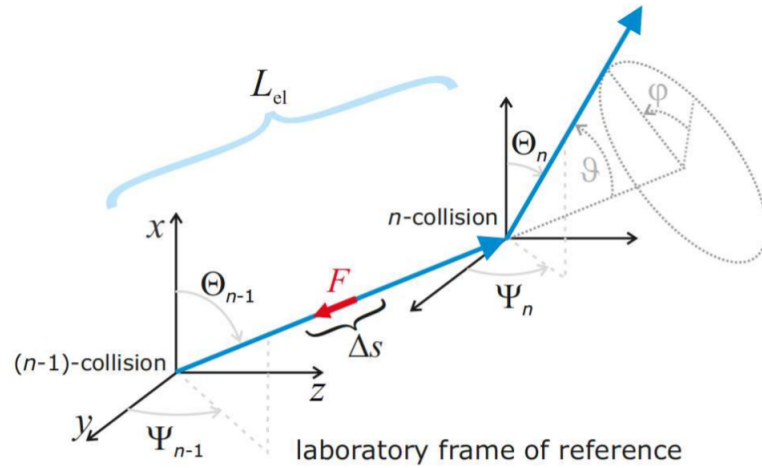


Figura 4: Esquema de la trayectoria entre dos colisiones elásticas sucesivas.  $L_{el}$  es la distancia entre colisiones elásticas [10].

vendrá descrito por la siguiente transformación [8, 11]:

$$\begin{aligned}\cos(\Theta_n) &= \cos(\Theta_{n-1}) \cos(\theta) - \sin(\Theta_{n-1}) \sin(\theta) \cos(\phi) \\ \sin(\Psi_n - \Psi_{n-1}) &= \sin(\theta) \sin(\phi) / \sin(\Theta_n).\end{aligned}\tag{7}$$

Para calcular las coordenadas actualizadas del electrón podemos utilizar las siguientes expresiones que vienen de obtener las coordenadas cartesianas  $(x, y, z)$  en función de las coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned}x_n &= x_{n-1} + L_{\text{el}} \cdot \sin(\Theta_n) \cos(\Psi_n) \\ y_n &= y_{n-1} + L_{\text{el}} \cdot \sin(\Theta_n) \sin(\Psi_n) \\ z_n &= z_{n-1} + L_{\text{el}} \cdot \cos(\Theta_n),\end{aligned}\tag{8}$$

donde los índices  $n$  y  $n - 1$  hacen referencia a la colisión  $n$  y a la colisión anterior  $n - 1$ .

A lo largo del desarrollo del trabajo haremos dos aproximaciones importantes que nos serán de bastante utilidad para la mayoría de cálculos. El ángulo de deflexión angular que sufre un electrón debido a colisiones inelásticas puede variar entre  $0$  y  $180^\circ$  pero debido a la propia masa del electrón este ángulo tiene una media de unos  $0.5^\circ$  [12] en cada colisión. Debido a esto, la primera de las aproximaciones que tendremos en cuenta es que sólo la dispersión elástica será la encargada de determinar la desviación del electrón. La probabilidad de sufrir una colisión elástica viene dada por la sección eficaz elástica de Rutherford [12]

$$\sigma_{\text{el}}(E) = 5,21 \cdot 10^{-21} \cdot \frac{Z^2}{E^2} \cdot \frac{4\pi}{\alpha(\alpha + 1)} \cdot \left( \frac{E + 511}{E + 1024} \right)^2 \quad (\text{cm}^2),\tag{9}$$

donde  $Z$  es el número atómico de la especie atómica que forma el sólido,  $E$  es la energía que lleva el electrón en keV y  $\alpha$  es el factor de apantallamiento de la carga.

La segunda aproximación que tendremos en cuenta es que el electrón pierde energía de manera continua [12]. Esto permite tener en cuenta directamente el resultado de los posibles procesos de dispersión inelásticos sin tener que hacer los cálculos explícitos de cada uno de los eventos individuales. La pérdida de energía de los electrones por unidad de distancia viene dada por el poder de frenado de Bethe, según la ecuación aproximada de Joy [12]:

$$\frac{dE}{dx} = -78500 \cdot \frac{\rho Z}{AE} \ln \left( \frac{1,166E}{J} + 1 \right) \quad (\text{keV/cm}),\tag{10}$$

donde  $A$  es el número másico (g/mol),  $\rho$  (g/cm<sup>3</sup>) es la densidad del material considerado y  $J$  es el potencial de ionización medio (que es una propiedad del blanco) expresado en keV.

La expresión del poder de frenado dada por la ecuación anterior es aproximada y sólo funciona para altas energías. Para energías menores de 500 eV esta expresión empieza a diferir de los



valores experimentales, Hieu T.Nguyen-Truong [13] propuso una corrección empírica para tratar de corregir la relación del poder de frenado a energías relativamente bajas. Esta corrección consiste simplemente en la introducción de un factor  $G(E)$  dependiente de la energía, de tal manera que la expresión para el poder de frenado quedaría de la siguiente manera [13]:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dx} &= -78500 \cdot \frac{\rho Z}{AE} \ln \left( \frac{1,166E}{J} + G(E) \right) \quad (\text{keV/cm}) \\ G(E) &= 1 - \sqrt{\frac{e}{2}} \ln [1 + (E/J)^2] \frac{J}{E} + \frac{1}{3} \ln \left[ \frac{Z}{2} \right] \exp \left[ -\frac{3}{\sqrt{Z}} \left( 1 - \frac{2}{\sqrt{Z}} + \ln \frac{E}{J} \right)^2 \right] \frac{E}{J}, \end{aligned} \quad (11)$$

donde ahora  $e$  es el número de Euler. En las secciones posteriores analizaremos en detalle la diferencia entre estas dos expresiones para el poder de frenado con el fin de decidir qué relación nos interesa utilizar en cada una de las simulaciones que realizamos.

### 3.2. Interacción de un haz de electrones en materia condensada

Suponemos ahora un haz de electrones incidentes en un sólido, tomando como punto de partida de los electrones el origen de coordenadas.

#### 3.2.1. Tratamiento de colisiones elásticas

Las colisiones elásticas vendrán dadas de acuerdo a la sección eficaz de Rutherford dada en la ecuación (9). El factor de apantallamiento lo podemos calcular de acuerdo a la siguiente expresión [14, 12] :

$$\alpha = 3,4 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{Z^{0,67}}{E}. \quad (12)$$

Como ya vimos en la sección (2.3), a partir de la sección eficaz se puede definir el recorrido libre medio. En nuestro caso utilizamos la expresión para la sección eficaz elástica de Rutherford. La expresión para el recorrido libre medio [12, 14, 8] queda de la siguiente manera:

$$\lambda = \frac{A}{N_A \rho \sigma_{\text{el}}} \quad (\text{cm}), \quad (13)$$

donde  $N_A$  es el número de Avogadro y  $\sigma_{E_{\text{el}}}$  es la sección eficaz elástica de Rutherford.

La distancia recorrida por los electrones entre colisión y colisión varía entre un cierto rango. Es aquí donde introducimos el método de Montecarlo y por tanto la distancia recorrida por un electrón entre colisiones sucesivas vendrá dada por [12, 8]:

$$L_{\text{el}} = -\lambda \cdot \ln(\rho_1) \quad (\text{cm}), \quad (14)$$

donde  $\rho_1$  hace referencia a un número aleatorio entre 0 y 1. Como se puede ver la distancia recorrida por los electrones en cada caso depende un número aleatorio y no será siempre la misma. Los números aleatorios los obtenemos ( $\rho_1$  y los restantes de este trabajo) con la subrutina 'srandom.f90', que es un generador de números aleatorios en el lenguaje de programación que estamos utilizando.

Cuánto se desvía el electrón en la dispersión elástica viene determinado por la expresión diferencial de la sección eficaz de Rutherford,  $\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = \sigma'(\theta)$ . Aplicando esto a nuestro caso podemos escribir [12]:

$$\rho_2 = \int_0^\theta \frac{\sigma'(\theta)}{\sigma_{el}} d\Omega, \quad (15)$$

en cuyo caso, la integral definida entre los límites 0 y  $\theta$  nos marca la probabilidad de que un electrón se desvíe un ángulo menor que  $\theta$ . Evaluando esta expresión podemos reducir el cálculo del ángulo de colisión a [12]:

$$\cos(\theta) = 1 - \frac{2\alpha\rho_2}{1 + \alpha - \rho_2}, \quad (16)$$

donde  $\alpha$  es de nuevo el factor de apantallamiento y  $\rho_2$  un número aleatorio entre 0 y 1. Esta expresión nos permite calcular  $\theta$  (que varía entre 0 y  $180^\circ$ ) con una distribución de probabilidad cercana a lo que ocurre realmente. El otro ángulo de dispersión (azimutal) varía entre 0 y  $2\pi$ , además no hay ninguna condición que nos determine cuál es su valor concreto, así que este ángulo se sortea de acuerdo a la relación siguiente:

$$\psi = 2\pi \cdot \rho_3. \quad (17)$$

Utilizamos las transformaciones dadas en la ecuación (7) para calcular los ángulos en el sistema del laboratorio. Para calcular las coordenadas actualizadas del electrón podemos utilizar las expresiones de la ecuación (8). Dada la relación entre los ángulos de dispersión y teniendo en cuenta la relación entre las coordenadas entre colisión elástica y colisión elástica, tendremos que dar unos valores iniciales a los ángulos y a las coordenadas de los electrones para poder comenzar la simulación. Dependiendo de qué situación queramos describir estos valores iniciales de los parámetros deben cambiar.

### 3.2.2. Tratamiento para colisiones inelásticas

Ahora podemos pasar a calcular la energía que ha perdido el electrón debido a las colisiones inelásticas que, como ya hemos comentado, vendrán promediadas en las expresiones para el poder de frenado. Para calcular el valor del potencial medio de ionización utilizamos la expresión

empírica [12]:

$$J = \left[ 9,76 \cdot Z + \frac{58,5}{Z^{0,19}} \right] \cdot 10^{-3} \quad (\text{keV}). \quad (18)$$

Una vez calculado el potencial medio de ionización podemos calcular el poder de frenado, ya sea utilizando la ecuación (10) o la (11). Teniendo en cuenta la ecuación (4) y sustituyendo los valores del poder de frenado y la distancia  $L_{\text{el}}$  recorrida por el electrón, calculamos la pérdida de energía de este debido a colisiones inelásticas.

### 3.2.3. Haz de electrones incidentes en un sólido elemental

Ya tenemos todos los parámetros que describen las colisiones de los electrones en un medio material. En esta sección vamos a aplicar estos ingredientes a la situación concreta de un haz de electrones que inciden en un blanco elemental, donde con elemental nos referimos a que el material está compuesto solo por una especie atómica.

Lo primero de todo será dar unas condiciones iniciales al problema, así que por simplicidad, consideraremos que el haz de electrones incide perpendicularmente sobre un medio material, en la dirección positiva del eje  $z$ . Al tomar esta dirección en concreto ponemos como ángulos iniciales en el sistema de referencia del laboratorio  $\Theta_0 = 90^\circ$  y  $\Psi_0 = 90^\circ$ , de acuerdo a la figura 4. Los valores de las coordenadas  $(x, y, z)$  en el punto inicial son cero.

La energía inicial del haz de electrones es un parámetro que tendremos que especificar para poder empezar la simulación, al igual que el número de veces que queremos repetir los cálculos, es decir, el número de electrones que queremos tomar en nuestro haz. En función de qué es lo que queremos calcular, variaremos estos dos parámetros en busca de una optimización de la simulación. También debemos especificar en el programa las condiciones para dejar de seguir al electrón en su trayectoria, ya sea porque se ha salido del material (por retrodispersión o por transmisión) o porque ha alcanzado una energía pequeña debido a las interacciones (absorción). Si el electrón retrocede ( $z < 0$ ) con una energía mayor de 50 eV lo consideraremos como retrodispersado. Si por el contrario, el electrón alcanza una distancia en el eje  $z$  más grande que el espesor del material con una energía mayor de 50 eV, el electrón habrá sido transmitido. Cuando el electrón no salga del medio material y alcance una energía menor de 50 eV, este habrá sido absorbido.

A continuación vamos a mostrar un esquema explicativo de cuáles son los pasos a seguir durante la simulación para cada electrón en este caso en concreto.

- Se comienza la simulación con un electrón con una cierta energía  $E$  y con unas coordenadas concretas.

- Calculamos la distancia recorrida por el electrón a partir de la sección eficaz elástica (ecuación (14)).
- Calculamos los ángulos de dispersión en el sistema de referencia de la colisión a partir de las expresiones (16) y (17).
- A partir de las transformaciones dadas por las ecuaciones (7) y (8) calculamos las nuevas coordenadas y ángulos del electrón en el sistema de referencia del laboratorio.
- Calculamos el poder de frenado y, acudiendo a la ecuación (4), calculamos la energía perdida,  $\Delta E$ , por el electrón en la colisión, donde hay que tomar la aproximación  $d = L_{\text{el}}$ .
- Actualizamos la nueva energía del electrón,  $E_n = E_{n-1} - \Delta E$ .
- Comprobamos si se cumple alguna de las condiciones de retrodispersión, absorción o transmisión; si es así dejamos de seguir el electrón.
- Si la energía del electrón es menor que la energía umbral, dejamos de seguir al electrón. Si la energía es mayor que la energía umbral, volvemos a realizar el proceso descrito.

Este esquema que hemos descrito deberemos realizarlo para todos los electrones del haz que estemos considerando. Para calcular los coeficientes de retrodispersión, tenemos que contabilizar el número de electrones que cumplen la condición impuesta de retrodispersión y dividir por el número total de electrones del haz, es decir, del número de electrones que estamos simulando. Para los coeficientes de absorción y transmisión realizamos un proceso análogo.

### 3.2.4. Haz de electrones incidentes en blanco compuesto: agua

Seguidamente simularemos un haz de electrones que inciden sobre agua, que como sabemos, es un material compuesto por moléculas con dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno. En concreto estamos interesados en volver a realizar los cálculos para el coeficiente de retrodispersión, pero al tratarse de un material compuesto debemos modificar ligeramente las ecuaciones para las colisiones elásticas e inelásticas.

Respecto a las colisiones elásticas, cada especie atómica del material compuesto tendrá una sección eficaz elástica distinta, en nuestro caso tomamos  $\sigma_{\text{H}}$  y  $\sigma_{\text{O}}$  como las secciones eficaces del hidrógeno y del oxígeno respectivamente. La sección eficaz total del agua viene dada por la suma de las secciones eficaces individuales del oxígeno y la del hidrógeno multiplicada por un factor dos, que aparece debido a la presencia de dos átomos de hidrógeno por cada átomo de oxígeno:

$$\sigma_{\text{el}} = 2\sigma_{\text{H}} + \sigma_{\text{O}}. \quad (19)$$

Para el cálculo de la sección eficaz del oxígeno y del hidrógeno debemos introducir la constante de apantallamiento propia de cada especie atómica en la ecuación (9). Tendremos entonces que  $\alpha_O$  hace referencia a la constante de apantallamiento del oxígeno y  $\alpha_H$  a la del hidrógeno. Con estos parámetros y con los números atómicos del oxígeno y el hidrógeno, tendremos la sección eficaz total del agua en función de la energía.

Cuando el electrón viaja a través de un sólido compuesto, no todas las colisiones elásticas que sufre son con la misma especie atómica. En nuestro caso, algunas colisiones elásticas serán por interacción con el núcleo de hidrógeno y otras con el de oxígeno. Cada una de estas interacciones vendrá dada con una cierta probabilidad, que a su vez está relacionada con las secciones eficaces. Asumiendo que ha habido una colisión, la probabilidad de que haya sido con un núcleo de hidrógeno y la probabilidad de que haya sido con un núcleo de oxígeno vendrá dada por:

$$\begin{aligned} P_H &= \frac{2\sigma_H}{2\sigma_H + \sigma_O} \\ P_O &= \frac{\sigma_O}{2\sigma_H + \sigma_O}. \end{aligned} \quad (20)$$

Una vez conocemos estas probabilidades modelamos este efecto en la simulación lanzando un número aleatorio,  $\rho_4$ , entre 0 y 1. Si ese número aleatorio cae entre 0 y  $P_H$  tomaremos que la colisión ha sido con el núcleo de hidrógeno, si no es así tomamos que la colisión ha sido con el núcleo de oxígeno. La importancia de conocer con que núcleo se ha producido la colisión viene de que el ángulo de desviación  $\theta$  dado por la ecuación (16) depende de ello. Dependiendo de con que núcleo haya interactuado el electrón obtendremos un ángulo de dispersión distinto.

La expresión para el recorrido libre medio vendrá dada por la ecuación (13) y tenemos que introducir la sección eficaz elástica total, calculada como hemos explicado. El número másico  $A$  hace referencia a la suma de los números másicos de los átomos de hidrógeno y oxígeno que componen la molécula de agua.

Por otro lado, las ecuaciones utilizadas para tener en cuenta las colisiones inelásticas (en promedio) también se ven ligeramente afectadas. Hablamos de las ecuaciones (10), (11) y (18) que como podemos ver dependen del número atómico y másico de la especie atómica con la que interactúan los electrones. Para que sean válidas hay que introducir el valor promedio de los números atómicos y másicos del oxígeno y del hidrógeno en el agua:

$$\begin{aligned} Z_{\text{med}} &= \frac{2Z_H + Z_O}{3} \\ A_{\text{med}} &= \frac{2Z_H + Z_O}{3}. \end{aligned} \quad (21)$$

Con estas modificaciones ya tenemos adaptadas las ecuaciones para el agua y para el cálculo

del coeficiente de retrodispersión debemos repetir el esquema descrito en la sección anterior pero teniendo en cuenta las modificaciones pertinentes. Destacar que esta deducción puede generalizarse para un material compuesto por moléculas con  $N$  especies atómicas distintas.

### 3.3. Emisión radiactiva de electrones en agua

Estamos tomando agua como medio de propagación debido a que el cuerpo humano esta formado en un 65 % aproximadamente por agua. Lo que buscamos ahora no es simular un haz de electrones incidentes en un sólido, sino tomar electrones que se emiten en un punto central en cualquier dirección del espacio. Cuando nos encontramos en la situación de un haz de electrones incidentes en un sólido, tomábamos como condición inicial los ángulos  $\Theta_0 = 0^\circ$  y  $\Psi_0 = 0^\circ$  que corresponden justo a que el haz está incidiendo perpendicularmente en la dirección positiva del eje  $z$ .

Para que los electrones se emitan isotrópicamente en cualquier dirección del espacio lo que hacemos no es dar una condición inicial a los ángulos  $\Theta_0$  y  $\Psi_0$ , sino que utilizamos números aleatorios entre 0 y 1 para sortear los valores de estos. Más concretamente tomamos:

$$\begin{aligned}\Theta_0 &= \arccos(2 \cdot \rho_5 - 1) \\ \Psi_0 &= 2\pi \cdot \rho_6,\end{aligned}\tag{22}$$

donde simulando un número alto de electrones tendremos una distribución aleatoria en todas direcciones del espacio. Ahora el coeficiente de retrodispersión no es una magnitud que nos interese pues como suponemos que estamos en un material infinito (o muy grande) y no tomamos una lámina de un determinado material, este coeficiente deja de tener sentido físico. Las condiciones de retrodispersión y de transmisión las eliminamos del programa y dejamos solo la de absorción, para determinar cuándo deja de ser importante seguir al electrón en su trayectoria.

#### 3.3.1. Emisión de electrones con la misma energía inicial

En este tipo de situaciones estamos interesados en calcular otro tipo de magnitudes como la cantidad de energía depositada en una determinada región del espacio, lo que hemos definido como DPK (sección 2.9). Como situación de partida vamos a tomar que todos los electrones que se emiten en el medio lo hacen con la misma energía inicial  $E_0$ .

Para poder calcular el DPK tal como lo definimos en la ecuación (6), debemos discretizar el espacio en capas esféricas de espesor  $\delta r$ . La energía que queda depositada en cada capa vendrá dada por el intercambio de energía de los electrones, es decir, si en lo que viaja un electrón en una capa esférica considerada intercambia una cierta cantidad de energía  $\Delta E$  con el medio,

tomamos que esta cantidad de energía es almacenada en la capa esférica por la que ha viajado el electrón.

Este procedimiento hay que tenerlo en cuenta para todas las capas esféricas que hayamos considerado y para todos los electrones que se emitan. Sabiendo la cantidad de energía almacenada en cada capa por electrón, podemos hacer una ponderación cuando se emiten un gran número de estos y así tendremos una buena aproximación a cómo se distribuye la cantidad de energía almacenada alrededor del punto de emisión.

Sólo nos falta establecer cuántos electrones se deben emitir para tener una buena estadística, el número de capas consideradas y el espesor de cada una de ellas. Cuando los electrones se emiten con la misma energía, la distancia promedio que recorren los electrones antes de ser absorbidos por el medio se le llama rango de los electrones. Esta distancia depende de la energía inicial de estos y del material considerado.

Para asegurarnos que toda la energía intercambiada por los electrones queda confinada dentro de las capas esféricas, discretizamos el espacio hasta una distancia de 1.2 veces el rango de los electrones para la energía inicial que tomemos en el agua. El rango de estos electrones lo extraemos de la base de datos ESTAR [15]. Para este caso tomamos el espesor de cada capa  $\delta r$  como el rango de los electrones dividido por 100 y un total de 120 capas. El número de electrones lanzados será de 500000. Haremos este procedimiento para varias energías iniciales de los electrones.

### 3.3.2. Emisión de electrones por $^{131}\text{I}$ en agua

La emisión de electrones por un isótopo radiactivo sabemos que puede producirse por emisiones tipo  $\beta^-$  o por emisiones discretas (secciones 2.6 y 2.7). La energía inicial de los electrones no será la misma en cada caso.

Para conocer la energía con la que se emiten los electrones en desintegraciones tipo beta para el  $^{131}\text{I}$ , necesitamos conocer la probabilidad de cada emisión. Para ello acudimos a datos experimentales disponibles para este isótopo radiactivo. En el cuadro 1 podemos ver estos datos de la energía de emisión de electrones y su probabilidad [16].

Aunque los datos que cogemos son discretos realmente, todas las energías dentro de este rango son posibles para emisión de electrones. La modelización de con qué energía se emiten los electrones la haremos a través de la probabilidad acumulativa. Calculamos la probabilidad acumulativa a partir de la siguiente expresión:

$$P_{\text{Cum}}(E) = \frac{\int_0^E P(E')dE'}{\int_0^\infty P(E')dE'}, \quad (23)$$

Energía (MeV)	Probabilidad
0.0202	0.1378
0.0605	0.1313
0.1009	0.1231
0.1412	0.1131
0.1816	0.1016
0.2219	0.0894
0.2623	0.0770
0.3026	0.0647
0.3429	0.0529
0.3833	0.0414
0.4236	0.0303
0.4640	0.0200
0.5043	0.0111
0.5447	0.0045
0.5850	0.0008
0.6254	0.0001
0.6657	6.94E-05
0.7060	4.13E-05
0.7464	1.73E-05
0.7867	2.95E-06

Cuadro 1: Probabilidad de la energía de los electrones emitidos por el  $^{131}\text{I}$  por desintegración  $\beta^-$  [16].

donde  $P(E')$  hace referencia a la probabilidad de emisión a una energía determinada. El límite superior del denominador lo podemos aproximar como la energía máxima con la que emite el isótopo, de tal manera que obtenemos los valores de probabilidad cumulativa normalizados a la unidad.

Como hemos dicho anteriormente, no conocemos las probabilidades cumulativas para todas las energías sino que los datos experimentales son discretos. Para conseguir un espectro continuo de emisión utilizamos las subrutinas 'locate.for' y 'polint.for' de Numerical Recipes [17] para realizar interpolaciones lineales entre cada punto que conocemos. La primera de estas, dado un número cualquiera  $R$  nos encuentra en un vector de números reales (ordenado de menor a mayor o viceversa) las posiciones más cercanas a este número. La segunda de las subrutinas nos permite realizar una interpolación lineal para dado un valor  $x$  poder calcular el correspondiente  $y$ .

Aplicando todo esto, y además suponiendo que para energía cero, la probabilidad cumulativa de emisión es cero podemos dibujar esta probabilidad en función de la energía como se observa en la figura 5. Seguidamente, se genera un número aleatorio,  $\rho_7$ , entre 0 y 1, que equivale a la probabilidad cumulativa. Como a este número le corresponderá una cierta energía la tomaremos como energía de emisión del electrón. Haciendo esto tenemos una distribución de probabilidad de emisión adecuada a los datos experimentales para el isótopo radiactivo  $^{131}\text{I}$ .



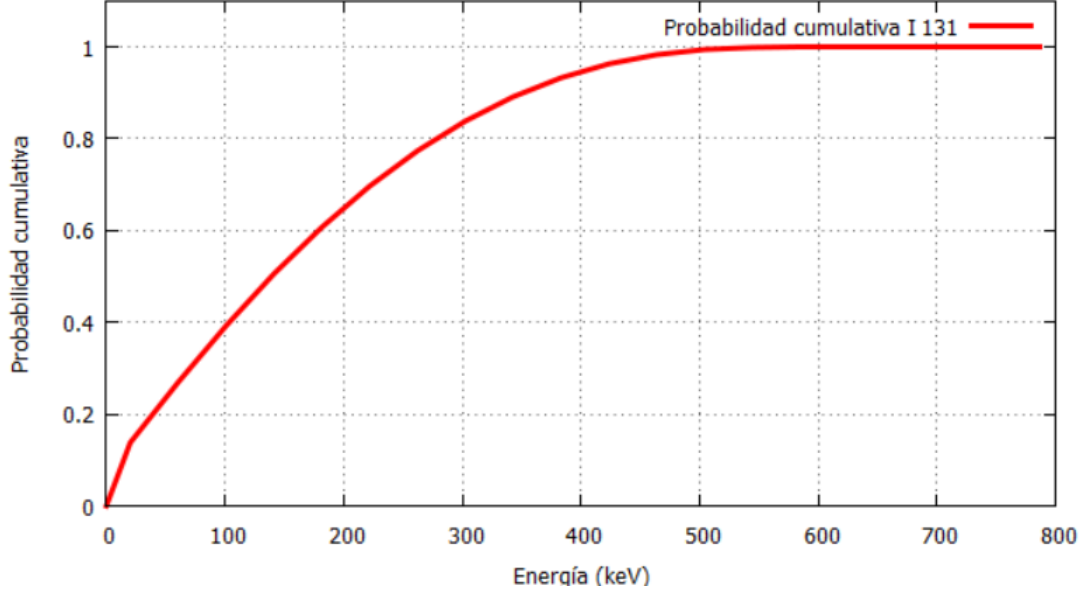


Figura 5: Probabilidad acumulativa de emisión  $\beta^-$  en función de la energía para  $^{131}\text{I}$ .

En cuanto a las emisiones discretas, el procedimiento es casi el mismo. En la ecuación (23) las integrales se transforman en sumatorios de tal manera que tenemos:

$$P_{\text{Cum}}(E) = \frac{\sum_{i=1}^{n_i} P(E_i)}{\sum_{i=1}^N P(E_i)}, \quad (24)$$

donde  $N$  hace referencia al número total de posibles emisiones discretas y  $n_i$  es el número de emisión, ordenado de menor a mayor energía. Las probabilidades y posibles energías de emisión para este caso las podemos encontrar en el cuadro 2 [18].

A partir de estos datos, podemos calcular la probabilidad acumulativa para cada energía y construir una gráfica análoga a la dada en la figura 5, pero con puntos discretos. Esto podemos verlo en la figura 6.

Lo que hacemos es generar otro número aleatorio,  $\rho_8$ , entre 0 y 1 para ver con qué energía se emite el electrón. Ahora para cada valor de energía de emisión le corresponde un intervalo de probabilidad, pero en el fondo estamos realizando el mismo proceso que cuando trabajamos con emisiones de energía continuas.

Podemos observar directamente de las figuras 5 y 6 que ahora los electrones emitidos están en un abanico de energías muy amplio, por lo que el rango de los electrones también será muy variable. Por lo tanto, debemos aumentar el número de capas y disminuir el espesor de estas para que, al realizar los cálculos, todo el rango de energías que estamos simulando quede dentro de las capas esféricas generadas.

Lo que hacemos ahora es tomar 10000 capas y tomando el rango aproximado de los electrones

Energía (MeV)	Probabilidad
0.0034	0.0510
0.0246	0.0060
0.0456	0.0354
0.0747	0.0046
0.0790	0.0009
0.0800	0.0002
0.1427	0.0005
0.1718	0.0001
0.2497	0.0025
0.2789	0.0004
0.3299	0.0155
0.3590	0.0025
0.3633	0.0005
0.3643	0.0001
0.6024	0.0003

Cuadro 2: Probabilidad de la energía de los electrones emitidos por  $^{131}\text{I}$  por emisiones discretas [18].

de la energía más alta emitida (unos 0.05 cm), el espesor de cada capa  $\delta r$  lo definimos como el cociente entre el rango y el número de capas totales. Esto nos da un espesor  $\delta r = 5 \cdot 10^{-6}$  cm.

Para calcular la cantidad total de energía depositada en cada capa esférica hay que tener en cuenta los dos tipos de emisión y la probabilidad con la que se produce cada una de estas. Para ello, sumamos las probabilidades de cada uno de los cuadros 1 y 2 y hacemos una ponderación entre ellas para ver cuánto probable es la emisión discreta y la continua, en comparación una

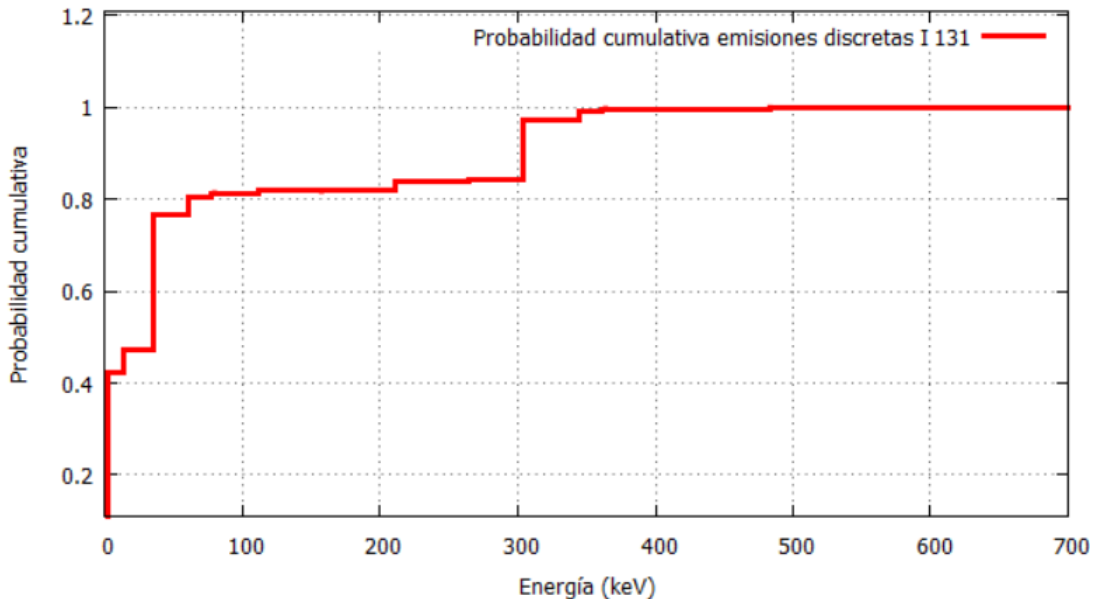


Figura 6: Probabilidad acumulativa de emisión discreta en función de la energía para  $^{131}\text{I}$

con la otra.

Obtenemos que si se ha producido una emisión de un electrón, la probabilidad de que haya sido una desintegración  $\beta^-$  es  $P_{\beta^-} = 0.892$ , y la probabilidad de que haya sido una emisión discreta es  $P_{\text{Dis}} = 0.108$ . Una vez conocemos esto, simulamos por separado los dos tipos de emisión lanzando un total de 500000 electrones para cada una de ellas y con los parámetros de número de capas y espesor de estas que hemos especificado. Finalmente la energía total depositada en cada capa esférica para emisiones discretas y continuas la calculamos ponderando las contribuciones de la siguiente manera:

$$\text{DPK}(r) = P_{\beta^-} \text{DPK}_{\beta^-}(r) + P_{\text{Dis}} \text{DPK}_{\text{Dis}}(r). \quad (25)$$

### 3.3.3. Emisión de electrones por $^{125}\text{I}$ en agua

El isótopo  $^{125}\text{I}$  solamente emite electrones de una forma discreta, por lo que en este caso no nos tendremos que preocupar de las emisiones  $\beta^-$ . Los datos de energía de emisión y probabilidad para este isótopo radiactivo los podemos encontrar en el cuadro 3 [19]. Con ello podemos volver a calcular la probabilidad acumulativa de cada una de las posibles emisiones y realizar una gráfica como la figura 6.

Una vez hecho esto, ya podemos simular la emisión de electrones desde un punto central por el isótopo radiactivo  $^{125}\text{I}$ . Calculamos la dosis de energía por unidad de volumen simplemente dividiendo el DPK obtenido por el volumen de cada capa esférica. El número de electrones y de capas es el mismo que para el apartado anterior. La única diferencia es el espesor de las capas

Energía (keV)	Probabilidad
0.0298	1.629E-001
0.0323	5.060E-001
0.1270	6.685E-002
0.2190	1.225E-002
0.4610	1.522E-001
3.0499	5.803E-002
3.6499	8.868E-003
3.6699	1.578E-002
4.3399	9.796E-004
22.399	6.407E-003
26.399	2.739E-003
30.199	3.017E-004
30.600	5.107E-003
34.100	1.318E-003

Cuadro 3: Probabilidad de la energía de los electrones emitidos por el  $^{125}\text{I}$  por emisiones discretas [19].

esféricas que con el mismo procedimiento de antes obtenemos un valor de  $\delta r = 0.001 \mu\text{m}$ .

El volumen de cada capa esférica vendrá determinado por :

$$V_i = \frac{4}{3}\pi r_i^3 - V_{i-1}, \quad (26)$$

donde  $r_i = i\delta r$ , es la distancia de la capa esférica  $i$  hasta el origen de coordenadas o punto de emisión. Esta distancia la calculamos fácilmente teniendo en cuenta cómo hemos definido nuestras capas. La dosis absorbida por unidad de volumen la calculamos a partir de la relación:

$$\text{Dosis}(r) = \frac{\text{DPK}_i(r)}{V_i} \quad (27)$$

Este isótopo radiactivo tiene algunas energías de emisión muy bajas (29.8 eV y 32.3 eV), así que en este caso bajamos la energía de absorción de electrones en el medio a 10 eV para que le dé tiempo a los electrones a interaccionar con el agua e intercambiar energía.

## 4. Resultados y discusión

En esta sección vamos a ver y discutir los resultados obtenidos de las simulaciones. Comenzaremos realizando unas pequeñas comprobaciones en las que compararemos resultados obtenidos de nuestra simulación con algunos datos experimentales y teóricos de los que disponemos. Esto nos dará una idea de que los modelos utilizados sean adecuados para los objetivos principales del trabajo.

Cuando hablemos de modelo de Bethe-Joy o de Joy [12] significará que hemos utilizado la ecuación (10) para el poder de frenado. Por el contrario cuando hablemos de la corrección de Nguyen-Truong o de Nyugen [13], nos referimos a que hemos utilizado la ecuación (11) para el poder de frenado.

### 4.1. Evaluación del programa de simulación

#### 4.1.1. Coeficientes de retrodispersión y transmisión para el aluminio y agua

Antes de pasar a ver los resultados del coeficiente de retrodispersión, vamos a estudiar la comparación del poder de frenado del modelo de Bethe-Joy [12] y de la corrección de Nyugen [13] para hacernos una idea de cuánto se diferencian (figura 7).

Lo primero que salta a la vista es que ambos modelos solapan a energías mayores de unos 0.5 keV, por lo que a energías mayores que esta no habrán diferencias apreciables entre usar un

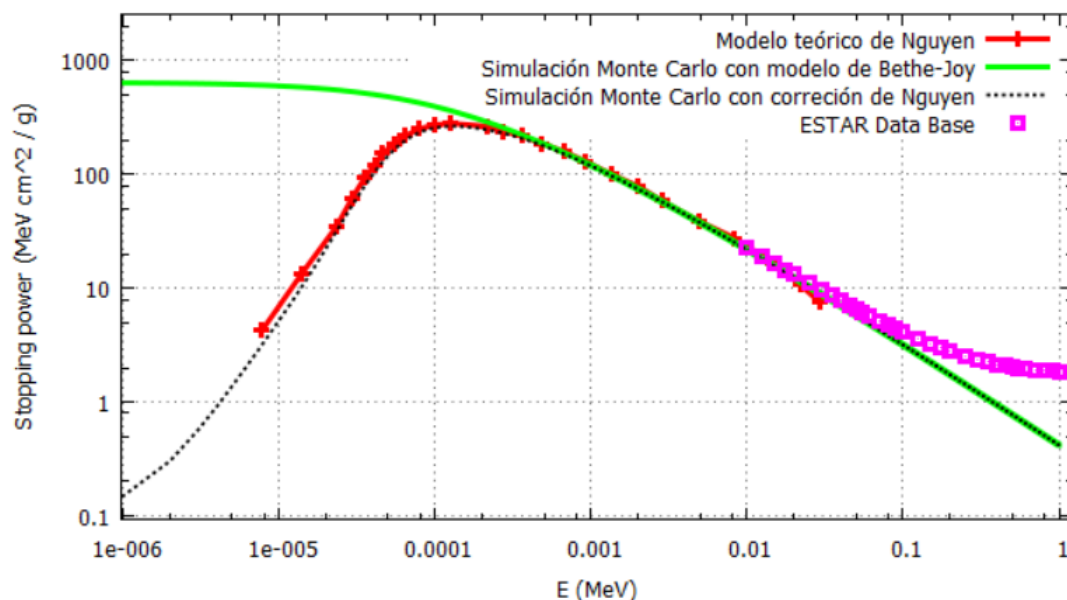


Figura 7: Comparación de stopping power para el agua. Línea verde: simulación propia con modelo de Bethe-Joy [12]. Línea negra discontinua: simulación propia con corrección de Nyugen [13]. Puntos lilas: datos tabulados de base de datos ESTAR [15]. Línea con puntos rojos: modelo teórico con corrección de Nyugen [13].

modelo u otro. Si bajamos a unos 0.1 keV, la diferencia entre los modelos empieza a ser mucho más apreciable y tienen comportamientos completamente distintos. Por lo tanto la corrección de Nyugen [13] es útil cuando vamos a estudiar y simular electrones con una energía baja.

Destaca también de la figura 10 que entre el rango de energías de 10 y 100 keV ambos modelos encajan bastante bien con los datos proporcionados por ESTAR [15]. Si realizamos simulaciones en este rango de energías estaremos asegurándonos que el poder de frenado es bastante cercano a la realidad. Cuando nos pasamos de 100 keV ya empieza a haber más diferencia entre la realidad y los modelos que estamos usando. Hemos utilizado agua como material para comparar los poderes de frenado pero se obtienen resultados análogos para el aluminio.

Comenzamos simulando un haz de electrones incidentes en un sólido simple tal como explicamos en la sección 3.2.1 . El primer material que tomaremos es el aluminio, que tiene número atómico  $Z = 13$  uma, número másico  $A = 27$  uma y una densidad  $\rho = 2.7 \text{ g/cm}^3$ .

En primer lugar, calculamos el valor del coeficiente de retrodispersión para una energía inicial de los electrones  $E_0 = 20 \text{ keV}$ , para distintos espesores de un lámina de aluminio (figura 8) con el modelo de Bethe-Joy [12] (ya que la energía inicial de los electrones es demasiado alta para encontrar diferencias entre modelos). Podemos observar cómo los resultados obtenidos con nuestra simulación concuerdan bastante bien con otra simulación Montecarlo [20] y con estos datos experimentales [20]. Cuando el espesor de la lámina de aluminio es pequeño, prácticamente no hay retrodispersión, ya que los electrones no interaccionan lo suficiente con la materia y la

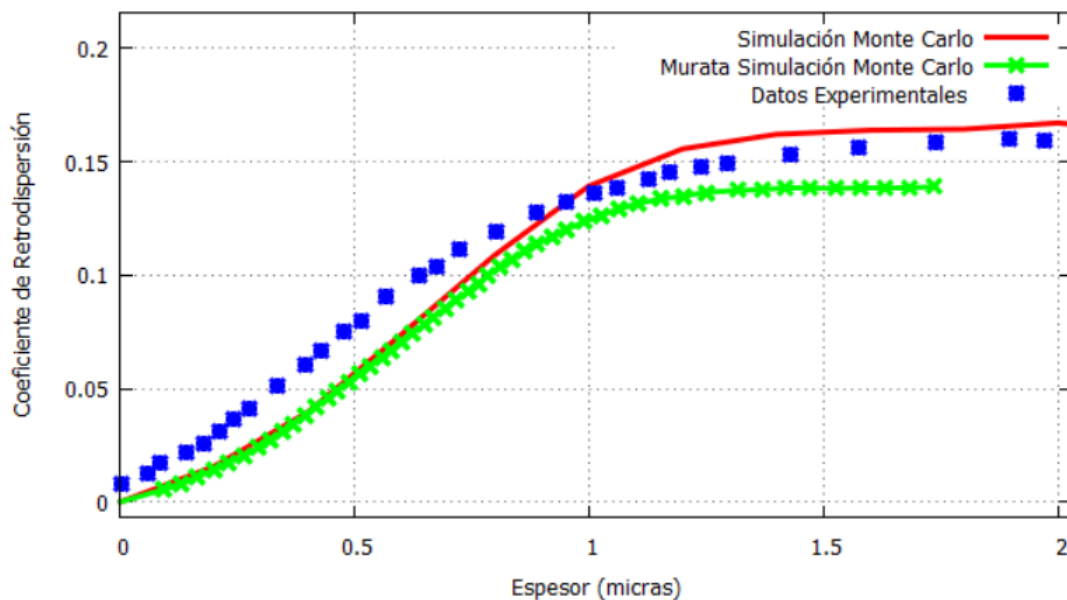


Figura 8: Coeficiente de retrodispersión del aluminio para varios espesores y energía inicial de 20 keV. Línea roja: trabajo presente con modelo de Bethe-Joy [12]. Línea y puntos verdes: simulación de Murata [20]. Puntos azules: datos experimentales [20].

mayoría de estos atraviesan la lámina.

Cuando el espesor se hace más grande el coeficiente de retrodispersión comienza a aumentar hasta que alcanza un valor un poco por encima de 0.15 . Este estancamiento del coeficiente de retrodispersión, es debido a que el rango de los electrones en el aluminio, para una energía inicial de 20 keV es más pequeño que el espesor de la propia lámina.

Respecto al coeficiente de transmisión para varios espesores y la misma energía inicial obtenemos los resultados mostrados en la figura 9, donde de nuevo hemos utilizado el modelo de Bethe-Joy [12]. Podemos observar como los resultados obtenidos con nuestra simulación se parecen bastante a otras simulaciones [20] y los datos experimentales representados [20].

Como comentamos anteriormente, el coeficiente de transmisión para espesores pequeños debe ser prácticamente 1 tal y como se observa. Conforme aumentamos el espesor, este coeficiente empieza a disminuir hasta hacerse cero, debido a que los electrones no tienen suficiente energía como para atravesar la lámina de aluminio.

Tomando ahora un espesor muy grande (en nuestro caso de 100000 cm), nos aseguramos que ningún electrón consigue atravesar la lámina de aluminio. Con esto podemos calcular el coeficiente de retrodispersión para un espesor semi-infinito (muy grueso) y compararlo con datos experimentales que se disponen para este caso. Hemos usado el modelo de Bethe-Joy [12] y la corrección de Nyugen [13].

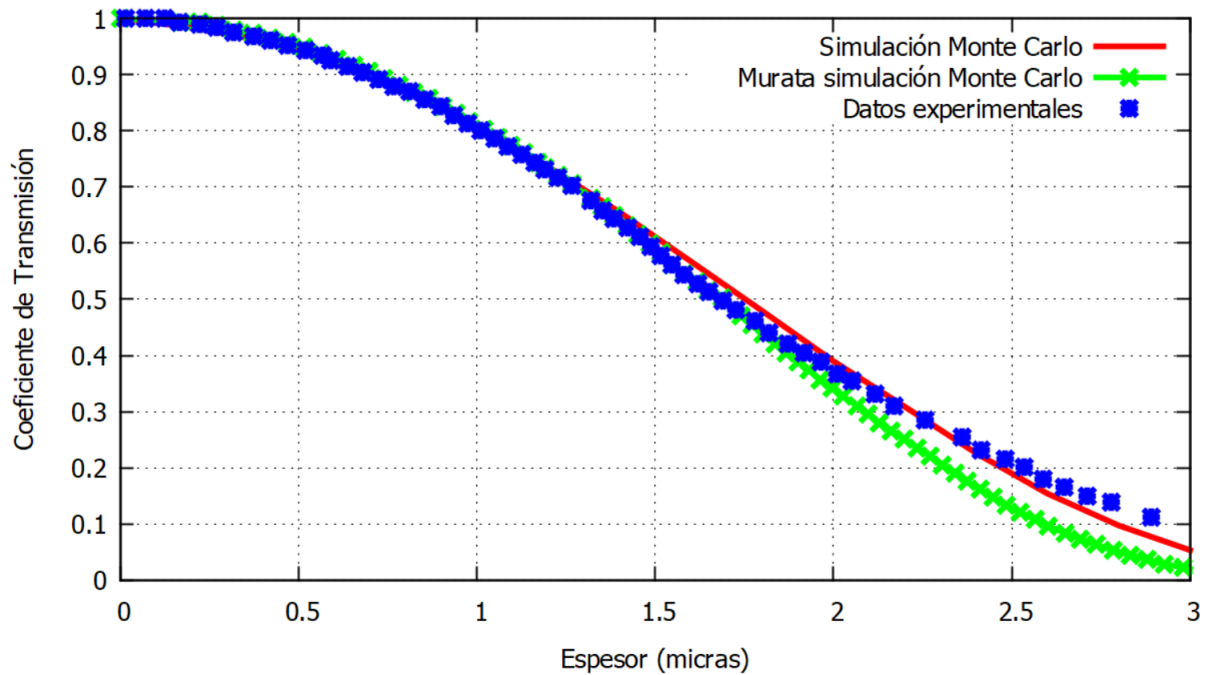


Figura 9: Coeficiente de transmisión del aluminio para varios espesores y energía inicial de 20 keV. Línea roja: trabajo presente con modelo de Bethe-Joy [12]. Línea y puntos verdes: simulación de Murata [20]. Puntos azules: datos experimentales [20].

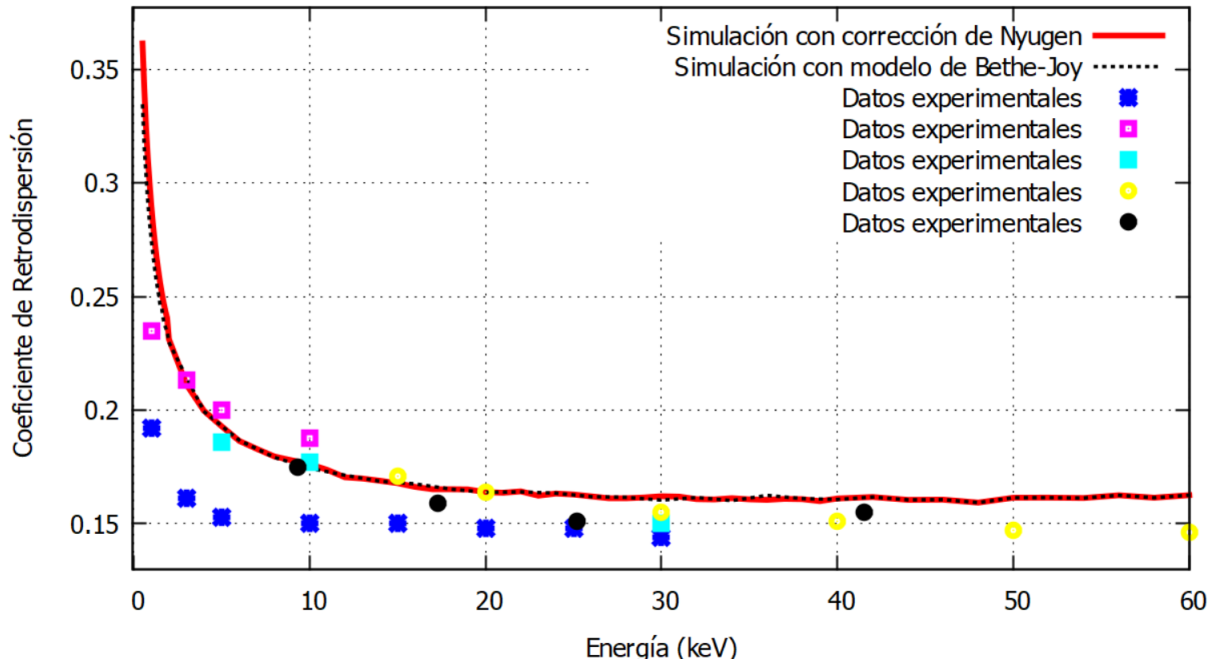


Figura 10: Coeficiente de retrodispersión en aluminio, para varias energías. Línea roja: trabajo presente con corrección Nyugen [13]. Línea negra discontinua: trabajo presente con modelo de Bethe-Joy [12]. Puntos azul oscuro: datos experimentales [21]. Puntos lilas: datos experimentales [21]. Puntos azul claro: datos experimentales [21]. Puntos amarillos: datos experimentales [21]. Puntos negros: datos experimentales [21].

En la figura 10 podemos ver la comparación entre los resultados obtenidos y diferentes datos experimentales [21]. Salta a la vista la discrepancia entre algunos datos experimentales [21], lo cual puede deberse a la gran dificultad para obtener resultados experimentales del coeficiente de retrodispersión. Aún así, se puede ver cómo los resultados obtenidos con nuestra simulación encajan bien con los datos experimentales.

Cuando estamos en el rango de energías pequeñas, sí que hay más discrepancia entre los datos experimentales y los resultados de nuestra simulación, aunque la tendencia en general es la misma. La discrepancia con los datos experimentales a bajas energías se debe a que los modelos que hemos utilizado en el trabajo son empíricos y a bajas energías difieren más de la realidad.

Seguidamente procedemos a estudiar los resultados del coeficiente de retrodispersión para agua (figura 11). Se observa que hay un parecido bastante razonable, lo cual nos indica que con bastante seguridad hemos implementado correctamente los modelos en nuestro programa. Al aumentar la energía hasta los 30 keV sí que hay algo de diferencia entre los dos coeficientes de retrodispersión, aunque esta diferencia no es muy grande (0.06 frente a 0.05).

Destacar por último de la figura 11, que para energías iniciales de menos de 1 keV empieza a verse la diferencia entre usar el modelo de Bethe-Joy o la corrección de Nyugen. Se ve como para energías menores incorporar la corrección de Nyugen [13] mejora al modelo de Bethe-Joy



[12] y se acerca más a los datos con los que estamos comparando.

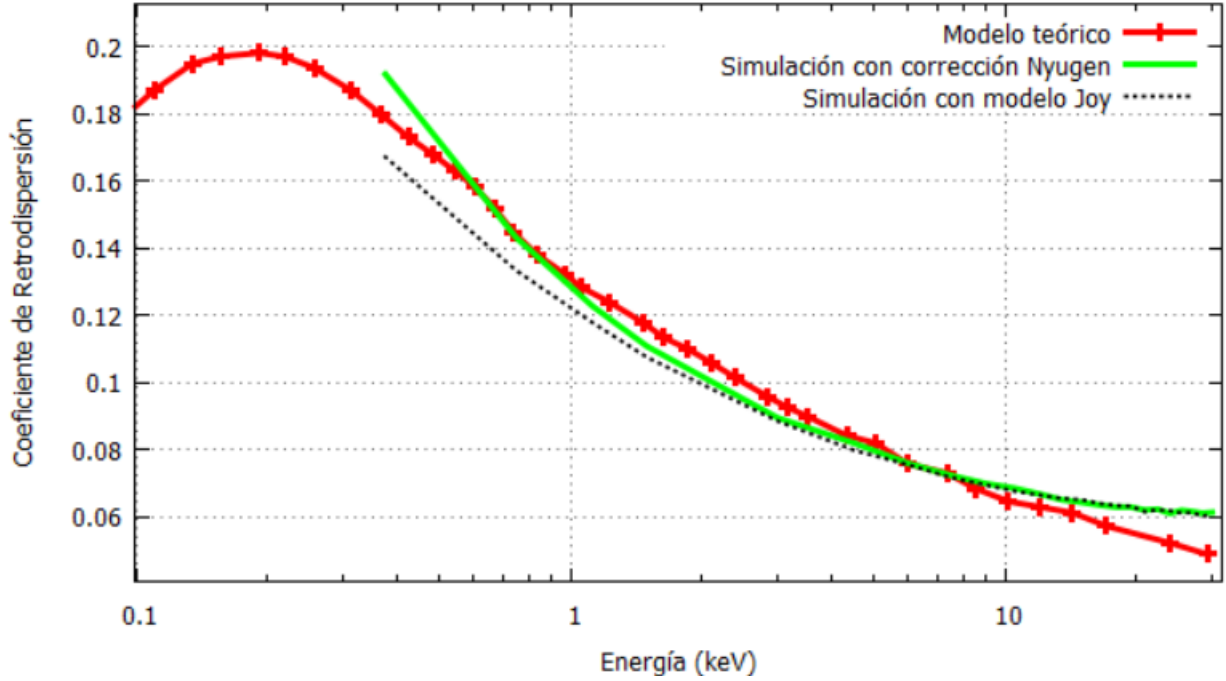


Figura 11: Coeficiente de retrodispersión para agua. Línea con puntos rojos: Modelo teórico [22]. Línea verde: Simulación con corrección de Nyugen [13]. Línea negra discontinua: simulación con corrección de Nyugen [13].

#### 4.1.2. DPK por electrones monoenergéticos

Vamos a estudiar los resultados obtenidos haciendo uso de lo comentado en las secciones 3.3 y 3.3.1. Para complementar los resultados que hemos calculado, vamos a compararlos con distintas simulaciones Montecarlo que se usan hoy en día. Para estos cálculos hemos usado una energía inicial de los electrones  $E_0 = 10$  keV y hemos normalizado el DPK.

La comparación entre los resultados obtenidos y los modelos teóricos podemos verlos en la figura 12. Lo primero a destacar es que los resultados aplicando el modelo de Bethe-Joy [12] y aplicando la corrección de Nyugen [13] son prácticamente idénticos. Este parecido es debido a que la energía inicial de los electrones es de 10 keV, por lo que si acudimos a la figura 10, veremos que a esta energía el poder de frenado es idéntico en ambos casos.

Vemos que a distancias cortas (cuando el electrón aun no ha intercambiado mucha energía con el medio), el DPK es muy parecido entre las otras simulaciones [9] y nuestros resultados. A distancias más grandes (el electrón ya ha intercambiado una cantidad razonable de energía con el medio) empieza a haber un poco de diferencia, pero aún así los resultados parecen adecuarse bastante bien a los modelos teóricos. Esta pequeña discrepancia a distancias de a partir 1.5 micras puede deberse a que el electrón posee una energía más baja y, como hemos comentado

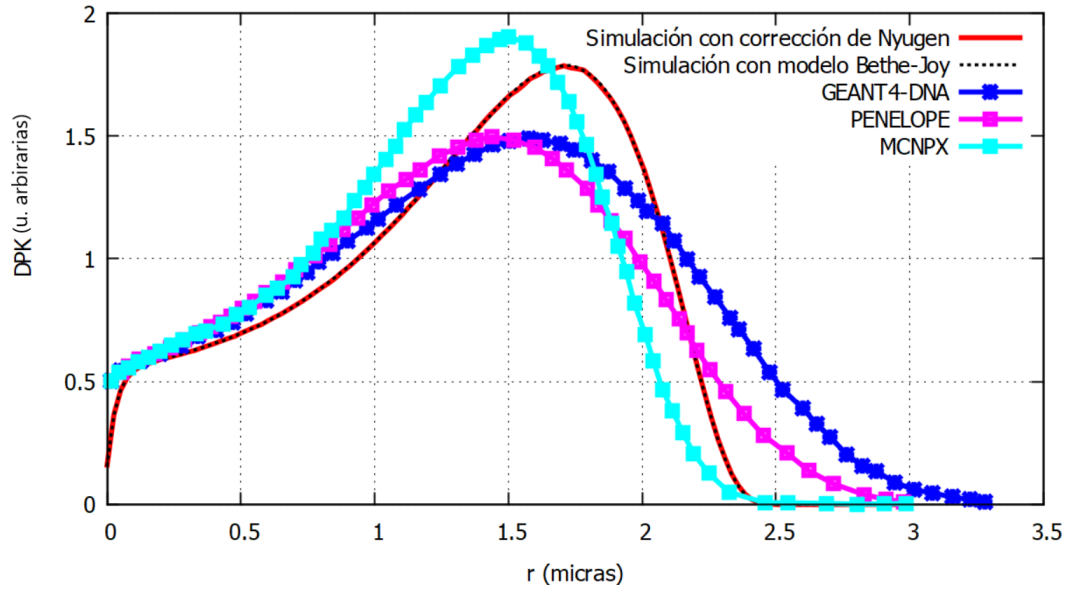


Figura 12: DPK en función de la distancia para energía inicial de 10 keV. Línea roja: trabajo presente con corrección Nyugen [13]. Línea negra discontinua: trabajo presente con modelo de Bethe-Joy [12] . Línea con puntos azul oscuro: simulación GEANT4-DNA [9]. Línea con puntos lila: simulación PENELOPE [9]. Línea con puntos azul claro: simulación MCNPX [9].

antes, los modelos que estamos usando a energías bajas discrepan más de la realidad. Destacar que incluso entre otras simulaciones [9], también existe cierta diferencia entre resultados.

Para terminar esta sección hemos calculado el DPK para una energía inicial de 500 eV (figura 13). Para poder comparar nuestros resultados hemos normalizado estos DPK a la unidad. En este

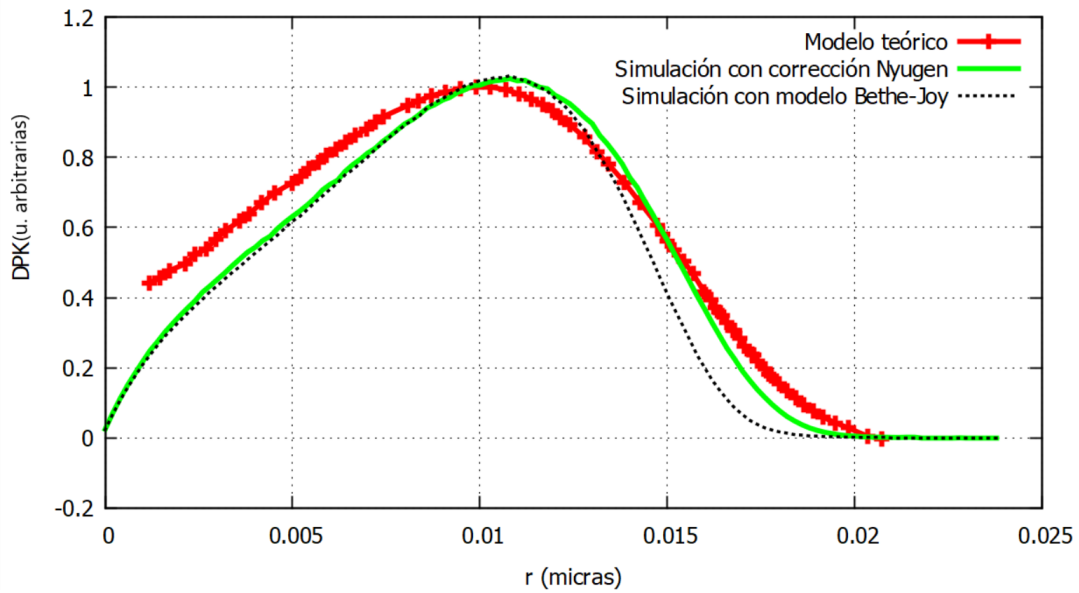


Figura 13: DPK en función de la distancia para una energía inicial de 500 eV. Línea verde: simulación con corrección de Nyugen [13]. Línea negra discontinua: simulación con modelo Bethe-Joy [12]. Línea con puntos rojos: modelo teórico [23].

caso vemos cómo sí que hay diferencia entre utilizar el modelo de Bethe-Joy [12] y la corrección de Nyugen [13], esto se debe a que la energía inicial de los electrones está en el rango de energías en el que hay diferencias significativas entre ellos (figura 10).

La energía depositada a distancias más grandes, es mayor para la corrección de Nyugen [13]. Esto es lo que cabría esperar, ya que dicha corrección da un poder de frenado más bajo, lo que hará que los electrones intercambien menos energía con el medio y recorran distancias mayores antes de ser absorbidos.

## 4.2. Emisión electrónica de isótopos radiactivos de yodo

A lo largo de este apartado vamos a ver y discutir los resultados obtenidos para la cantidad de energía depositada alrededor de un punto de emisión por dos isótopos radiactivos de yodo.

### 4.2.1. Isótopo $^{131}\text{I}$

Como hemos visto en la sección 3.3.2, el  $^{131}\text{I}$  puede emitir electrones por desintegración  $\beta^-$  o por emisiones discretas. La distribución de probabilidad con la que emite electrones este isótopo radiactivo la encontramos en los cuadros 1 y 2. La probabilidad acumulativa en función de la energía la encontramos en las figuras 5 y 6.

Como primer resultado, podemos observar en la figura 14 la cantidad de energía depositada a

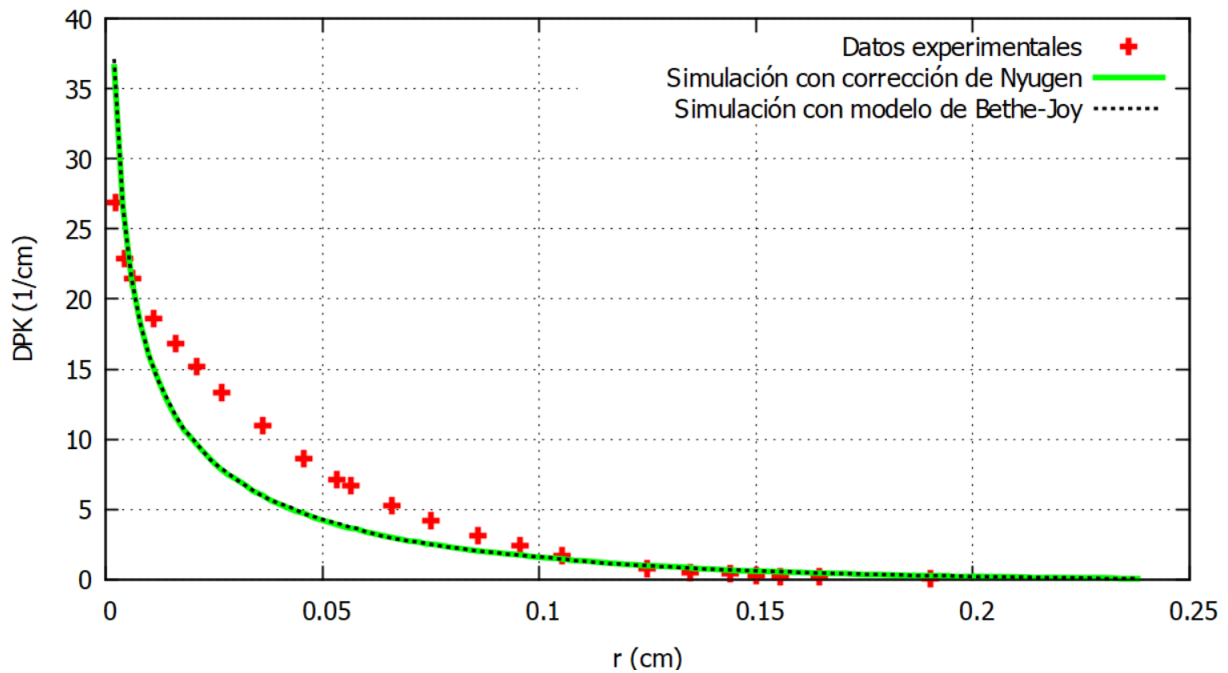


Figura 14: DPK en función de la distancia por emisiones  $\beta^-$  del  $^{131}\text{I}$ . Línea verde: trabajo presente con corrección de Nyugen [13]. Puntos rojos: datos experimentales [24]. Línea negra discontinua: trabajo presente con modelo Bethe-Joy [12].

una distancia  $r$  del punto de emisión de los electrones, teniendo en cuenta sólo desintegraciones tipo  $\beta^-$ . Para este caso particular hemos cogido un  $\delta r = 0.002$  cm.

Se puede observar cómo entre 0 y 0.02 cm los cálculos de nuestra simulación se adecuan bastante bien con los datos experimentales. A partir de 0.08 cm se ve también que los datos experimentales y nuestra simulación muestran los mismos valores para el DPK.

Entre 0.02 y 0.08 cm sí que parece haber una discrepancia entre datos experimentales y nuestras simulaciones, pero la tendencia en general se ve que es la misma a esta escala de distancias. La discrepancia en este rango de energías puede deberse a que no hemos considerado los electrones secundarios. Por último cabe destacar de la figura 14 que los cálculos utilizando el modelo de Bethe-Joy [12] y usando la corrección de Nyugen [13] muestran los mismos resultados, lo cual era de esperar viendo que las energías con las que emite este isótopo son bastante altas. Como ya hemos comentado, la diferencia entre estas dos será significativa a escalas de energía bajas.

Realizando los cálculos teniendo en cuenta los dos tipos de emisiones que se puede producir, construimos la gráfica dada en la figura 15 en escala doblemente logarítmica, para poder ver un rango más amplio de energías y distancias. En este caso hemos simulado utilizando la corrección de Nyugen [13].

Se puede apreciar cómo a distancias más cortas, la cantidad de energía depositada por emi-

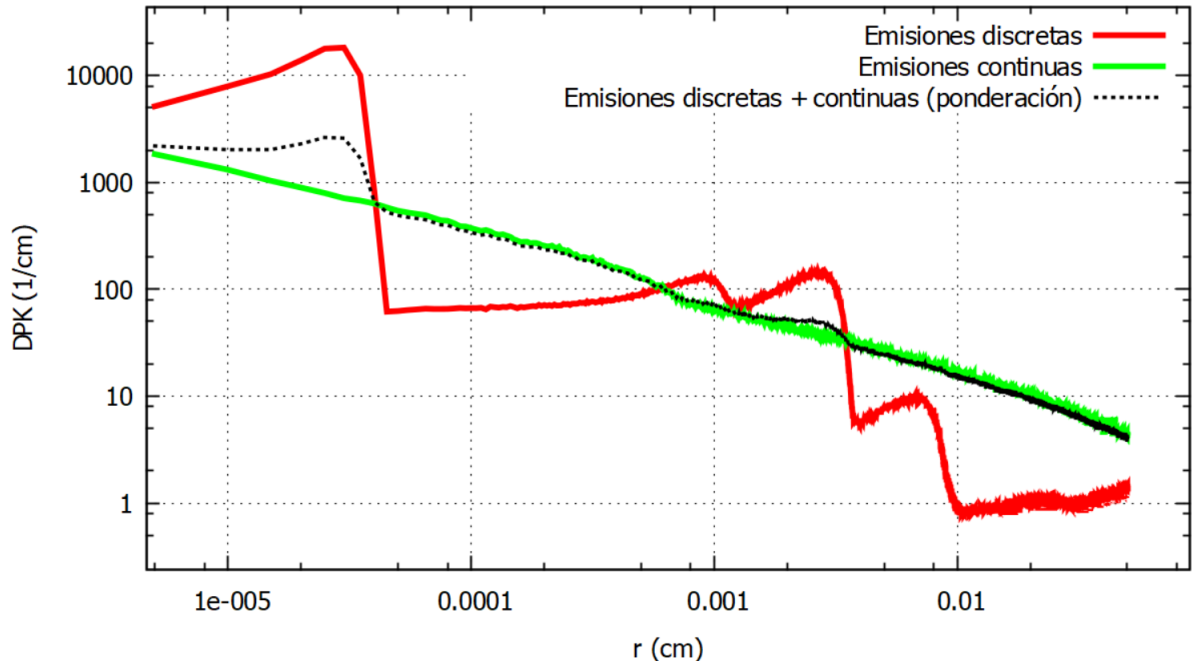


Figura 15: DPK en función de la distancia por emisiones  $\beta^-$  y discretas del  $^{131}\text{I}$ . Línea roja: trabajo presente solo con emisiones discretas. Línea verde: trabajo presente solo con emisiones tipo  $\beta^-$ . Línea negra discontinua: trabajo presente con ponderación entre los dos tipos de emisiones.

siones discretas es bastante más grande que por emisiones tipo  $\beta^-$ . Salta a la vista también que en las emisiones discretas aparecen 'picos' en la cantidad de energía depositada. Esto es debido a que la energía de los electrones al emitirse de forma discreta se almacena de forma discontinua a lo largo del medio.

Estos picos que se producen no son más que una extensión de DPK individuales de cada energía discreta de emisión. Podemos entenderlo como una suma de DPK correspondientes a energías iniciales concretas (figura 12 y 13). Las emisiones por desintegración  $\beta^-$  almacenan energía en función de la distancia de una manera más uniforme, debido al propio hecho de que se emiten electrones en un rango muy grande de energía y de una manera continua. Por lo general, a distancias más pequeñas, la emisión que domina es la discreta; cuando nos vamos a distancias más grandes (a partir de 0.005 cm) es la emisión por desintegración  $\beta^-$  la que domina.

En el contexto de la medicina nuclear, este isótopo radiactivo de yodo suele utilizarse técnicas de radioterapia (tratamiento de tumores) ya que el alcance y poder de penetración de los electrones tienen un rango de distancias bastante amplio.

Por último, cabe destacar que la ponderación entre las dos emisiones es prácticamente constante y muy parecida a la contribución por emisiones continuas, ya que solo se ve realmente modificada a escalas del orden de  $10^{-5}$  cm, cuando la contribución por emisiones discretas es muy grande. Esto se debe a que cuando hay una emisión radiactiva, aproximadamente el 90 % de estas son de tipo  $\beta^-$ .

#### 4.2.2. Isótopo $^{125}\text{I}$

En el caso del  $^{125}\text{I}$  solo hay emisión de forma discreta (cuadro 3). Calculamos la dosis absorbida por unidad de volumen tal como la definimos en la ecuación (27). Podemos observar los resultados en la figura 16.

Se puede apreciar cómo la dosis absorbida varía unos 18 órdenes de magnitud en función de la distancia. A distancias pequeñas (entre 1 y 10 nm) la dosis absorbida por unidad de volumen es muy alta. Conforme aumentamos la distancia se aprecia cómo la dosis decae de una manera muy rápida. Se pueden apreciar de nuevo algunos pequeños hombros que corresponden a las energías discretas de emisión de este isótopo radiactivo.

En cuanto a la comparación entre el modelo teórico y los resultados obtenidos destacar que hemos normalizado las curvas a la unidad en la distancia de 0.1 micras, de manera que las dos curvas tienen unidades arbitrarias. Se ve que entre los rangos de 0.01 y 1 micras, las curvas tienen un parecido bastante razonable en cuanto a forma. Cuando nos alejamos de este rango de distancias, las curvas empiezan a discrepar en orden de magnitud, pero no demasiado en la

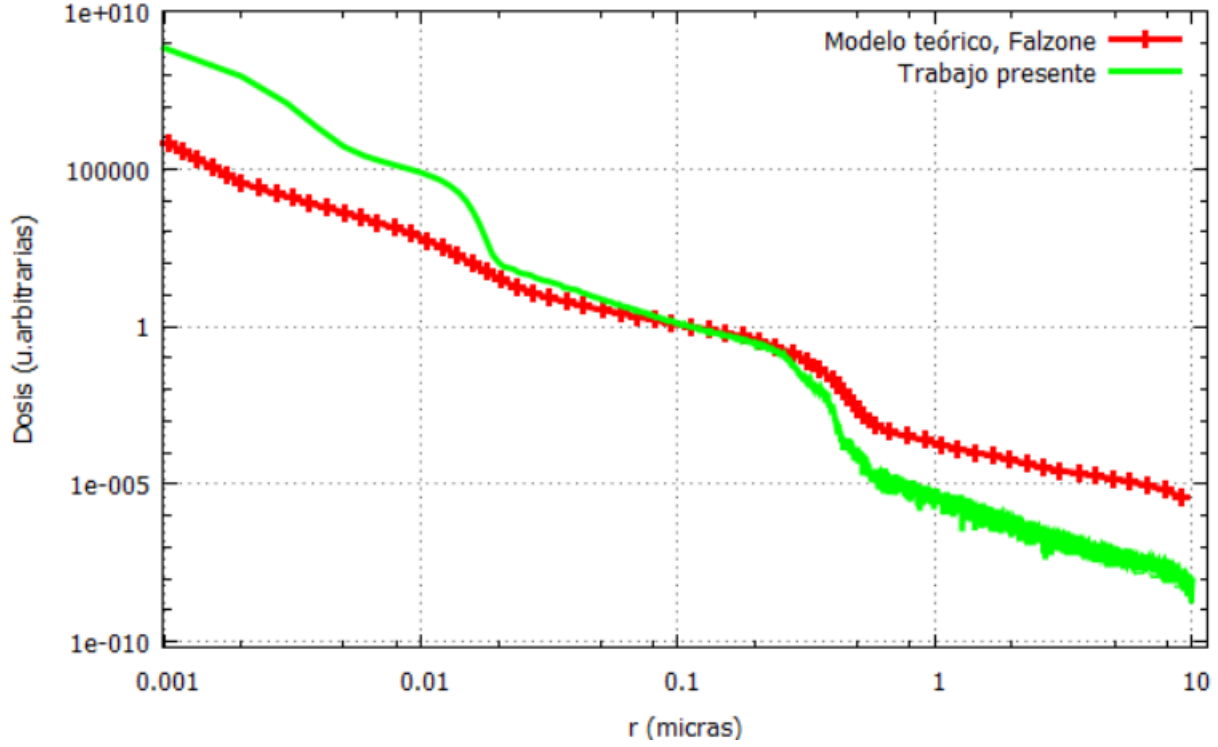


Figura 16: Dosis en función de la distancia por emisiones de  $^{125}\text{I}$ . Línea + puntos rojos: modelo teórico [25]. Línea verde: Trabajo presente con corrección de Nyugen [13]

forma que tienen.

Estas diferencias en el valor de la dosis absorbida se pueden deber a varios factores, como son el hecho de que no hemos considerado en nuestro caso los electrones secundarios (que pueden propagar la energía a distancias mayores), o que simplemente los modelos que estamos utilizando a estas escalas de energía discrepan con los utilizados en la simulación de referencia [25].

Ya comentamos en la sección 3.3.3 que las energías de emisión del  $^{125}\text{I}$  son bastante bajas, por lo que esto puede ser una fuente de error en los cálculos. Aún así, mirando los resultados para este caso, nos podemos hacer una idea cualitativa de la forma en que se distribuye la energía absorbida por unidad de volumen de este isótopo radiactivo.

En este caso las distancias en las que se distribuye la energía alrededor del punto de emisión son bastante más bajas que para el  $^{131}\text{I}$ , por lo que usar este isótopo en el contexto de la medicina nuclear será interesante en técnicas de radioinmunoterapia, ya que el alcance efectivo de la energía emitida por los isótopos es del orden del tamaño del ADN [25]. Introduciendo en el torrente sanguíneo los anticuerpos con el radioisótopo  $^{125}\text{I}$  y haciendo adherirse este a los núcleos de las células cancerígenas, pueden provocar la destrucción del ADN celular y por consiguiente la muerte de estas.

En el caso de que no se produzca la rotura del ADN (ni la muerte de la célula cancerígena), esta técnica tampoco provocaría más daños en el cuerpo. La mayor parte de la energía depositada

se quedaría en el interior de la célula (citoplasma), lo cual no afecta a esta. En consecuencia no tendría efectos secundarios sobre el cuerpo humano. La radioinmunoterapia es por tanto, una técnica avanzada de tratamiento del cáncer que en principio no provoca efectos secundarios sobre el cuerpo humano, más que la muerte de las células cancerígenas.

## 5. Conclusiones y perspectivas futuras

### 5.1. Cumplimiento de objetivos

Los objetivos principales han sido cumplidos.

- Analizar el depósito de energía por dos tipos de emisiones radioactivas: emisión  $\beta^-$  y emisiones discretas. ✓
- Estudiar dos isótopos radiactivos de yodo que decaen de forma diferente:  $^{131}\text{I}$  que decae principalmente por emisión  $\beta^-$  y  $^{125}\text{I}$  que decae por emisión discreta. ✓
- Escribir un código de simulación Montecarlo. ✓

Los objetivos secundarios también han sido cumplidos.

- Calcular el coeficiente de retrodispersión y transmisión de los electrones en aluminio para varias distancias de una lámina. ✓
- Calcular el coeficiente de retrodispersión de los electrones en aluminio para una lámina semi-infinita (muy gruesa) en función de la energía. ✓
- Calcular el coeficiente de retrodispersión de los electrones para el agua en función de la energía. ✓
- Comparar exitosamente estos coeficientes con algunos datos experimentales y otras simulaciones. ✓
- Calcular la cantidad de energía depositada en función de la distancia para electrones con una misma energía inicial. Comparar esto con otros programas de simulación Montecarlo bien establecidos. ✓

Todas las comparaciones que hemos hecho de las simulaciones realizadas en este trabajo con algunos datos experimentales u otras simulaciones que también usa el método de Montecarlo han tenido un resultado satisfactorio en gran medida. Destacar la comparación del DPK para electrones que se emiten en agua con una energía misma energía inicial (figuras 12 y 13) y el DPK para emisiones continuas del isótopo  $^{131}\text{I}$  (figura 14)

### 5.2. Conclusiones

Los objetivos secundarios que surgen de partir de situaciones físicas más sencillas a las que utilizamos para los objetivos principales, nos han servido para realizar una evaluación de nuestras



simulaciones, aparte nos proporcionan datos de forma cuantitativa que a priori son difíciles de conseguir experimentalmente (por ejemplo el coeficiente de retrodispersión).

A partir del cumplimiento de estos objetivos secundarios y modificando poco a poco al situación física de la que partimos (y con ello las ecuaciones de nuestro modelo), hemos conseguido cumplir los objetivos principales de este trabajo.

La cantidad de energía depositada a una determinada distancia del centro de emisión por un isótopo radiactivo depende de la energía con la que se han emitido los electrones. Cada isótopo radiactivo tiene su propia distribución de emisión tanto por desintegración  $\beta^-$  como por emisión discreta. Cuanto mayor sea la energía con la que se emiten los electrones mayor será la distancia a la que se propagan estos, por lo que a mayor distancia se distribuirá la energía en el medio. Cuando en medicina nuclear se quiere tratar tumores a partir aplicando isótopos radiactivos sobre la zona (radioterapia), suele ser más interesante utilizar isótopos radiactivos con emisión por desintegración  $\beta^-$ , como por ejemplo el  $^{131}\text{I}$ . Esto se debe a la manera en la que distribuyen la energía alrededor del punto de emisión. Por el contrario, cuando se quiere hacer uso de otras técnicas como la radioinmunoterapia es más apropiado usar isótopos radiactivos que emiten discretamente, ya que pueden concentrar la dosis en el núcleo celular de las células tumorales.

A partir de un modelo relativamente sencillo, hemos conseguido simular y analizar distintas situaciones físicas que se pueden dar en medicina nuclear. Bajo mi punto de vista este tipo de simulaciones contienen una información de gran importancia, ya que nos hacemos la idea de qué isótopo radiactivo puede ser más útil en el tratamiento del cáncer o de una enfermedad dependiendo de la zona que se necesita tratar o de que tipo de cáncer sea.

En este trabajo no hemos pretendido obtener unos resultados totalmente precisos, ya que eso superaría con creces lo que se puede conseguir en el tiempo de un trabajo de final de grado. Lo que sí hemos querido es con unas herramientas básicas de simulación obtener resultados cualitativos de situaciones físicas bastante complejas. Estos resultados pueden abrirnos el camino de la investigación y pueden hacernos una idea general de como funciona la materia de forma general en estas situaciones.

La simulación por ordenador de una situación física determinada en la cual es difícil de trabajar en el mundo real, es una herramienta de trabajo muy potente la cual debería de ser aplicada con más frecuencia. En nuestro caso particular hemos conseguido llegar a ver cómo se distribuye la energía depositada por emisiones discretas donde la distancia de penetración es pequeña (del orden de unos nm). Sin la posibilidad de simulación por ordenador realmente es muy difícil conocer con tanto detalle todo esto a escalas tan pequeñas.

### 5.3. Continuación y mejora de este trabajo

Una continuación a este trabajo puede ser calcular la cantidad de energía almacenada en función de la distancia para más isótopos radiactivos. Para ello debemos de tener en cuenta el rango de energía en los que los modelos utilizados sean buenas aproximaciones. Si tratamos isótopos que emiten a muy baja o a muy alta energía los modelos tendrán limitaciones y los resultados pueden alejarse de la realidad.

La sección eficaz elástica de Rutherford y la expresión para el poder de frenado de Bethe-Joy son aproximaciones. La mayoría de parámetros restantes se basan en la validez de estas expresiones: si partimos de aproximaciones bastante limitadas llegaremos a resultados poco precisos. Estas dos expresiones no están teniendo en cuenta los efectos relativistas de las partículas, por lo tanto el rango de validez de energía se limita como se puede ver en la figura 10.

Si conseguimos mejorar las aproximaciones de la sección eficaz elástica y del poder de frenado podríamos conseguir un rango más amplio de energías donde los modelos que utilizamos son precisos. Esto nos podría llevar a unos resultados que sean más aproximados a la realidad. Una forma de hacer esto sería incorporando de alguna manera los efectos relativistas de los electrones cuando tienen energías muy altas a ambas expresiones. Conocer el poder de frenado para energías muy bajas (por debajo de 100 eV) también puede ser una mejora importante a este trabajo, ya que podríamos estudiar isótopos radiactivos que emiten electrones con una energía baja.

Otra cosa que se podría mejorar es la consideración de los electrones secundarios, ya que gran parte de la discrepancia de algunos resultados de este trabajo puede deberse a ello. Estos transportan la energía a distancias mayores por lo que el DPK y la dosis se verían afectados notablemente.

Una vía alternativa también bastante interesante podría ser la de estudiar otro tipo de materiales como medio de propagación. Ejemplo de estos materiales serían blancos celulares, tejidos reales, etc.

## Bibliografía

### Referencias

- [1] Gamow G (2005). *Biografía de la física*. (Salvat, D L, Barcelona).
- [2] Kurzon (2014). A mock diagram of the apparatus the Geiger and Marsden used for their famous experiment [Online] Available: [https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/1/1b/geiger-Marsden\\_experiment.svg](https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/1/1b/geiger-Marsden_experiment.svg) [2021,04,04].
- [3] Welsh JS (2007). Beta decay in science and medicine. *American Journal of Clinical Oncology*, **30**:437.
- [4] Leeand B Q, Kibedi T, Stuchbery A E, and Robertson K A (2012). Atomic Radiations in the Decay of Medical Radioisotopes: A Physics Perspective. *Computational and Mathematical Methods in Medicine*, **2012**:14.
- [5] Ku A, Facca VJ, Cai Z, and Reilly R M (2019). Auger electrons for cancer therapy – a review. *EJNMMI Radiopharmacy and Chemistry*, **4**:27.
- [6] Ferrer A (2015). *Física nuclear y de partículas*. 3rd edition. (Servicio de publicaciones Universidad de Valencia, Valencia).
- [7] Sigmund P (2006). *Particle penetration and radiation effects*. (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg).
- [8] Dapor M (2020). *Transport of Energetic Electrons in Solids*, volume **271**. 3rd edition. (Springer Tracts in Modern Physics, Cham-Switzerland).
- [9] Champion C, Incerti S, Perrot Y, Delorme R, Bordage M C, Bardiès M, Mascialino B, Tran H N, Ivanchenko V, Bernal M, Francis Z, Groetz J E, Fromm M, and Campos L (2014). Dose point kernels in liquid water: An intra-comparison between GEANT4-DNA and a variety of Monte Carlo codes. *Applied Radiation and Isotopes*, **83**:137.
- [10] De Vera P (2016). *Charged particle interaction with biological materials: modelling and application to ion beam cancer therapy*. PhD thesis, Universidad de Alicante.
- [11] Williamson W and Duncan G C (1986). Monte Carlo simulation of nonrelativistic electron scattering. *American Journal of Physics*, **54**:262.
- [12] Joy D C (1991). An introduction to Monte Carlo simulations. *Scanning Microscopy*, **5**:329.

- [13] Nguyen-Truong T (2015). Modified Bethe formula for low-energy electron stopping power without fitting parameters. *Ultramicroscopy*, **149**:26.
- [14] Chaoui Z E A (2006). A simplified positron elastic scattering model for Monte Carlo calculations. *Journal of Physics Condensed Matter*, **18**:10303.
- [15] Berger M J , Coursey J S , Zucker M A and Chang J . (2005). ESTAR, PSTAR, and ASTAR: Computer Programs for Calculating Stopping-Power and Range Tables for Electrons, Protons, and Helium Ions (version 1.2.3). [Online] Available: <http://physics.nist.gov/Star> [2021, 05, 03]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
- [16] Eckerman K F, Westfall R J, Ryman J C, and Cristy M (1994). Availability of nuclear decay data in electronic form. *Health Physics*, **4**:338.
- [17] Press W H, Teukolsky S A, Vetterling W T, and Flannery B P (1997). *Numerical Recipes in Fortran 77. The Art of Scientific computing*. 2nd edition. (Cambridge University Press, Cambridge).
- [18] Stabin M G and Da Luz L (2002). Decay data for internal and external dose assessment. *Health Physics*, **83**:471.
- [19] Bousis C (2011). Dosimetry on sub-cellular level for intracellular incorporated Auger-electron-emitting radionuclides. *Radiation Protection Dosimetry*, **143**:33.
- [20] Murata K (1974). Spatial distribution of backscattered electrons in the scanning electron microscope and electron microprobe. *Journal of Applied Physics*, **45**:4110.
- [21] Joy D C (1995). A Database on Electron-Solid Interactions. *Scanning microscopy*, **17**:270.
- [22] Mehnaz, Yang L H, Zou Y B, Da B, Mao S F, Li H M, Zhao Y F, and Ding Z J (2020). A comparative study on Monte Carlo simulations of electron emission from liquid water. *Medical Physics*, **47**:759.
- [23] Bousis C, Emfietzoglou D, Hadjidoukas P, Nikjoo H, and Pathak A (2011). Monte Carlo calculations of low-energy electron dose-point-kernels in water using different stopping power approximations. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, **269**:1650.
- [24] Okigaki S, Ito A, Uchida I, and Tomaru T (1994). Calculation of dose point kernels for five radionuclides used in radio-immunotherapy. *National Laboratory for high energy physics*, **94**:34.

- [25] Falzone N, Lee Q, Fernández-Varea J M, Kartsonaki C, Stuchbery A E, Kibédi T, and Vallis K A (2017). Absorbed dose evaluation of Auger electron-emitting radionuclides: Impact of input decay spectra on dose point kernels and S-values. *Physics in Medicine and Biology*, **62**:2239.