

Simulación en Física: Transporte de electrones y fotones.

Pedro Jesús López Abenza

1. Introducción al problema

En el último proyecto del curso de la asignatura de Simulación en Física iniciamos un estudio de los efectos del transporte de radiación ionizante a través de un cierto material de estudio. Como ya comentamos, el transporte de radiación ionizante y su deposición en un cierto tejido a través del lanzamiento de partículas constituye una de las principales herramientas para la física médica y en especial para el tratamiento de tumores.

Fotones y electrones constituyen los dos elementos básicos de los métodos de la radioterapia actual, que es la principal aplicación del transporte de radiación ionizante. El uso de estos dos tipos de partículas supone incidir sobre las regiones colindantes al tejido que sobre el que en un principio se pretende actuar. Por otro lado, los electrones son especialmente relevantes en aplicaciones como la litografía y el microscopio electrónico. Así, este proyecto final se centrará en la simulación del lanzamiento de fotones y electrones a través de un cierto material.

Siguiendo el procedimiento utilizado en el caso del transporte de neutrones a través de un cierto material, de nuevo trataremos de recurrir a un estudio físico para estudiar la trayectoria seguida por fotones y electrones en su paso a través de la materia. Así pues, se simulará la trayectoria seguida por una única partícula, de modo que nos basaremos en los distintos fenómenos físicos conocidos y en el uso de un elemento probabilístico en base al uso de números aleatorios y el método de Montecarlo con el objetivo de realizar predicciones.

2. Cálculo numérico y simulación

2.1. Simulación numérica del modelo físico para electrones

2.1.1. Introducción

Tal y como se ha comentado, a continuación realizaremos nuestra simulación numérica para el caso de un haz de electrones incidente sobre un cierto material mediante el estudio de la trayectoria seguida por un único electrón. Estos electrones contarán con una energía del orden de 1KeV , de modo que en este rango unos procesos físicos serán mucho más probables que otros y su principal fuerza de interacción con los blancos de nuestro material será del tipo coulombiana.

Hemos de tener en cuenta que los fenómenos físicos que pueden darse sobre nuestro electrón a estudiar son tan variados como la ionización, scattering elástico el efecto Compton (Scattering inelástico), la producción de un par electron-positron ó la radiación de frenado. Sin embargo, dentro del rango de energías citado los fenómenos físicos más destacados serán el de la ionización, que será la principal causa de pérdida de energía del electrón, y la colisión elástica, que será el motivo de los principales cambios de dirección en la trayectoria del electrón.

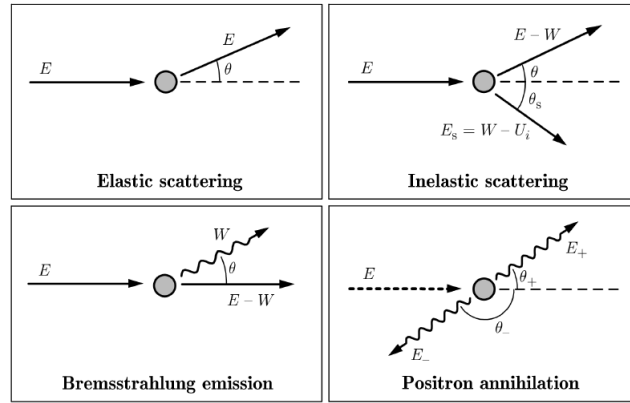


Figura 1: Esquema de los distintos procesos físicos que pueden producirse sobre un electrón.

Así pues, dentro de este problema consideraremos la trayectoria seguida por nuestro electrón singular a través de un material tipo metálico, como puede ser el oro o el aluminio, de modo que los blancos a considerar serán siempre del mismo tipo y no hay que considerar diferentes probabilidades de choque o secciones eficaces.

2.1.2. Algoritmo

De nuevo, al igual que en los otros casos de neutrones y fotones, hemos de considerar que el recorrido seguido por un electrón antes de colisionar con uno de los blancos de la muestra tendrá un carácter probabilístico. De tal modo, tendremos que la distancia recorrida por un electrón antes de cualquier colisión vendrá dada por una expresión del tipo:

$$L = -\lambda \ln(R_\lambda)$$

donde R_λ es un número aleatorio y λ es el recorrido libre medio, el cual podemos expresar del siguiente modo (teniendo en cuenta que las unidades obtenidas son μm):

$$\lambda = 1,02\beta(1 + \beta) \frac{AT^2}{Z(Z + 1)\rho}$$

la cual viene expresada en μm . A su vez, en él encontramos el coeficiente adimensional β , cuya expresión es:

$$\beta = 0,25(1,12 \frac{\lambda_0 \hbar}{p_e})^2 \quad \lambda_0 = \frac{Z^{1/3}}{0,885 \cdot a_0}$$

donde a_0 es el radio de Bohr y p_e es el momento lineal. En este punto hemos de tener en cuenta que no contamos con el momento lineal de la partícula, sino con su energía, por lo que podemos reexpresar el momento lineal de la partícula en función de la energía cinética, puesto que $T = \frac{1}{2}m_e v_e^2 = \frac{1}{2m_e} p_e^2$. De tal modo, tendremos que nuestro coeficiente β viene dado como:

$$\beta = 0,25(1,12 \frac{Z^{1/3}}{0,885 \cdot a_0} \frac{\hbar}{2Tm_e})^2$$

Además, en este caso es necesario destacar que nuestro electrón sufre una pérdida de energía durante el trayecto recorrido, la cual vendrá dada por la fórmula de Bethe que, tal y como se nos indica en el artículo de referencia, es:

$$E_{loss} = -7,83 \cdot (\frac{\rho \cdot Z}{A \cdot T}) \ln(\frac{174 \cdot T}{Z})$$

la cual viene expresada en $KeV/\mu m$ y donde A es el peso atómico de los átomos objetivo en gramos de un mol (i.e. masa atómica), Z es el número atómico, ρ es la densidad de los átomos objetivo y T es la energía cinética de los electrones en KeV.

Además, de nuevo siguiendo la estrategia utilizada en las otras simulaciones, hemos empleado el método de Montecarlo para sortear los ángulos θ y ϕ mediante el uso de dos números aleatorios R_θ y R_ϕ , de modo que tendremos que:

$$\cos(\theta) = 1 - \frac{2\beta R_\theta}{1 + \beta - R_\theta} \quad \phi = 2\pi R_\phi$$

Así pues, en base a los dos ángulos iniciales en el sistema laboratorio, θ_n y ϕ_n , y los ángulos de scattering sorteados, θ y ϕ , podemos calcular los nuevos ángulos del sistema laboratorio θ_{n+1} y ϕ_{n+1} mediante las expresiones:

$$\cos(\theta_{n+1}) = \cos(\theta_n) \cos(\theta) + \sin(\theta_n) \sin(\theta) \cos(\phi) \quad \tan(\phi_{n+1} - \phi_n) = \frac{\sin(\theta_n) \sin(\theta) \sin(\phi)}{\cos(\theta) - \cos(\theta_n) \cos(\theta_{n+1})}$$

Así, podemos obtener las nuevas coordenadas de nuestro sistema, las cuales vendrán dadas por las expresiones:

$$\begin{cases} x = x_0 + L \cdot \sin(\theta_{n+1}) \cos(\phi_{n+1}) \\ x = x_0 + L \cdot \sin(\theta_{n+1}) \sin(\phi_{n+1}) \\ z = z_0 + L \cdot \cos(\theta_{n+1}) \end{cases}$$

2.1.3. Resultados

Aplicando el algoritmo anteriormente indicado a través del programa `transpart-elect-pjla.f` podemos calcular la trayectoria seguida por nuestros electrones al penetrar una cierta muestra. Ante la brevedad de tiempo para realizar la práctica se ha optado por realizarla para el caso de materiales monoatómicos, como es el caso de una muestra metálica de oro o de aluminio, cuyas características como la densidad, peso atómico y número atómico nos son conocidas.

★ Comenzando con el caso del oro, se ha simulado el lanzamiento de una serie de proyectiles que serán nuestros electrones. De tal modo, a continuación se muestra la trayectoria tridimensional obtenida para un conjunto de 15 electrones en función de la energía inicial a considerar, la cual hemos elegido con el valor máximo posible considerado en el artículo de referencia, que es 30KeV.

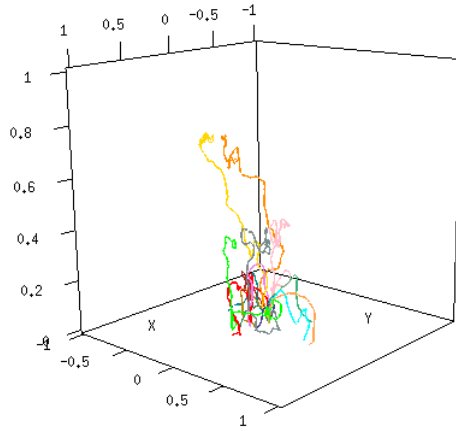


Figura 2: Representación gráfica de las trayectorias en el espacio de $N_{elect} = 15$ de los electrones lanzados contra una muestra de oro para una energía inicial de 30KeV.

Asímismo, podemos representar la proyección de las distintas trayectorias en los planos XY, XZ e YZ para los casos citados:

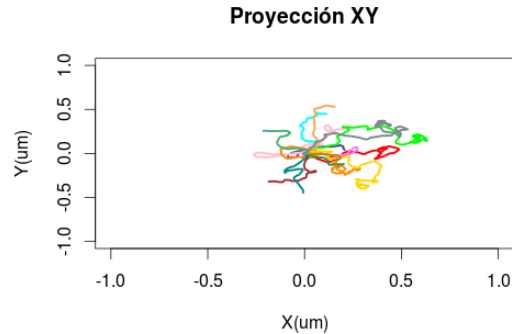


Figura 3: Representación gráfica de la proyección en el plano XY de las trayectorias de $N_{elect} = 15$ de los electrones lanzados contra una muestra de oro para una energía inicial de 30KeV.

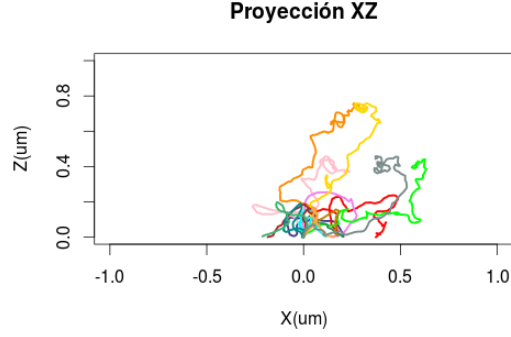


Figura 4: Representación gráfica de la proyección en el plano XZ de las trayectorias de $N_{elect} = 15$ de los electrones lanzados contra una muestra de oro para una energía inicial de 30KeV.

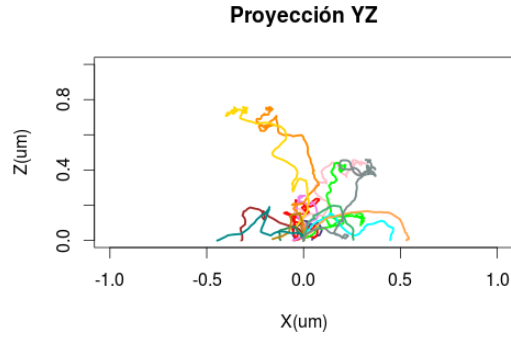


Figura 5: Representación gráfica de la proyección en el plano YZ de las trayectorias de $N_{elect} = 15$ de los electrones lanzados contra una muestra de oro para una energía inicial de 30KeV.

★ Continuando con la misma idea, podemos representar los datos obtenidos para las trayectorias y sus proyecciones para el caso del lanzamiento de una serie de electrones sobre una muestra de aluminio. De tal modo, para este caso hemos elegido un valor inicial de la energía de 20KeV. Así, a continuación se muestra la trayectoria tridimensional obtenida para un conjunto de 15 electrones:

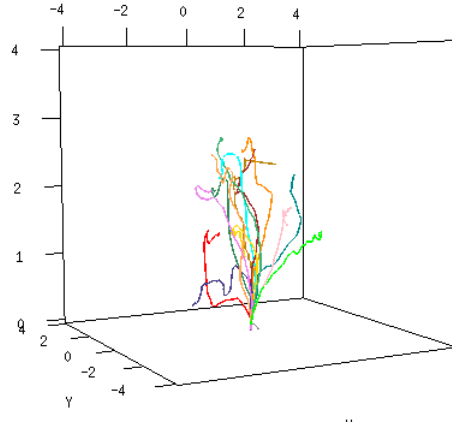


Figura 6: Representación gráfica de las trayectorias en el espacio de $N_{elect} = 15$ de los electrones lanzados contra una muestra de aluminio para una energía inicial de 20KeV.

Asímismo, podemos representar la proyección de las distintas trayectorias en los planos XY, XZ e YZ para los casos citados:

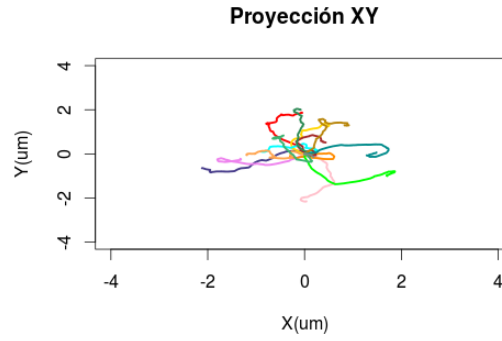


Figura 7: Representación gráfica de la proyección en el plano XY de las trayectorias de $N_{elect} = 15$ de los electrones lanzados contra una muestra de aluminio para una energía inicial de 20KeV.

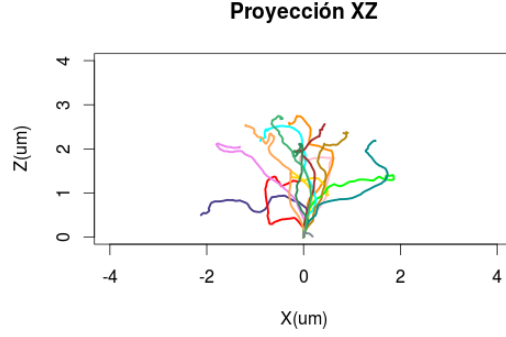


Figura 8: Representación gráfica de la proyección en el plano XZ de las trayectorias de $N_{elect} = 15$ de los electrones lanzados contra una muestra de aluminio para una energía inicial de 20KeV.

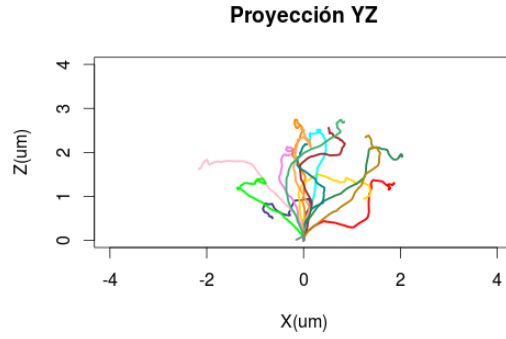


Figura 9: Representación gráfica de la proyección en el plano YZ de las trayectorias de $N_{elect} = 15$ de los electrones lanzados contra una muestra de aluminio para una energía inicial de 20KeV.

De igual modo que en el caso de los neutrones, es posible estudiar varias magnitudes características del transporte de partículas como son las probabilidad de transmisión o la probabilidad de absorción de un electrón (i.e. la probabilidad de que dicho electrón quede sin energía para una cierta distancia). Así pues, mediante el programa `transprop-elect-pjla.f` hemos lanzado un total de $N = 100000$ proyectiles y promediado los valores obtenidos en función de la distancia.

A continuación se muestran los resultados obtenidos para el caso de electrones de una energía de 30KeV que inciden sobre una lámina de oro:

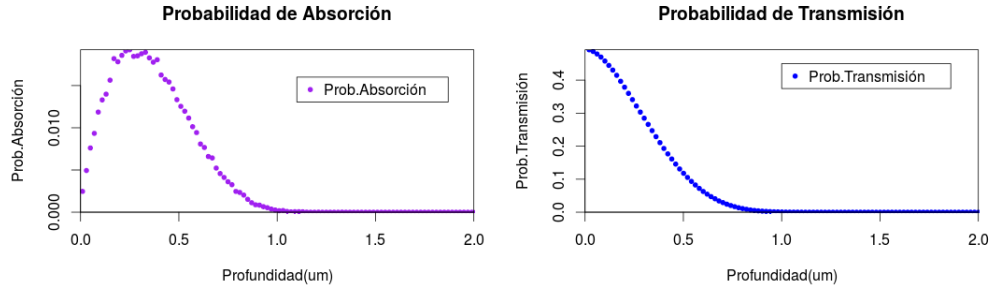


Figura 10: Representación gráfica de de los electrones lanzados contra una muestra de oro para una energía inicial de 30KeV.

Podemos hacer lo propio con electrones con la misma energía y inciden sobre una lámina de aluminio, de modo que los resultados obtenidos son los siguientes:

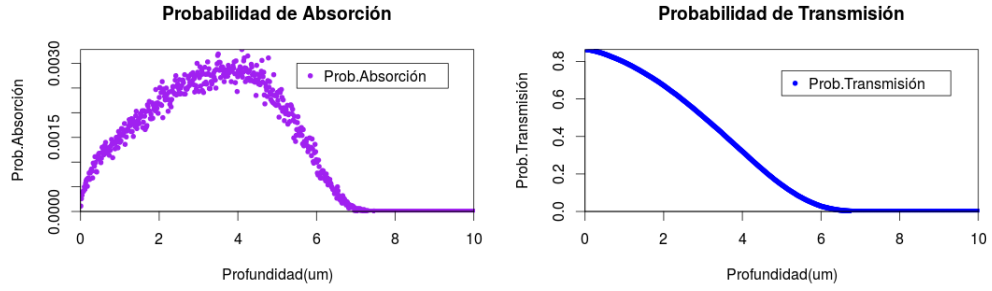


Figura 11: Representación gráfica de de los electrones lanzados contra una muestra de aluminio para una energía inicial de 30KeV.

Vemos como el aluminio presenta una mejor predisposición a dejar pasar electrones para valores reducidos de la profundidad, de modo que la probabilidad de transmisión máxima en dicho caso es el doble que en el caso del oro. Además, vemos como la probabilidad de absorción es mayor en el oro y que, además, en dicho caso presenta un pico mucho mejor definido que en el caso del aluminio.

2.2. Simulación numérica del modelo físico para fotones

2.2.1. Introducción

Siguiendo el procedimiento seguido para electrones, realizaremos nuestra simulación numérica para el caso de rayos γ mediante el estudio de la trayectoria seguida por un único fotón a través de un material de estudio. Hemos de señalar que contaremos con fotones con una energía del orden de 1MeV , pues es en este rango de valores de la energía en el que se sitúa la fuentes de radiación γ .

Para ello se tendrán en cuenta los distintos fenómenos físicos que pueden afectar a nuestro fotón singular de estudio, como son el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton (Scattering inelástico), la producción de un par electron-positron ó la dispersión de Rayleigh (Scattering elástico). Asimismo, en realidad se debería de tener en cuenta otras interacciones del tipo fotonuclear, pero en este proyecto se despreciarán.

Como resulta evidente, la dispersión de Rayleigh o scattering elástico entre un fotón y un átomo es muy poco probable, mientras que puede comprobarse que la energía de Threshold para la producción de un par electron-positron requiere una energía superior a 1MeV . Por tanto, despreciaremos estos dos procesos. Así pues, los dos principales procesos a considerar son el efecto Compton o scattering inelástico, el cual es el fenómeno dominante, y el efecto fotoeléctrico, el cual es algo reducido en nuestro rango de energías en comparación a otros de menor valor, pero es lo suficientemente importante como para ser estudiado. Cabe destacar que tanto en los procesos de efecto Compton como en los de efecto fotoeléctrico la energía cinética de los fotones es transferida a los electrones atómicos, los cuales consiguen escapar de la atracción nuclear, quedando libre en el material aunque con un recorrido muy limitado.

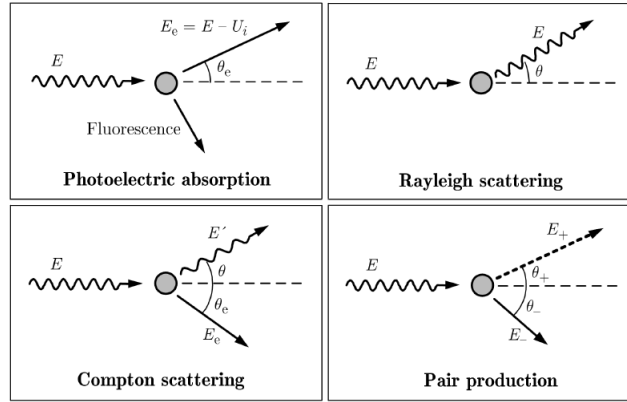


Figura 12: Esquema de los distintos procesos físicos que pueden producirse sobre un fotón.

2.2.2. Algoritmo

En este problema hemos de considerar un fotón incidente con una energía E_0 y unos ángulos iniciales en el sistema laboratorio, θ_n y ϕ_n , de modo que podemos a partir de ello definir la distancia recorrida antes de verse afectado por uno de los procesos físicos anteriormente citados.

Esta distancia tendrá un carácter probabilístico, de modo que contará con una expresión del tipo:

$$L = -\frac{1}{n\sigma} \ln(R_L) \quad n = \frac{\rho}{m}$$

donde vemos como el factor n es el cociente entre densidad y masa atómica del material definido.

Así pues, nuestro problema reside en definir los valores de las sección eficaz, σ , la cual no será más que la sección eficaz total. Esta vendrá dada por la suma de las secciones eficaces asociadas a los procesos de colisión inelástica y efecto fotoeléctrico:

$$\sigma = \sigma_{Photoelectric} + \sigma_{Scattering}$$

En este punto, tenemos dos secciones eficaces a estudiar. Comenzando por la asociada a la sección eficaz asociada a dispersión de Compton podemos señalar que esta es resultado del producto del número atómico de los núcleos de nuestro material de estudio por la conocida como sección eficaz de Klein-Nishina, cuya expresión es

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

De modo que tendremos que $\sigma_{Scattering} = Z \cdot \sigma_{KN}$. Así, puesto que conocida γ podemos conocer σ_{KN} , esta sección eficaz es conocida para todas las situaciones.

En lo que se refiere a la sección eficaz asociada al efecto fotoeléctrico hemos de destacar que para esta no contamos con una relación analítica, sino con una relación en la que los distintos factores dependen del producto del número atómico de los núcleos por la constante de estructura fina, αZ , de modo que nuestra expresión será del tipo:

$$\sigma_{Photoelectric} = \Phi \left(b_0 + \frac{b_1}{\gamma} + \frac{b_2}{\gamma^2} \right) f(\alpha Z) \quad \Phi = 4\pi r_e^2 \frac{Z}{\gamma} (\alpha Z)^4$$

Y contamos con una tabla de datos con los valores de las constantes b_0 , b_1 , b_2 y $f(\alpha Z)$ en función del valor del producto l número atómico de los núcleos por la constante de estructura fina, αZ . Por tanto, podemos obtener el valor de estos factores para nuestro problema a tratar mediante una simple extrapolación para el valor del producto αZ correspondiente.

Por tanto, una vez ya conocida las secciones eficaces asociadas a cada proceso físico a considerar y total y conocido el número de núcleos por volumen, es posible determinar la distancia recorrida por nuestro fotón antes de sufrir uno de los procesos señalados. Además, cabe destacar que dichas secciones eficaces nos permitirán determinar la probabilidad de que suceda un fenómeno u otro. Es decir, es posible, mediante la generación de un número aleatorio, sortear si tendrá lugar una proceso de dispersión o de efecto fotoeléctrico.

Así pues, para el caso de una colisión inelástica (efecto Compton) es posible calcular la energía del fotón dispersado haciendo uso de teoría de colisiones de partículas físicas (tal y como se pudo estudiar durant el curso de Física Nuclear y de Partículas del grado). Así pues, tenemos que la energía resultante de un fotón de energía inicial E_0 y que dispersado es:

$$E = \frac{E_0}{1 + \gamma(1 - \cos(\theta))} \quad \gamma = \frac{E_0}{m \cdot c^2}$$

Así pues, podemos utilizar el método de Montecarlo para sortear los ángulos θ y ϕ mediante el uso de números aleatorios. Sin embargo, aunque el método directo sí que es aplicable al caso del ángulo ϕ , el cual va de 0 a 2π , pero no ocurre lo mismo para el caso del ángulo θ , cuya distribución es más compleja. Para el ángulo θ tendremos que, dado un número aleatorio R_ϕ , dicho ángulo vendrá como:

$$\phi = 2\pi R_\phi$$

Sin embargo, para el caso del ángulo θ se hace necesario aplicar algún método que continúe estando ligado al método de Montecarlo pero que sea válido de acuerdo a la distribución asociada al mismo, la cual será:

$$p(\theta)d\theta = 2\pi \sin(\theta) \frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} d\theta$$

donde $\frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega}$ es la expresión de la sección eficaz de Klein-Nishima por ángulo sólido:

$$\frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \frac{1 + \cos(\theta)^2 + \frac{\gamma^2(1 - \cos(\theta))^2}{[1 + \gamma(1 - \cos(\theta))]} }{[1 + \gamma(1 - \cos(\theta))]^2}$$

El método elegido ha sido el método de aceptación-rechazo. Para aplicarlo hemos de considerar que conocemos los valores mínimos de θ , los cuales serán $\theta_{inf} = 0$ y $\theta_{sup} = \pi$, y de la distribución asociada. Aunque sabemos que el valor mínimo de la distribución es 0, el valor máximo será más difícil de conocer. Sin embargo, puesto que nos hallamos en el rango de energías entre 1MeV y 0.01MeV, podemos ver mediante una representación gráfica de la distribución que el valor de θ para el que la distribución es máxima es 0.5 para $E = 1MeV$ y 0.9 para $E = 0,01MeV$ y que si nos movemos dentro de este rango el crecimiento apreciado es prácticamente equiespaciado. Por tanto, mediante una simple extrapolación podemos calcular el valor del máximo de la distribución para el valor de la energía a considerar.

De tal modo, contaremos con una región rectangular sobre el que aplicar el método de Montecarlo. Así, el procedimiento para aplicar el método de aceptación-rechazo será muy sencillo y consistirá en sortear dos números aleatorios R_x y R_y y a partir de ellos calcular la pareja de puntos (x,y) donde ambos están distribuidos uniformemente del modo:

$$x = \pi \cdot R_x \quad y = h \cdot R_y$$

donde h es el valor máximo de la distribución $P(\theta)$ según el valor de la energía del fotón, E.

Así, nuestro criterio para considerar que un punto aleatorio x es válido consistirá en comprobar si su pareja aleatoria y tiene un valor menor que el valor de la distribución $P(\theta)$ evaluada en x. Así, si esto sucede podemos decir que la pareja aleatoria (x,y) está debajo de la curva de la distribución y, por tanto, es válida.

Así pues, en base a los dos ángulos iniciales en el sistema laboratorio, θ_n y ϕ_n , y los ángulos de scattering sorteados, θ y ϕ , podemos calcular los nuevos ángulos del sistema laboratorio θ_{n+1} y ϕ_{n+1} mediante las expresiones:

$$\cos(\theta_{n+1}) = \cos(\theta_n) \cos(\theta) + \sin(\theta_n) \sin(\theta) \cos(\phi) \quad \cos(\phi_{n+1} - \phi_n) = \frac{\cos(\theta) - \cos(\theta_n) \cos(\theta_{n+1})}{\sin(\theta_n) \sin(\theta_{n+1})}$$

Así, podemos obtener las nuevas coordenadas de nuestro sistema, las cuales vendrán dadas por las expresiones:

$$\begin{cases} x = x_0 + L \cdot \sin(\theta_{n+1}) \cos(\phi_{n+1}) \\ x = x_0 + L \cdot \sin(\theta_{n+1}) \sin(\phi_{n+1}) \\ z = z_0 + L \cdot \cos(\theta_{n+1}) \end{cases}$$

2.2.3. Resultados

De nuevo podemos aplicar algoritmo explicado para calcular la trayectoria seguida por nuestros fotones al penetrar una cierta muestra, que de nuevo será de carácter monoatómico, como es el caso de una muestra metálica de oro o de aluminio, cuyas características como la densidad, peso atómico y número atómico nos son conocidas. Nos centraremos en el caso del oro, de modo que los resultados obtenidos son fácilmente repetibles para el caso del aluminio.

Así pues, es posible realizar con nuestro programa transpart-fot-pjla.f el lanzamiento de una serie de fotones contra nuestra muestra y se ha simulado en base a una combinación de elementos físicos y aleatorio la trayectoria que estos fotones seguirán en el material. De tal modo, a continuación se muestra la trayectoria tridimensional obtenida para un conjunto de 30 fotones para el caso de una energía del haz de rayos γ máxima (i.e. 1 MeV).

Sin embargo, debido a un problema en el programa (véase archivo .f) que no ha podido ser descifrado aún, no ha sido posible obtener resultados satisfactorios. El problema probablemente se deba al cálculo de las secciones eficaces ya que el efecto fotoeléctrico parece mucho más probable de lo que en realidad debería y el proceso cesa antes de lo esperado. Probablemente se deba a algo relacionado con las unidades utilizadas.

3. Conclusiones

En conclusión, en este proyecto hemos proseguido con nuestro estudio del transporte de partículas en materiales. En concreto nos hemos centrado en el caso de electrones y fotones. Así pues, hemos realizado un análisis numérico en el cual hemos considerado una muestra material de carácter monoatómico, como por ejemplo el oro o el aluminio.

Por tanto, hemos tenido en cuenta los procesos físicos más probables y hemos analizado las pérdidas de energía que estas partículas sufren (ya sea durante su avance, como ocurre con los electrones, o durante los propios procesos físicos, como ocurre). Así, hemos podido comprobar como nuestro movimiento de electrones se encuentra en un rango muy reducido dentro de la muestra, puesto que el avance viene dado en μm y hemos podido apreciar como en este caso existe incluso la posibilidad de que nuestra partícula pueda retroceder y salir de la muestra por la cara sobre la que incidió.

Por su parte, en lo que a fotones se refiere hemos podido comprobar como estas partículas sufren una colisión inelástica de tipo efecto Compton con los electrones de los átomos de manera que su dirección de movimiento se ve alterada. Sin embargo, también hemos podido apreciar como siempre existe una posibilidad de que el avance de la partícula cese instantáneamente debido a la probabilidad de que éste se vea involucrado en un proceso de tipo fotoeléctrico, la cual vendrá caracterizada por la sección eficaz de los distintos procesos. Hemos tenido grandes problemas simulando esta parte del problema.