

Simulación en Física: Transporte de partículas.

Pedro Jesús López Abenza

1. Introducción al problema

El estudio de los efectos del transporte de radiación ionizante a través de la materia tiene una gran importancia práctica dentro de diversos ámbitos de la ciencia, siendo la radioterapia uno de los principales, dado que consiste en eliminar tumores cancerosos mediante radiación, de modo que conocer de forma precisa cómo se produce la deposición de energía mediante un haz de partículas a medida que penetra en un material biológico resulta primordial. El objetivo de la radioterapia es depositar el máximo de energía posible en la zona del tumor y el mínimo de energía en las regiones sanas colindantes.

Sin embargo, los métodos de la radioterapia actual se basan en el uso de haces de fotones y electrones de modo que para aplicar la suficiente energía en un tumor se hace inevitablemente necesario incidir con dicha radiación sobre las regiones colindantes. Así, las zonas precedentes y posteriores al tumor se ven afectadas, en especial estas últimas. De tal modo, conseguir aplicar neutrones en esta práctica sería un importante avance respecto a los métodos actuales, puesto que sabemos que en este caso las zonas colindantes no se verían afectadas.

Para analizar todo este problema transporte de radiación ionizante es necesario recurrir a un estudio inicial físico, consistente en la interacción de una partícula ionizada con un átomo aislado y así establecer leyes físicas. Por tanto, podemos hacer un tratamiento del problema en base a la física que conocemos y el uso de números aleatorios, utilizando elementos como la dispersión de Rutherford o el método de Montecarlo.

Así pues, en este proyecto vamos a estudiar el transporte de un haz colimado de neutrones a través de un cierto material. De acuerdo a lo señalado anteriormente, en nuestro estudio introductorio consideraremos que las partículas incidentes sobre el material son neutrones en lugar de electrones o fotones. Además, cabe destacar que, como primera aproximación, se considerará que la sección eficaz que describe su interacción con el blanco es independiente de la energía. Por tanto, veremos cómo, al penetrar en la materia, los neutrones interaccionan con los átomos de la misma, de forma que se ven redireccionados y su energía se ve disminuida.

2. Cálculo numérico y simulación

2.1. Simulación numérica del modelo físico

Como se ha comentado anteriormente, en este proyecto vamos a simular el lanzamiento de un haz colimado de neutrones sobre un material compuesto por una combinación de moléculas (de alta importancia en cualquier material biológico) como son el Hidrógeno, el Oxígeno, el Carbono y el Nitrógeno. Así pues, contaremos con la sección eficaz de cada una de ellas que nos permitirán definir la sección eficaz total del material en su interacción con los neutrones y cuál es la distancia de avance de nuestro neutrón hasta colisionar con una partícula del material.

De tal modo, incidiremos con neutrones con una energía inicial de $100keV$, de modo que estos penetrarán el material e irán interaccionando aleatoriamente con los distintos tipos de átomos que componen el material (aunque es claro que habrá más posibilidades de interaccionar con unos que con otros), de forma que su energía se irá reduciendo hasta llegar a los $3eV$, donde hemos decidido que se pararán.

Una vez ha interaccionado con uno de los átomos de material, hemos de determinar cuál es la dirección resultante tras la dispersión de modo que se determinarán aleatoriamente los ángulos del sistema de referencia centro de masas formado por el neutrón y la partícula con la que ha interaccionado, mientras que el resto de ellos quedan determinados a partir de ellos en base a consideraciones físicas y geométricas. Sin embargo, puesto que lo que nos interesa es conocer la nueva dirección en el sistema laboratorio, es necesario hacer un paso a dicho sistema (lo cual requiere un paso previo al sistema propio al movimiento del proyectil) para lo cual hacemos uso de diversas relaciones geométricas entre nuestros ángulos originales y los nuevos.

Dicho algoritmo está contenido en el programa transpart-pjla.f, de modo que, como una primera aproximación al problema, se ha procedido al lanzamiento de $N_{neut} = 15$ proyectiles. Por tanto, a continuación se muestran la representación gráfica de las trayectorias descritas por nuestros neutrones, así como sus proyecciones en los distintos planos del espacio:

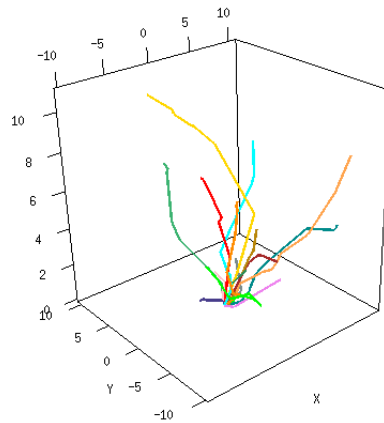


Figura 1: Representación gráfica de las trayectorias en el espacio de $N_{neut} = 15$ de los neutrones lanzados contra nuestro material.

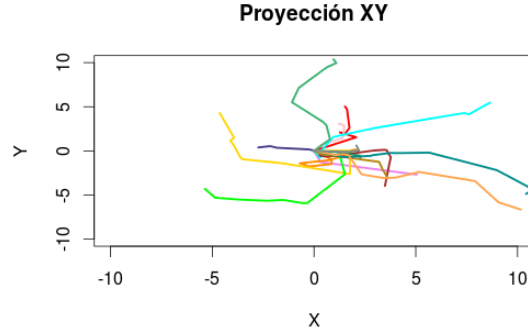


Figura 2: Representación gráfica de la proyección en el plano XY de las trayectorias de $N_{neut} = 15$ de los neutrones lanzados contra nuestro material.

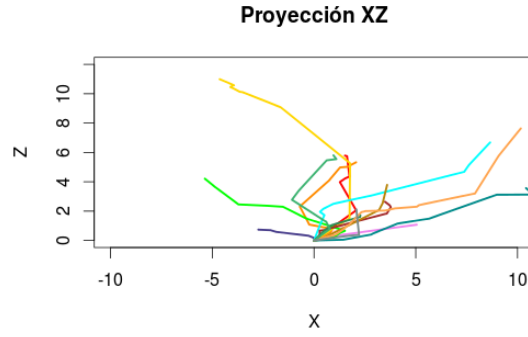


Figura 3: Representación gráfica de la proyección en el plano XZ de las trayectorias de $N_{neut} = 15$ de los neutrones lanzados contra nuestro material.

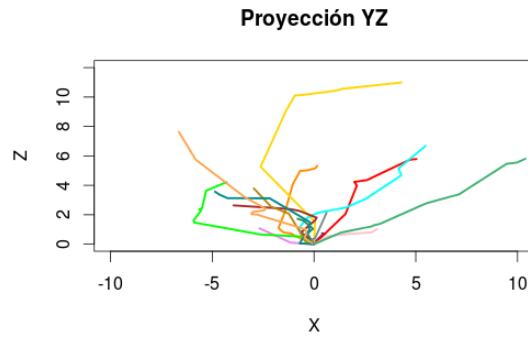


Figura 4: Representación gráfica de la proyección en el plano YZ de las trayectorias de $N_{neut} = 15$ de los neutrones lanzados contra nuestro material.

Adicionalmente, podemos realizar otros cálculos, como, por ejemplo, la probabilidad de transmisión de un neutrón, tal y como se realiza en el programa `transpart-prop-pjla.f`. Para ello, lanzamos un total $N_{neut} = 1000000$ de neutrones y calculamos su posición de máxima distancia alcanzada en el eje Z de cada partícula, de forma que en base a ello estudiamos si dicho neutrón penetraría en una muestra de una cierta profundidad.

De tal modo, a continuación se muestra la representación gráfica de la probabilidad de transmisión en función de la profundidad de la muestra de material biológico:

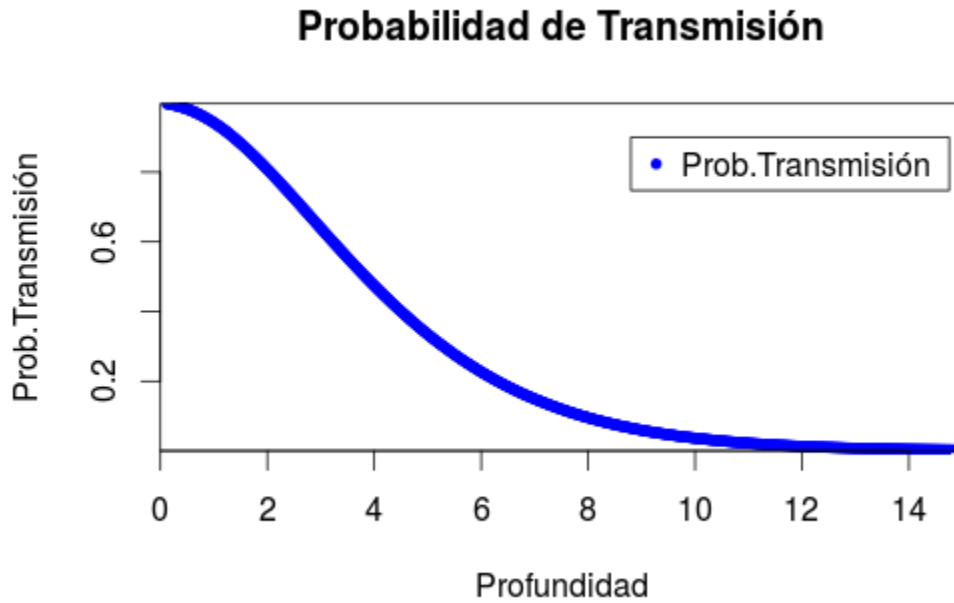


Figura 5: Probabilidad de transmisión en función de la profundidad de la muestra de material utilizada.

Vemos como para profundidades muy pequeñas tenemos una probabilidad total de que los neutrones penetren en la muestra pero, a medida que aumenta la profundidad del material, disminuyen, hasta que finalmente la probabilidad de transmisión se hace nula.

Asímismo, podemos estudiar la probabilidad de frenado de los neutrones en el interior del material en función de la profundidad. Es decir, se estudiará a que distancias suelen detenerse los neutrones que hemos lanzado, para lo cual utilizaremos el mismo programa. De tal modo, a continuación se muestra la representación gráfica de la probabilidad de absorción en función de la profundidad de la muestra de material biológico:

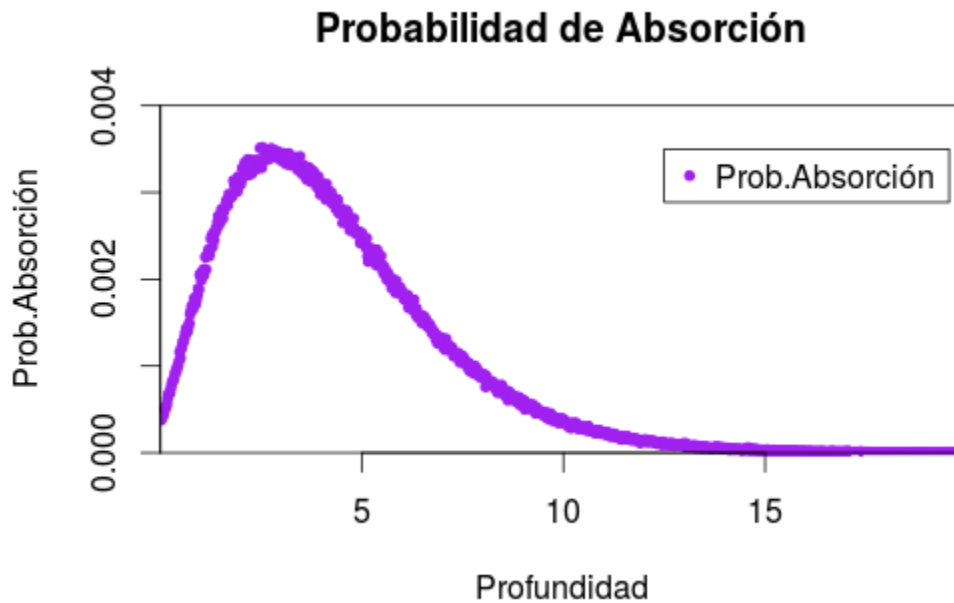


Figura 6: Probabilidad de absorción en función de la profundidad de la muestra de material utilizada.

Vemos como apreciamos un máximo para el número de neutrones frenados para un valor cercano a los 2.5 m de profundidad. Además, cabe destacar que la probabilidad de absorción es muchísimo menor en cualquier punto que la probabilidad de transmisión, pues como vemos dicho máximo nos indica una probabilidad del orden de la tercera cifra decimal.

Del mismo modo, podemos calcular la energía depositada por los neutrones en el material en función de la profundidad de la muestra, para lo cual hemos de utilizar el mismo programa. Así pues, a continuación se muestra la representación gráfica de la energía depositada en función de la profundidad de la muestra de material biológico:

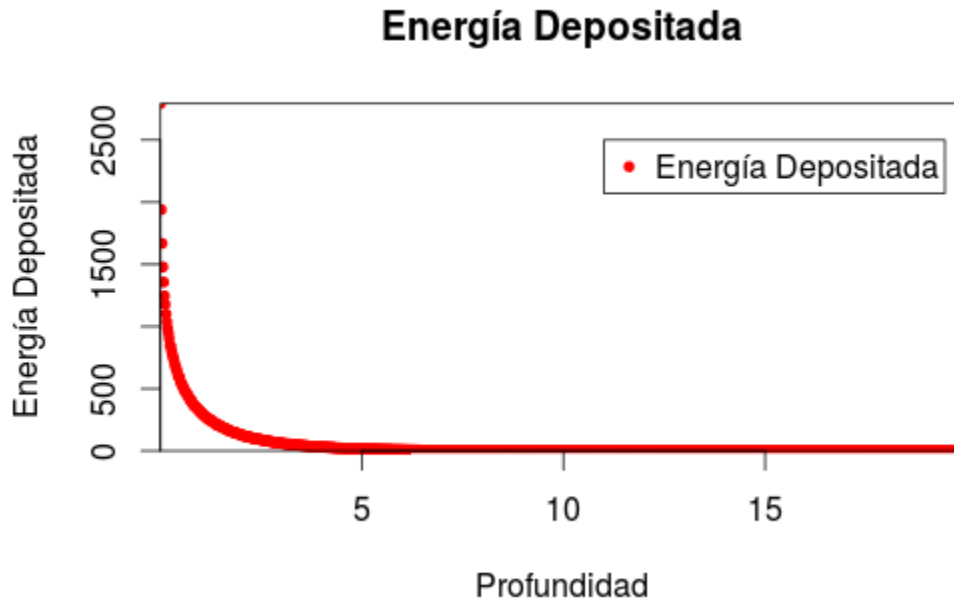


Figura 7: Energía depositada en función de la profundidad de la muestra de material utilizada.

Vemos como esta es muy elevada a cortas distancias pero rápidamente se hace nula. Ello tiene sentido, puesto que el número de neutrones es menor a medida que mayor que consideramos una distancia mayor. Además, los neutrones que alcancen las distancias más elevadas habrán perdido una mayor energía durante las distintas colisiones que haya sufrido con los núcleos del material considerado, de modo que la distancia que depositan es cada vez menor (pues como sabemos la energía depositada es proporcional a la energía con la que viaja el neutrón).

3. Conclusiones

En resumen, en este proyecto hemos conseguido realizar la simulación numérica del problema del transporte de un haz colimado de neutrones en un cierto material. Así pues, hemos podido estudiar la trayectoria en el espacio del movimiento de un neutrón en un material biológico, así como estudiar cómo varía la penetración de los neutrones en función de la profundidad de la muestra de material utilizada. Del mismo modo, también hemos sido capaces de estudiar cómo se produce la deposición de energía en el material por parte de los neutrones.