

# EL MÉTODO MONTE CARLO EN LA FÍSICA MÉDICA: UNA BREVE DESCRIPCIÓN DEL TRANSPORTE DE RADIACIÓN EN SISTEMAS BIOLÓGICOS Y APLICACIONES

*Mauro Valente*<sup>†\*</sup>

† CONICET & Universidad Nacional de Córdoba; Argentina  
Centro de Física e Ingeniería en Medicina, Universidad de La Frontera, Chile

Escuela Andina de Física - ESANFI, Tacna 2016



Universidad Nacional Jorge Basadre Grohmann  
Tacna, Perú

---

\*Contacto e-mail: [valente@famaf.unc.edu.ar](mailto:valente@famaf.unc.edu.ar) || [mauro.valente@unc.edu.ar](mailto:mauro.valente@unc.edu.ar) || [mauro.valente@ufrontera.cl](mailto:mauro.valente@ufrontera.cl)

## Prefacio

El presente trabajo *El Método Monte Carlo en la Física Médica: una breve descripción del transporte de radiación en sistemas biológicos y aplicaciones* es un compendio original de notas elaborado por Mauro Valente en 2016, para ser utilizado como material de estudio y referencia para el curso de especialización en el marco de la Escuela Andina de Física edición 2016 en Tacna, Perú.

El contenido del presente libro de notas está dedicado a formalismos y metodologías para el área específica de física médica orientado a exponer conceptos básicos sobre interacción de la radiación con la materia y de las diferentes áreas de la física médica. Se pretende lograr un primer acercamiento a las temáticas de las diferentes áreas de física médica, con énfasis en la técnica Monte Carlo aplicada a este área.

Es un trabajo con exposición de fundamentos teóricos, prácticos y experimentales para aplicación destinados a ejercitar los contenidos formales en situaciones prácticas de interés para la física médica.

El contenido incluye breves repasos sobre elementos básicos interacción de radiación con la materia, tanto a nivel atómico como nuclear incorporando descripciones de procesos físicos y modelos de algunos mecanismos de interacción de interés para el ámbito de la física médica, como interacción de fotones, electrones, protones, iones más pesados y neutrones con material biológico. La modalidad de la exposición está enfocada en el estudio y caracterización de los efectos de la interacción de la radiación con material biológico.

## **Programa y contenido**

### **MÓDULO I: Interacción de la radiación ionizante con medios materiales**

1. Introducción a la estructura atómica y concepto de sección eficaz.
2. Interacción de fotones con la materia.
3. Interacción de las partículas cargadas con la materia.
4. Radiación fluorescente: rayos X característicos y electrones Auger.
5. Interacción de los neutrones con la materia.

### **MÓDULO II: Medida de la radiación**

1. Magnitudes y unidades.
2. Definiciones básicas: Kerma, dosis absorbida, Exposición.
3. Teoría de la Cavidad de Bragg-Gray.
4. Equilibrio electrónico.
5. Descripción física y precisión de los sistemas de medición y cálculo: derivación de incertezas.

### **MÓDULO III: Simulaciones Monte Carlo**

1. Procesos estocásticos.
2. Variables aleatorias.
3. Principios de simulación Monte Carlo.
4. Códigos FLUKA y PENELOPE.

### **MÓDULO IV: Ejemplos de aplicación del método Monte Carlo en física médica**

1. Teleterapia convencional.
2. Radiología.
3. Medicina nuclear.
4. Radioterapia avanzada y dosimetría no-convencional.

**BIBLIOGRAFÍA BÁSICA SUGERIDA**

1. F. Kahn. *The physics of the radiation therapy* 3th ed, Lippincott Williams & Wil, 2003.
2. G. Knoll. *Radiation detection and measurements* 3rd ed, John Wiley & Sons, 1999.
3. S. Cherry et al. *Physics in nuclear medicine* 3th ed, Saunders, 2003
4. F. Salvat et al. *PENELOPE, an algorithm and computing code for Monte Carlo simulation of electron photon showers* Ed. NEA, 2003.
5. F. Attix. *Introduction to radiological physics and radiation dosimetry* Ed. John Wiley and Sons, 1986.
6. M. Valente *Física nuclear con aplicaciones* Notas del curso de especialidad en FaMAF 2008. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/valente>)
7. M. Valente *Elementos de cálculo dosimétrico para hadronterapia y campos mixtos* Notas del curso de posgrado en FaMAF 2010-2011-2012. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/valente>)
8. M. Valente y P. Perez. *Dosimetría y radiobiología* Notas para curso de grado, Universidad de Catamarca., 2011. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/valente>)
9. M. Valente. *Física de la Radioterapia* Notas para curso de posgrado universidad de la Frontera, Chile 2009-2010-2011-2012. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/valente>)

# Índice

<b>1.. Módulo I: Interacción de la radiación ionizante con medios materiales</b>	<b>8</b>
1.1.. Introducción a la estructura atómica . . . . .	8
1.1.1.. Clasificación de las radiaciones ionizantes . . . . .	8
1.1.2.. Estructura atómica . . . . .	9
1.1.3.. Descripción de la interacción entre radiación incidente y un átomo en reposo	11
1.2.. Sección eficaz: Introducción . . . . .	13
1.3.. Conceptos básicos sobre interacción de fotones con la materia . . . . .	14
1.3.1.. Efecto Fotoeléctrico . . . . .	15
1.3.2.. Scattering coherente o Rayleigh . . . . .	16
1.3.3.. Scattering incoherente o Compton . . . . .	20
1.3.4.. Producción de pares electrón-positrón . . . . .	23
1.3.5.. Reacciones fotonucleares . . . . .	24
1.4.. Coeficiente de atenuación: Introducción . . . . .	24
1.5.. Coeficiente de atenuación másico para compuestos . . . . .	25
1.6.. Introducción a la interacción de las partículas cargadas con la materia . . . . .	25
1.6.1.. Scattering elástico de electrones y positrones . . . . .	26
1.6.2.. Scattering inelástico de electrones y positrones . . . . .	27
1.6.3.. Scattering inelástico de iones positivos “vestidos” . . . . .	31
1.6.4.. Emisión de radiación de frenado o Bremsstrahlung . . . . .	31
1.6.5.. Aniquilación $e^+e^-$ . . . . .	33
1.6.6.. Scattering elástico múltiple de electrones y positrones . . . . .	33
1.6.7.. Scattering inelástico múltiple de electrones y positrones . . . . .	36
1.7.. Radiación fluorescente: rayos X característicos y electrones Auger . . . . .	43
1.8.. Interacción de los neutrones con la materia: Conceptos básicos . . . . .	46
<b>2.. Módulo II: Medidas de radiación</b>	<b>51</b>
2.1.. Transporte de radiación e interacciones . . . . .	51
2.2.. Magnitudes y unidades . . . . .	54
2.3.. Definiciones de transporte y dosimétricas básicas . . . . .	54
2.3.1.. Fluencia y tasa de fluencia de fotones, Kerma y exposición . . . . .	54
2.4.. Teoría de la Cavidad de Bragg-Gray . . . . .	56
2.5.. Equilibrio electrónico . . . . .	58
2.6.. Dosis en aire y dosis en medio material . . . . .	58
2.6.1.. Propagación de fluencia: inverso de cuadrado . . . . .	60
<b>3.. Módulo III: Simulaciones Monte Carlo</b>	<b>62</b>
3.1.. Introducción a procesos estocásticos . . . . .	62
3.1.1.. Procesos de estado discreto y cadenas de Markov . . . . .	63
3.1.2.. Procesos de saltos puros . . . . .	64
3.1.3.. Procesos de estados continuos y series temporales . . . . .	64
3.2.. Procesos estocásticos estacionarios . . . . .	64
3.3.. Características y medidas de procesos estocásticos . . . . .	65
3.4.. Técnicas de simulación Monte Carlo . . . . .	65
3.5.. Eficiencia del método Monte Carlo . . . . .	66
3.5.1.. Ejemplos de aplicación . . . . .	67
3.5.2.. Ejemplo: Cálculo-estimación del número $\pi$ por medio de técnicas Monte Carlo	71
3.6.. Códigos FLUKA y PENELOPE . . . . .	72

<b>4.. Módulo IV: Ejemplos de aplicación del método Monte Carlo en física médica</b>	<b>77</b>
4.1.. Teleterapia convencional . . . . .	77
4.2.. Radiología . . . . .	77
4.3.. Medicina nuclear . . . . .	77
4.4.. Radioterapia avanzada y dosimetría no-convencional . . . . .	77

# **MÓDULO I**

## **Interacción de la radiación ionizante con medios materiales**

---

## 1.. Módulo I: Interacción de la radiación ionizante con medios materiales

El *Capítulo 1.* está destinado a presentar un breve resumen sobre las interacciones que las radiaciones ionizantes experimentan al atravesar medios materiales. Se repasa brevemente la estructura atómica y el concepto de sección eficaz. También se expone un tratamiento para la interacción de fotones, partículas cargadas y neutrones con la materia. En el caso de las partículas cargadas, se consideran tanto una descripción microscópica de los procesos de colisión como otra basada en teorías de dispersión múltiple.

### 1.1.. Introducción a la estructura atómica

Se busca describir las interacciones que las radiaciones ionizantes experimentan al atravesar medios materiales. Se presenta un breve repaso de la estructura atómica y del concepto de sección eficaz. Luego, se estudian los mecanismos de interacción de fotones, partículas cargadas y neutrones con la materia. En el caso de las partículas cargadas, se presentan descripciones microscópicas de los procesos de colisión así como teorías de *scattering* (dispersión) múltiple.

Se denominan radiaciones ionizantes aquellas que son capaces de liberar electrones ligados en orbitales atómicos o moleculares, para lo que se requieren energías superiores a unos 10 eV, aproximadamente. En el caso de electrones, positrones y fotones, se restringe el tratamiento a energías entre decenas de eV y centenares de MeV, mientras que para partículas cargadas pesadas se considera el rango energético específico entre decenas de keV/u y centenares de MeV/u. Estos intervalos cubren holgadamente las energías empleadas típicamente en física médica, tanto en diagnóstico como en terapia.

Se estudiará la propagación e interacción de radiación ionizante con medios materiales constituidos por un número de átomos o moléculas por unidad de volumen ( $N$ ) igual a:

$$N = \frac{N_{Av}\rho}{A_w} \quad (1)$$

donde  $N_{Av}$  es el número de Avogadro,  $\rho$  la densidad másica y  $A_w$  se obtiene de la masa atómica o molar ( $A$ ):  $A_w = Am_u N_{Av}$ , para  $m_u$  tal que:  $m_u N_{Av} \equiv 1 \text{ g mol}^{-1}$ . Así, las fórmulas quedan escritas en el sistema CGS, como es habitual en física atómica. Sin embargo, para realizar los cálculos es conveniente emplear el sistema de unidades atómicas<sup>1</sup>,

#### 1.1.1.. Clasificación de las radiaciones ionizantes

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

A la radiación constituida por partículas cargadas se la califica como directamente ionizante, mientras que se denomina indirectamente ionizante a radiación de partículas neutras. La motivación, como se verá, está relacionada con el hecho de que la carga eléctrica determina el modo en que la radiación interacciona con la materia.

<sup>1</sup>Las unidades atómicas se definen tomando:  $q_e = m_e = \hbar = 1$ .



partículas neutras	{	fotones $x, \gamma$ neutrones												
partículas cargadas	{	<table style="border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="padding-right: 10px;">ligeras (<math>M = m_e</math>)</td> <td style="font-size: 2em; vertical-align: middle;">{</td> <td style="padding-left: 10px;"><math>e^-, e^+</math></td> </tr> <tr> <td style="padding-right: 10px;">pesadas (<math>M \gg m_e</math>)</td> <td style="font-size: 2em; vertical-align: middle;">{</td> <td style="padding-left: 10px;"> <table style="border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="padding-right: 10px;">iones ligeros</td> <td style="padding-left: 10px;"><math>H, \dots, Ne</math></td> </tr> <tr> <td style="padding-right: 10px;">iones pesados</td> <td style="padding-left: 10px;"><math>Na, \dots, \text{fragmentos de fisión}</math></td> </tr> <tr> <td style="padding-right: 10px;">“exóticas”</td> <td style="padding-left: 10px;"><math>\mu^\pm, \pi^\pm, \bar{p}, \dots</math></td> </tr> </table> </td> </tr> </table>	ligeras ( $M = m_e$ )	{	$e^-, e^+$	pesadas ( $M \gg m_e$ )	{	<table style="border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="padding-right: 10px;">iones ligeros</td> <td style="padding-left: 10px;"><math>H, \dots, Ne</math></td> </tr> <tr> <td style="padding-right: 10px;">iones pesados</td> <td style="padding-left: 10px;"><math>Na, \dots, \text{fragmentos de fisión}</math></td> </tr> <tr> <td style="padding-right: 10px;">“exóticas”</td> <td style="padding-left: 10px;"><math>\mu^\pm, \pi^\pm, \bar{p}, \dots</math></td> </tr> </table>	iones ligeros	$H, \dots, Ne$	iones pesados	$Na, \dots, \text{fragmentos de fisión}$	“exóticas”	$\mu^\pm, \pi^\pm, \bar{p}, \dots$
ligeras ( $M = m_e$ )	{	$e^-, e^+$												
pesadas ( $M \gg m_e$ )	{	<table style="border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="padding-right: 10px;">iones ligeros</td> <td style="padding-left: 10px;"><math>H, \dots, Ne</math></td> </tr> <tr> <td style="padding-right: 10px;">iones pesados</td> <td style="padding-left: 10px;"><math>Na, \dots, \text{fragmentos de fisión}</math></td> </tr> <tr> <td style="padding-right: 10px;">“exóticas”</td> <td style="padding-left: 10px;"><math>\mu^\pm, \pi^\pm, \bar{p}, \dots</math></td> </tr> </table>	iones ligeros	$H, \dots, Ne$	iones pesados	$Na, \dots, \text{fragmentos de fisión}$	“exóticas”	$\mu^\pm, \pi^\pm, \bar{p}, \dots$						
iones ligeros	$H, \dots, Ne$													
iones pesados	$Na, \dots, \text{fragmentos de fisión}$													
“exóticas”	$\mu^\pm, \pi^\pm, \bar{p}, \dots$													

Figura 1. Cuadro de clasificación de radiaciones ionizantes.

### 1.1.2.. Estructura atómica

Los procesos a nivel atómico y subatómico se rigen por las leyes de la mecánica cuántica. Considérese una partícula no-relativista de masa  $M$  que se mueve en un potencial central  $V(r)$ . La ecuación de movimiento (Schrödinger) independiente del tiempo, para valor de energía  $\epsilon$  es:

$$\left[ \frac{\vec{p}^2}{2M} + V(r) \right] \Psi(\vec{r}) = \epsilon \Psi(\vec{r}) \quad (2)$$

Por tanto, se ve que la función de onda de la partícula ( $\Psi(\vec{r})$ ) factoriza como sigue:

$$\Psi_{\epsilon, \ell, m_\ell}(\vec{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_{\ell, m_\ell}(\vec{r}) \quad (3)$$

donde  $u$  son las funciones radiales y  $Y_{\ell, m_\ell}$  los armónicos esféricos.

Las funciones radiales  $u$  pueden determinarse analíticamente en el caso de potencial de Coulomb, pero en general se requiere resolver:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r) \right] u(r) = \epsilon u(r) \quad (4)$$

Si el potencial es atractivo, la ecuación 4 admite soluciones con autovalores  $\epsilon_{n, \ell}$  negativos discretos ( $n$  es el número cuántico principal), que representan estados ligados. Las correspondientes funciones radiales reducidas  $u_{n, \ell}(r)$  están normalizadas a la unidad:

$$\int_{\mathfrak{R}^+} u_{n, \ell}^2(r) dr = 1 \quad (5)$$

Por otra parte, la ecuación de Schrödinger radial también posee soluciones con autovalores positivos, los que describen partículas libres con energía cinética no-relativista  $\epsilon = \frac{1}{2} M v^2$  (espectro continuo). La normalización de las funciones del continuo  $u_{\epsilon, \ell}(r)$  es arbitraria. Además, las  $u_{\epsilon, \ell}(r)$  presentan un comportamiento asintótico del tipo:

$$u_{\epsilon, \ell} \sim \sin \left( kr - \ell \frac{\pi}{2} - \eta \ln(2kr) + \delta_\ell(k) \right) [r \rightarrow \infty] \quad (6)$$

donde  $k \equiv \sqrt{\frac{2M\epsilon}{\hbar^2}}$  es el número de onda y  $\delta_\ell$  el defasaje.  $\eta \equiv \frac{Z_\infty q_e^2}{\hbar v}$  es el “parámetro de Sommerfeld” para  $Z_\infty$  tal que:  $V(r) \rightarrow \frac{-Z_\infty q_e^2}{r}$ . Para potenciales de corto alcance se toma  $Z_\infty = 0$ , mientras

que  $Z_\infty \neq 0$  para hacer el caso de iones. En el caso particular  $V(r) = 0$  se tiene  $\eta = 0$  y  $\delta_\ell = 0 \forall \ell$ , por lo tanto se reduce al caso de ondas planas viajeras:

$$\psi(\vec{r}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (7)$$

En el tratamiento cuántico-relativista, la ecuación de Schrödinger debe sustituirse por la ecuación de Klein-Gordon si la partícula tiene spin 0 o la ecuación de Dirac si su espín es  $1/2$ . La ecuación de Dirac independiente del tiempo es:

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

donde  $\vec{\alpha}$  y  $\beta$  son las matrices de Dirac. Los autovalores y funciones de onda radiales reducidas se denominan según el número cuántico de momento angular relativista  $\kappa \equiv (\ell - j)(2j + 1)$  para  $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ . Las soluciones a esta ecuación pueden encontrarse en literatura especializada<sup>2</sup>

Considérese un conjunto de  $N$  electrones (masa  $m_e$ , carga  $-q_e$ ) de un átomo de número atómico  $Z$ . La función de onda atómica  $\Psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N)$  refiere a las "variables de estado" de cada uno de los electrones constituyentes ( $\zeta_j$ ) satisface la ecuación de onda independiente del tiempo:

$$\mathbf{H}_A(\zeta_1, \dots, \zeta_N) \Psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) = E\Psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) \quad (9)$$

donde  $\mathbf{H}_A$  es el Hamiltoniano atómico y contiene, además de las energías cinéticas (no-relativistas) de los electrones constituyentes, las energías potenciales electrostáticas atractivas electrón-núcleo y repulsivas electrón-electrón:

$$\mathbf{H}_A = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} + \sum_{i=1}^N \left( \frac{-Zq_e^2}{r_i} \right) + \sum_{j<i}^N \frac{q_e^2}{r_{ji}} \quad (10)$$

Es conocido que la ecuación 9 con el Hamiltoniano definido según la expresión 10 no tiene solución exacta, y por tanto es necesario recurrir a aproximaciones para simplificarla. Por ejemplo, en el modelo de electrones independientes en un campo central se supone que todos los electrones se mueven en un potencial atómico promedio o efectivo  $V_{ef}(r)$ , elegido de modo que sea una buena aproximación a los potenciales electrostáticos de la ecuación 10. Luego:

$$\mathbf{H}_A = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} + V_{ef}(r_j) \right] \quad (11)$$

O, la formulación correspondiente en el límite relativista:

$$\mathbf{H}_A = \sum_{i=1}^N \left[ c\vec{\alpha}_j \cdot \vec{p}_j + (\beta_j - 1)m_e c^2 + V(r_j) \right] \quad (12)$$

En este escenario, los potenciales autoconsistentes de tipo Hartree-Fock-Slater o Dirac-Hartree-Fock-Slater constituyen un punto de partida útil para resolver el problema. Al haber reemplazado el Hamiltoniano original por otro aproximado pero separable, la función de onda atómica se escribirá como un determinante de Slater construido con  $N$  orbitales de spin monoparticulares  $\psi_j$ ,  $j = 1, \dots, N$ .

<sup>2</sup>No hace al contenido del presente curso.

$$\Psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{bmatrix} \Psi_1(\zeta_1) & \cdots & \Psi_1(\zeta_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_N(\zeta_1) & \cdots & \Psi_N(\zeta_N) \end{bmatrix} \quad (13)$$

Por lo tanto, se ve que  $\Psi$  es una función de onda antisimétrica, como corresponde a un sistema de fermiones.

El hecho de que las funciones de onda atómicas se expresen como determinantes de Slater simplifica en gran medida la evaluación (analítica o numérica) de elementos de matriz. La Figura 2 muestra la energía de ligadura experimental  $U_{nK}$  de las capas  $K$ ,  $L1 - L3$  y  $M1 - M5$  de los átomos neutros. Una peculiaridad interesante de los potenciales autoconsistentes tipo Dirac-Hartree-Fock-Slater es que:  $|\varepsilon_{n,K}| \approx U_{n,K}$ .

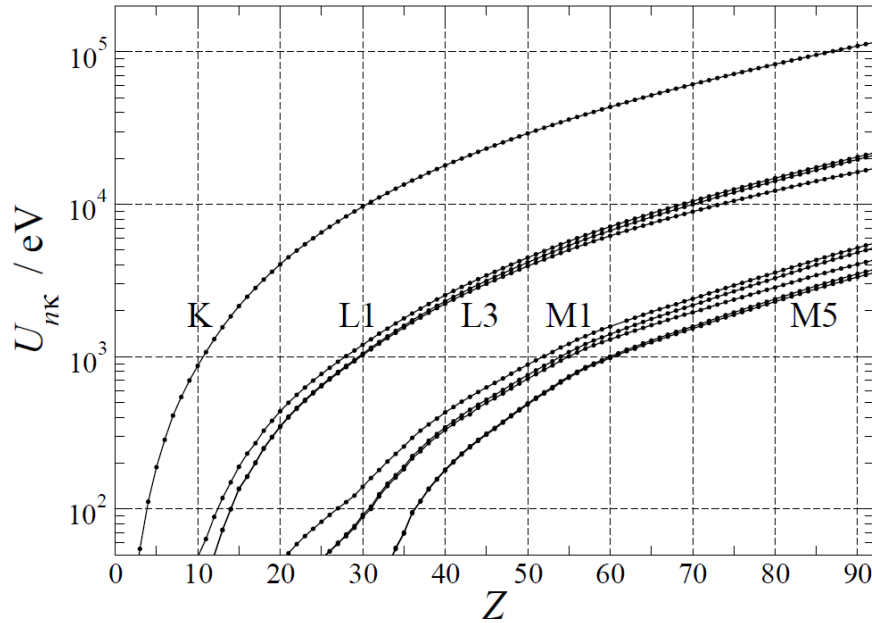


Figura 2. Energías de ionización experimentales de las capas  $K$ ,  $L1 - L3$  y  $M1 - M5$  de los átomos neutros (J.M. Fernández-Varea.)

### 1.1.3.. Descripción de la interacción entre radiación incidente y un átomo en reposo

Cuando un átomo se ve sometido a la influencia de la radiación incidente deben incluirse en el Hamiltoniano  $\mathbf{H}$  términos adicionales con las energías de interacción entre el proyectil y los electrones atómicos. La ecuación de Schrödinger (o Dirac) en este caso es difícil o imposible de resolver exactamente, por lo que se recurre a métodos aproximados.

Implementando técnicas de teoría de perturbaciones, se descompone el Hamiltoniano en dos términos:  $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}'$ , siendo la ecuación de Schrödinger con  $\mathbf{H}_0$  resoluble y  $\mathbf{H}'$  es considerada como la “perturbación”.

$$\mathbf{H}_0 = \mathbf{H}_A + \mathbf{H}_F \quad (14)$$

donde el hamiltoniano del átomo ( $\mathbf{H}_A$ ), está dado por las ecuaciones 11 (o 12) y:

$$\mathbf{H}_F \equiv \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} b_{\lambda}^{\dagger} b_{\lambda} \quad (15)$$

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

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

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

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

$$\vec{A}(\vec{r}) \propto \sum_{\lambda} (\vec{A}_{\lambda} b_{\lambda} + \vec{A}_{\lambda}^* b_{\lambda}^{\dagger}) \quad \vec{A}_{\lambda} \sim \hat{\pi}_{\lambda} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (18)$$

Efectuando el acoplamiento mínimo en la ecuación 11 se obtiene:

$$\mathbf{H}'_{\text{fot}} = \sum_{j=1}^N \frac{q_e}{m_e c} \vec{A}(\vec{r}_j) \cdot \vec{p}_j + \sum_{j=1}^N \frac{q_e^2}{2m_e c^2} \vec{A}^2(\vec{r}_j) \equiv \mathbf{H}'_{\text{fot1}} + \mathbf{H}'_{\text{fot2}} \quad (19)$$

En el caso relativista, se utiliza el acoplamiento mínimo en la ecuación 12, resultando:

$$\mathbf{H}'_{\text{fot}} = \sum_{j=1}^N q_e \vec{\alpha}_j(\vec{r}) \cdot \vec{A}(\vec{r}_j) \quad (20)$$

Por otro lado, cuando la radiación incidente es una partícula cargada (carga  $Z^* q_e$ , masa  $M$ ) se tiene que la perturbación es la interacción Coulombiana (instantánea):

$$\mathbf{H}'_{\text{cp}} = \frac{Z Z^* q_e^2}{r_0} + \sum_{j=1}^N \left( \frac{-Z^* q_e^2}{r_{0j}} \right) \equiv \mathbf{H}'_{\text{cp1}} + \mathbf{H}'_{\text{cp2}} \quad (21)$$

aquí se ha utilizado que  $\vec{r}_0$  es la posición de la partícula cargada. En esta expresión se ha omitido la interacción transversal, un efecto relativista causado por el intercambio de fotones virtuales.

La probabilidad de transición por unidad de tiempo ( $W_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle}$ ) de un estado inicial  $|i\rangle$  a otro final  $|f\rangle$  (ambos propios de  $\mathbf{H}_0$ ) está dada por la *regla de oro de Fermi*:

$$W_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}|^2 \rho(E_{|f\rangle} = E_{|i\rangle}) \quad (22)$$

donde  $\rho(E_{|f\rangle})$  es la densidad de estados finales. Además, se tiene:

$$\mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle} = \langle f | \mathbf{H}' | i \rangle + \sum_n \frac{\langle f | \mathbf{H}' | n \rangle \langle n | \mathbf{H}' | i \rangle}{E_i - E_n} + \cdots \equiv \mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}^{(1)} + \mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}^{(2)} + \cdots \quad (23)$$

El primer término de la suma de  $\mathbf{M}_{|f\rangle,|i\rangle}$  es el término de primer orden, la sumatoria sobre estados intermedios  $|n\rangle$  son las contribuciones de segundo orden, etc.

En algunos casos se puede entender cualitativamente -e incluso cuantitativamente- ciertos procesos de interacción de la radiación con la materia por medio de una descripción clásica de los electrones atómicos. El método consiste en considerar que cada átomo (o molécula) neutro posee  $N = Z_2$  electrones ligados armónicamente a una posición de equilibrio mediante fuerzas conservativas y lineales. Se trabaja en el contexto en que  $f_j$  de estos electrones tienen frecuencias angulares propias  $\omega_j$ , verificándose que  $\sum_j f_j = Z_2$ . En el contexto de la mecánica cuántica esta relación se conoce como regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn, y los  $f_j$  se interpretan como intensidades de oscilador. La dinámica de los electrones con frecuencia angular  $\omega_j$  está gobernada por la segunda ley de Newton:

$$m_e \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{r} + m_e \Gamma \frac{\partial}{\partial t} \vec{r} + m_e \omega_j^2 \vec{r} = -q_e \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (24)$$

donde  $\Gamma$  un amortiguamiento fenomenológico y  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  es el campo eléctrico externo debido a la radiación incidente (fotón o partícula cargada). Si la amplitud de oscilación es lo bastante pequeña, de modo que  $\vec{E}$  pueda ser evaluado en la posición de equilibrio del electrón, resulta:

$$\vec{r}(t) = -\frac{q_e}{m_e} \frac{\vec{E}(t)}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \quad (25)$$

En otras situaciones, como por ejemplo en el caso de metales, es útil describir los electrones más débilmente ligados (los de conducción) como si constituyeran un gas de electrones libres y emplear en los cálculos la correspondiente función dieléctrica (compleja):

$$\varepsilon(k, \omega) = \varepsilon_{\Re}(k, \omega) + i\varepsilon_{\Im}(k, \omega) \quad (26)$$

La función dieléctrica depende del vector de onda  $k$  y la frecuencia angular  $\omega$ . La magnitud relevante en este tipo de formalismos es la *función de pérdida de energía*  $\Im(1/\varepsilon) = \frac{\varepsilon_{\Im}}{\varepsilon_{\Re}^2 + \varepsilon_{\Im}^2}$ . Finalmente, cuando la energía de la radiación incidente es muy alta, es posible despreciar las energías de ligadura y las distribuciones de velocidades de todos los electrones del blanco, y describirlos como si estuvieran libres y en reposo. Las ecuaciones de conservación de la energía y el momento permiten estimar las energías y direcciones de salida más probables de las partículas luego de interactuar (modalidad colisión binaria).

## 1.2.. Sección eficaz: Introducción

Considérese un experimento de *scattering* (dispersión), en el que se hace incidir sobre un blanco una densidad de flujo (tasa de fluencia) de partículas  $\Phi$ . Un detector analiza las  $\dot{N}$  partículas que, por unidad de tiempo, han sido desviadas dentro del ángulo sólido  $d\Omega$  del detector (determinado por los ángulos polar  $\theta$  y acimutal  $\phi$ ) y llegan con energía entre  $E'$  y  $E' + dE'$ . La *sección eficaz diferencial* de este proceso de colisión ( $\frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega}$ ) se define como sigue:

$$\frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \equiv \frac{1}{\Phi} \frac{\dot{N}}{dE' d\Omega} \quad (27)$$

En la expresión anterior (27) el último factor está directamente relacionado con la probabilidad de transición por unidad de tiempo dada por la regla de oro de Fermi (22).

Integrando respecto del ángulo sólido y la energía se obtiene la *sección eficaz total* ( $\sigma$ ):

$$\sigma = \int dE' \int d\Omega \frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \quad (28)$$

que tiene dimensiones de superficie. Es posible interpretar la sección eficaz diferencial como una densidad de probabilidad a partir de la relación:

$$p(E', \theta) = \frac{1}{\sigma} 2\pi \sin(\theta) \frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \quad (29)$$

Obsérvese que la sección eficaz diferencial depende del ángulo de dispersión polar  $\theta$  pero no del ángulo de dispersión acimutal  $\phi$  debido a la simetría cilíndrica del problema.

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

$$\lambda^{-1} = \mathcal{N} \sigma \quad (30)$$

siendo  $\lambda$  el *camino libre medio* entre colisiones sucesivas. El producto  $\mathcal{N} \sigma$  recibe a veces el nombre de *sección eficaz macroscópica* ( $\Sigma$ ) o, en el caso de fotones, coeficiente de atenuación lineal ( $\mu$ ).

Las consideraciones anteriores son directamente generalizables si hay diversos mecanismos de interacción (cada uno de tipo  $i$ ). Así, se tiene:

$$\sigma_{Total} = \sum_i \sigma_i \quad \wedge \quad \lambda_{Total}^{-1} = \sum_i \lambda_i^{-1} \quad (31)$$

### 1.3.. Conceptos básicos sobre interacción de fotones con la materia

Los fotones carecen de masa en reposo y carga eléctrica. Por lo tanto, su interacción con los medios materiales que atravesieren no es tan intensa como en el caso de partículas cargadas. Considérese la interacción de fotones no polarizados de energía  $E$  con átomos neutros cuyo número atómico es  $Z$ . En el intervalo de energías de interés para las aplicaciones del presente curso (aproximadamente entre 0.1 keV y 1 GeV) los procesos de colisión dominantes son el efecto fotoeléctrico, la dispersión Rayleigh, el efecto Compton y la creación de pares electrón-positrón. Otros modos de interacción, tales como las reacciones fotonucleares, ocurren con probabilidades mucho menores y -a primer orden- pueden ser despreciados en varias situaciones prácticas.

Sea  $\zeta$  la energía del fotón en unidades de  $m_e c^2 \approx 511 \text{keV}$  (la energía en reposo del electrón):

$$\zeta \equiv \frac{E}{m_e c^2} \quad (32)$$

**1.3.1.. Efecto Fotoeléctrico**

En el *efecto fotoeléctrico* el fotón es absorbido por el átomo blanco y un electrón de la capa atómica  $i$ -ésima es emitido dentro del ángulo sólido  $d\Omega_e$ , caracterizado por el ángulo polar  $\theta_e$ , con energía cinética  $\epsilon_e = E - U_i$ , siendo  $U_i$  la energía de ionización de dicha capa. El proceso de fotoabsorción sólo es posible si  $E > U_i$ . En consecuencia la sección eficaz de efecto fotoeléctrico presenta marcados bordes de absorción, pues cada vez que  $E$  supera una energía  $U_i$  se “abre” un nuevo canal de absorción.

**Efecto Fotoeléctrico en la aproximación de Born**

La aproximación de Born (no-relativista) considera la perturbación  $\mathbf{H}'_{\text{fot1}}$  (21) a primer orden, con la simplificación adicional de reemplazar la función de onda del fotoelectrón por una onda plana. Esta aproximación implica secciones eficaces razonables sólo si  $\epsilon_e \gg U_i$  de modo que se pueda despreciar la interacción Culombiana del fotoelectrón con el ión residual.

La sección eficaz diferencial de efecto fotoeléctrico del átomo de hidrógeno (y de iones hidrogenoides) en la aproximación de Born puede ser evaluada analíticamente. En ausencia de polarización, la solución es:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_e} = 2^{\frac{3}{2}} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \zeta^{-7} \frac{\sin^2(\theta_e)}{[1 - \frac{v_e}{c} \cos(\theta_2)]^4} \approx 2^{\frac{3}{2}} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \zeta^{-7} \sin^2(\theta_e) \quad (33)$$

donde  $\alpha \equiv \frac{q_e^2}{\hbar c} \approx 1/137$  es la constante de estructura fina de Sommerfeld. La proporcionalidad con  $\sin^2(\theta_e)$  indica que el fotoelectrón tiende a emitirse perpendicularmente a la dirección del fotón incidente. La sección eficaz total se obtiene integrando la sección eficaz diferencial sobre todas las direcciones de emisión:

$$\sigma(E) = \int_{-1}^1 d2\pi \cos(\theta_e) \frac{d\sigma}{d\Omega_e} = \frac{2^{\frac{9}{2}} \pi}{3} \alpha^8 a_0^2 Z^5 \zeta^{-7} \quad (34)$$

Esta fórmula (34) resulta ser aplicable no sólo para fotoionización de átomos hidrogenoides, sino que también describe de forma aproximada la ionización de la capa  $K$  de átomos o iones por rayos X y  $\gamma$ . Obsérvese que la sección eficaz es proporcional a  $Z^5$  y a  $E^{-\frac{7}{2}}$ , creciendo rápidamente al aumentar el número atómico y disminuir la energía.

Para átomos multielectrónicos, se puede generalizar el tratamiento anterior sobre la base del modelo de electrones independientes en un campo central. Sin embargo, los cálculos sólo pueden realizarse en forma numérica.

**Efecto Fotoeléctrico en la aproximación dipolar eléctrica (no-relativista)**

En la aproximación dipolar eléctrica no-relativista, el Hamiltoniano de la interacción entre el campo de radiación electromagnética y el átomo es  $\mathbf{H}'_{\text{fot1}}$  (21), pero haciendo la exponencial igual a 1 en la expresión del potencial vector. Con estas simplificaciones, la relación de conmutación de Heisenberg permite reemplazar los valores esperados de los operadores  $\vec{p}_j$  por los  $\vec{r}_j$ . Aplicando teoría de perturbaciones a primer orden (sólo con el término  $\mathbf{M}_{|f\rangle,|i\rangle}^{(1)}$  en las expresiones 23, resulta la sección eficaz de efecto fotoeléctrico se escribe:

$$\sigma(E) = 4\pi\alpha E \left| \langle \Psi_f | \sum_{j=1}^N \vec{r}_j | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (35)$$

donde  $\Psi_i$  y  $\Psi_f$  son las funciones de onda atómicas inicial y final, respectivamente; las cuales pueden ser aproximadas mediante determinantes de Slater y el operador es a un cuerpo, así que sólo estarán permitidas transiciones que involucren a un único electrón. El elemento de matriz se reduce entonces a  $|\langle \varphi_f | \vec{r} | \varphi_i \rangle|$  siendo  $\varphi_i$  y  $\varphi_f$  los orbitales de spin monoparticulares inicial (ligado) y final (libre), respectivamente, del electrón activo (el que efectúa la transición). En principio, debería efectuarse un desarrollo en ondas parciales del orbital libre  $\varphi_f$ . Sin embargo, el carácter vectorial del operador  $\vec{r}$  impone la conocida regla de selección  $\ell' = \ell \pm 1$  de manera que contribuyen a lo sumo dos ondas parciales.

Las funciones radiales reducidas inicial,  $P_{n\ell}(r)$  y final  $P_{\zeta_e \ell'}(r)$  del electrón activo se obtienen resolviendo numéricamente la ecuación de Schrödinger radial. La expresión final para la sección eficaz de efecto fotoeléctrico de la capa activa (cuyo número de electrones es  $\mathbb{N}_{n\ell}$ ) es:

$$\sigma(E) = \frac{4\pi^2\alpha}{3} \mathbb{N}_{n\ell} (\zeta_e - \epsilon_{n\ell}) \left[ \frac{\ell}{2\ell+1} R_{\ell-1}^2 + \frac{\ell+1}{2\ell+1} R_{\ell+1}^2 \right] \quad (36)$$

Con  $E = \zeta_e - \epsilon_{n\ell}$  y con las integrales radiales dadas por:

$$R_{\ell\pm 1}(\zeta_e) \equiv \int_{\mathfrak{R}^+} P_{\zeta_e \ell\pm 1}(r) r P_{n\ell}(r) dr \quad (37)$$

### Efecto Fotoeléctrico en la aproximación Scofield

Actualmente, los cálculos considerados más exactos son los realizados por Scofield, que incluyen todos los multipolos del campo de radiación así como efectos relativistas, lo cual es esencial para átomos pesados. Es decir, se trata  $\mathbf{H}'_{\text{fo}t}$  a primer orden sin introducir simplificaciones adicionales. Estos resultados han sido incorporados a la base de datos EPDL en 1997<sup>3</sup> y en el programa XCOM. A modo de ejemplo, la figura 3 presenta las secciones eficaces de efecto fotoeléctrico para Al, Cu y Pb.

### 1.3.2.. Scattering coherente o Rayleigh

El *scattering* coherente o Rayleigh es el proceso por el cual un fotón es dispersado elásticamente por los electrones atómicos ligados. Es decir, el átomo blanco no es excitado. En consecuencia  $\Psi_f = \Psi_i$  y las energías de los fotones incidente y dispersado son iguales:  $E' = E$ . Este proceso se denomina coherente porque aparecen efectos de interferencia entre las ondas dispersadas por diferentes partes de la distribución de carga atómica.

#### Dispersión coherente en la aproximación del factor de forma

En este formalismo (básicamente no-relativista) se trata al Hamiltoniano  $\mathbf{H}'_{\text{fo}t2}$  (expresión 20) asociado a la interacción entre la radiación electromagnética y el átomo como una perturbación a primer orden, mientras que desprecia la contribución de  $\mathbf{H}'_{\text{fo}t1}$  a segundo orden. Desarrollando los correspondientes elementos de matriz  $\langle f | \mathbf{H}'_{\text{fo}t2} | i \rangle$  puede calcularse la sección eficaz diferencial (por átomo) para dispersión coherente:

<sup>3</sup>Cullen, Hubbell & Kissel. EPDL97 The evaluated data library, '97 version, Report UCRL-50400 vol. 6, rev. 5 (Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, 1997).



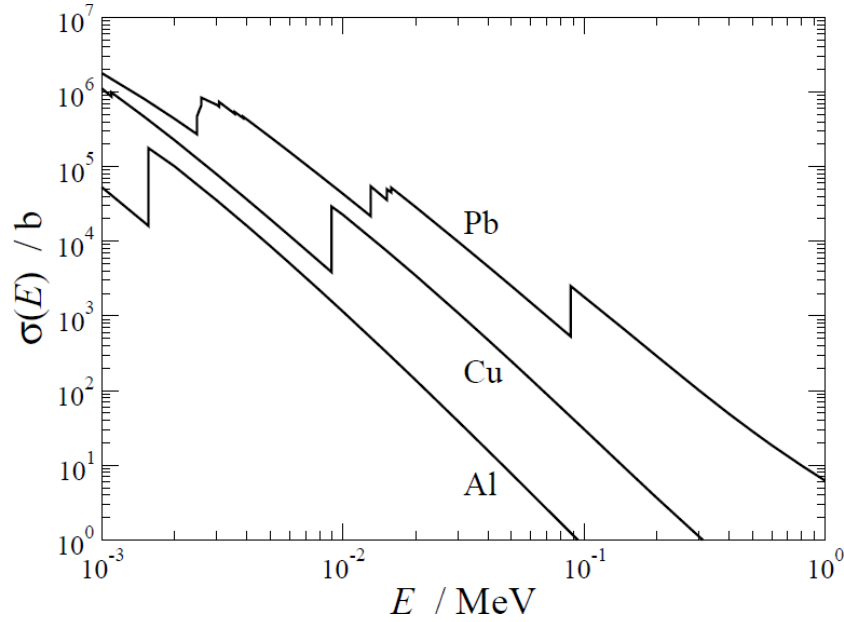


Figura 3. Secciones eficaces de efecto fotoeléctrico para Al, Cu y Pb.

$$\frac{d\sigma_{coh}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_T}{d\Omega} |F(q, Z)|^2 = r_e^2 \left( \frac{1 + \cos^2(\theta)}{2} \right) |F(q, Z)|^2 \quad (38)$$

donde es  $\frac{d\sigma_T}{d\Omega}$  es la sección eficaz diferencial de Thomson para la dispersión por un electrón libre y en reposo, la cual se obtiene a partir de argumentos clásicos,  $\theta$  se refiere al ángulo de dispersión polar, *i.e.* el ángulo entre las direcciones de propagación del fotón antes y después de la interacción; y  $r_e \equiv \frac{q_e^2}{m_e c^2} \approx 2,818 \times 10^{-13} \text{ cm}$  es denominado radio clásico del electrón.

El factor de forma atómico  $F(q, Z)$  dado por:

$$F(q, Z) = \langle \Psi_0 | \sum_{j=1}^N e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j / \hbar} | \Psi_0 \rangle \quad (39)$$

donde  $\Psi_0$  denota la función de onda atómica del estado fundamental y la suma recorre los  $Z$  electrones atómicos;  $\vec{q}$  es el vector transferencia de momento, cuyo módulo está dado por:

$$q = 2 \frac{E}{c} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (40)$$

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

$$F(q, Z) = \int_{\mathfrak{R}^+} \rho(r) \frac{\sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right)}{\frac{qr}{\hbar}} 4\pi r^2 dr \quad (41)$$

$F(q, Z)$  es una función monótonamente decreciente en  $q$  que varía desde  $F(0, Z) = Z$  a  $F(\infty, Z) = 0$ . Por lo tanto, la presencia del término en  $F(q, Z)^2$  en la expresión para la sección eficaz diferencial (38), favorece la dispersión coherente (Rayleigh) hacia ángulos pequeños.

En el caso del átomo de hidrógeno no-relativista el factor de forma atómico puede evaluarse analíticamente<sup>4</sup>:

$$F_H(q, Z = 1) = \left[ 1 + \left( \frac{qa_0\hbar}{2Z} \right) \right]^{-2} \quad (42)$$

Pero, los factores de forma atómicos para átomos multielectrónicos (con más de un electrón) requieren de ser calculados numéricamente. Por lo general, existen extensas tablas<sup>5</sup>, obtenidas a partir de densidades atómicas autoconsistentes para átomos con  $Z = 2 - 100$ . La Figura 4 muestra los factores de forma atómicos correspondientes a los átomos de C, Cu y Pb.

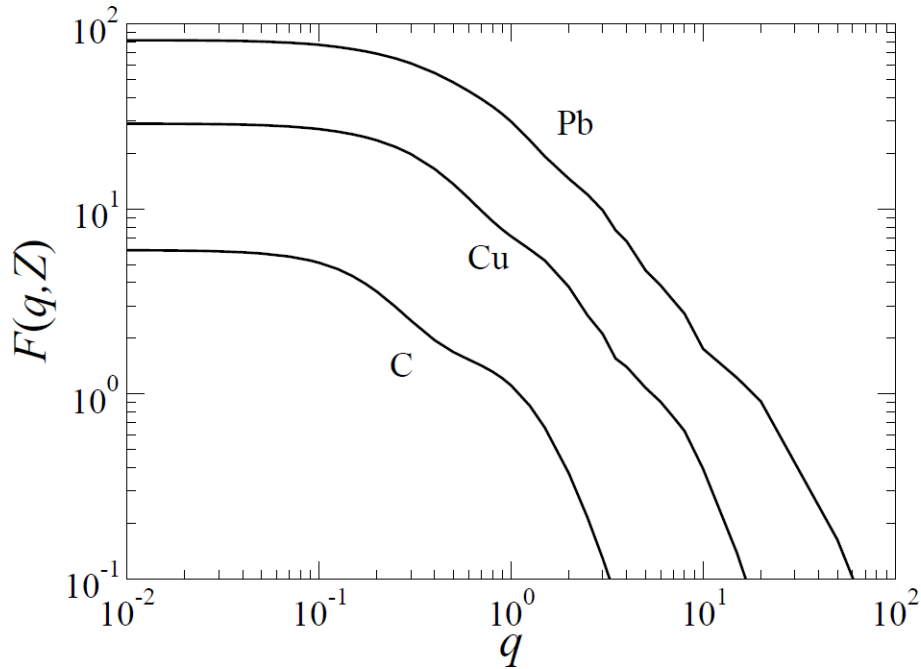


Figura 4. Factores de forma atómicos para C, Cu y Pb (Hubbell et al.)

La sección eficaz total (por átomo) de *scattering* Rayleigh se obtiene a partir de:

$$\sigma(E) = \pi r_e^2 \int_{-1}^1 (1 + \cos^2(\theta)) |F(q, Z)|^2 d(\cos(\theta)) \quad (43)$$

Para energías bajas, el factor de forma en la integral es, aproximadamente,  $F(0, Z) = Z$  y por lo tanto la dispersión coherente se reduce a la dispersión Thomson:

<sup>4</sup>fórmula de Pirene.

<sup>5</sup>véase Hubbell et al. Phys. Chem. Ref. Data 4 (1975) 471. Erratum: ibid. 6 (1977) 615.

$$\sigma = \frac{8}{3} \pi r_e^2 Z^2 \quad (44)$$

Mientras que en el límite de alta energía se tiene:

$$\sigma \sim E^{-2} \quad (45)$$

Estos comportamientos asintóticos pueden apreciarse en la Figura 5, donde se han representado las secciones eficaces totales Rayleigh para C, Cu y Pb.

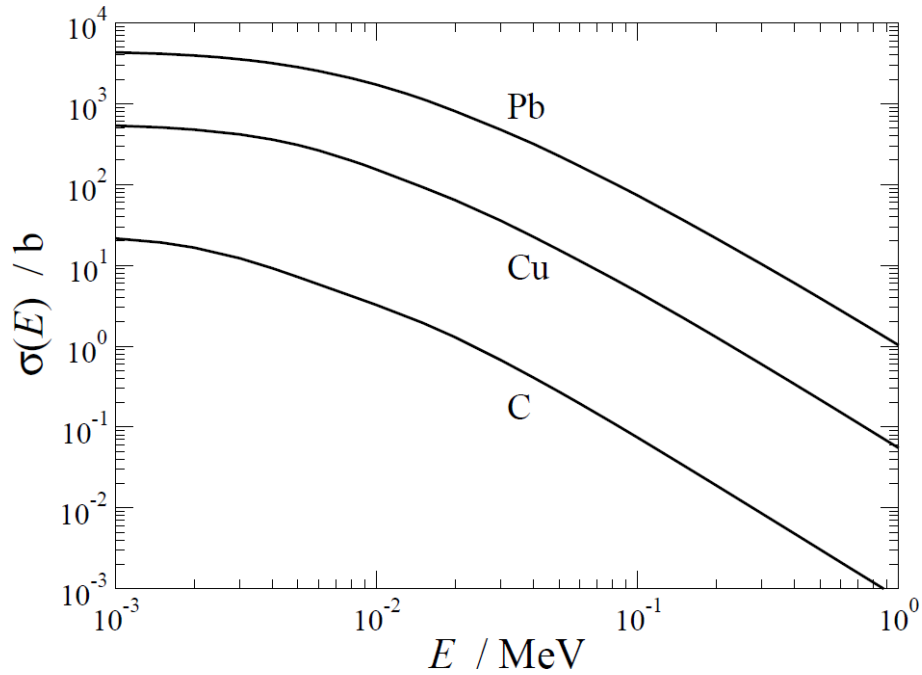


Figura 5. Secciones eficaces Rayleigh para C, Cu y Pb.

### Dispersión coherente anómala

En un sentido estricto, la expresión 38 es adecuada sólo para fotones si  $E \gg U_K$ , para  $U_K$ : energía de ligadura de la capa  $K$  del átomo. El comportamiento predicho por la expresión 44 es alterado sustancialmente cuando se introducen los factores (reales) de dispersión “anómala”  $f'$  y  $f''$ , cuyo origen está en el Hamiltoniano relativista  $\mathbf{H}'_{\text{for}}$  tratado a segundo orden<sup>6</sup>. En este tratamiento, la sección eficaz diferencial resulta:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma_T}{d\Omega} |F(q, Z) + f'(E, Z) + if''(E, Z)|^2 \quad (46)$$

<sup>6</sup>Lo que se denomina “método de la matriz S de dispersión”.

La correspondiente sección eficaz total presenta cerca de los bordes de absorción una marcada reducción respecto de la sección eficaz predicha por la expresión 43.

Afortunadamente, cuando aparecen estos efectos de dispersión anómala el *scattering* coherente es mucho menos probable que la absorción fotoeléctrica. Por tanto, para muchos propósitos, es posible la aproximar el factor de forma por medio de la expresión 43.

### 1.3.3.. Scattering incoherente o Compton

En la dispersión incoherente de fotones (efecto Compton), un fotón de energía  $E = \kappa m_e c^2$  interactúa inelásticamente con un electrón atómico que lo absorbe y se re-emite un fotón secundario con energía  $E' = \tau E < E$  en la dirección  $\theta$  relativa a la dirección del fotón incidente. Tras la colisión, el electrón retrocede con una energía cinética  $\epsilon_e$  en la dirección  $\theta_e$ .

Si el electrón blanco está inicialmente libre y en reposo, se tiene que  $\epsilon_e = (1 - \tau)E$ . La conservación de energía y momentum implica:

$$\cos(\theta) = \frac{1}{\kappa} \left( \kappa + 1 - \frac{1}{\tau} \right) \quad (47)$$

$$\cos(\theta_e) = (\kappa + 1) \sqrt{\frac{1 - \tau}{\kappa [2 + \kappa(1 - \tau)]}} \quad (48)$$

Por lo tanto:

$$\tau = \frac{1}{1 + \kappa(1 - \cos(\theta))} \quad (49)$$

$$E' = \frac{E}{1 + \frac{E}{m_e c^2} (1 - \cos(\theta))} \equiv E_C \quad (50)$$

Sujeto a  $\tau_{\min} = \frac{1}{1+2\kappa} \leq \tau \leq \tau_{\max} = 1$ , que corresponden a *scattering* hacia atrás ( $\theta = \pi$ ) y hacia adelante ( $\theta = 0$ ), respectivamente.

### La formulación de Klein-Nishina

Suponiendo que los electrones del blanco están libres y en reposo, la sección eficaz diferencial angular (por electrón) para fotones no polarizados se obtiene a partir de la fórmula de Klein-Nishina:

$$\frac{d\sigma_{K-N}}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \left( \frac{E_C}{E} \right)^2 \left[ \frac{E_C}{E} + \frac{E}{E_C} - \sin^2(\theta) \right] = \quad (51)$$

$$\frac{r_e^2}{2} [1 + \kappa(1 - \cos(\theta))]^{-2} \left[ 1 + \cos^2(\theta) + \frac{\kappa^2(1 - \cos(\theta))^2}{1 + \kappa(1 - \cos(\theta))} \right] \quad (52)$$

Puede verse que en el límite de bajas energías ( $\kappa \rightarrow 0$ ), la sección eficaz  $\frac{d\sigma_{K-N}}{d\Omega}$  se reduce a la fórmula de Thomson (38)

Sin embargo, generalmente es más conveniente expresar la sección eficaz de Klein-Nishina en términos de  $\tau$  (que describe la fracción de energía del fotón secundario):

$$\frac{d\sigma_{K-N}}{d\tau} = \frac{d\sigma_{K-N}}{d\Omega} \frac{2\pi d(\cos(\theta))}{d\tau} = \frac{\pi r_e^2}{\kappa^3} \left( \frac{1}{\tau^2} + \frac{\kappa^2 - 2\kappa - 2}{\tau} + (2\kappa + 1) + \kappa^2 \tau \right) \quad (53)$$

La correspondiente sección eficaz total (por electrón) de Klein-Nishina resulta:

$$\sigma_{K-N} = \int_{\tau_{\min}}^{\tau_{\max}} d\tau \frac{d\sigma_{K-N}}{d\tau} = \pi r_e^2 \left[ \frac{4}{\kappa^2} + \frac{\kappa^2 - 2\kappa - 2}{\kappa^2} \ln(1 + 2\kappa) + \frac{2(\kappa + 1)}{(1 + 2\kappa)^2} \right] \quad (54)$$

### La aproximación de Waller-Hartree

En la aproximación de Waller-Hartree se incluyen los efectos de ligadura de los electrones atómicos. En este formalismo, la sección eficaz Compton (por átomo) se obtiene a partir de:

$$\frac{d\sigma}{d\tau} = \frac{d\sigma_{K-N}}{d\tau} S(q, Z) \quad (55)$$

donde  $S(q, Z)$  es la *función de dispersión incoherente* del átomo blanco, con

$$q^2 = \frac{E^2 + E'^2 - 2EE' \cos(\theta)}{c^2} = (m_e c)^2 \kappa \left[ 2 + \kappa - 2\tau(1 + \kappa) + \tau^2 \kappa \right] \quad (56)$$

siendo entonces  $q$  el módulo de la transferencia de momento al electrón.

La función de dispersión incoherente se calcula a partir de la función de onda atómica del estado fundamental  $\Psi_0$  mediante:

$$S(q, Z) = \langle \Psi_0 | \sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^Z e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} / \hbar | \Psi_0 \rangle \quad (57)$$

De aquí se sigue que  $S(q, Z)$  es una función monótonamente creciente de  $q$  que toma valores desde  $S(0, Z) = 0$  hasta  $S(\infty, Z) = Z$ . Se observa que la función de dispersión incoherente inhibe las colisiones “blandas”, *i.e.* aquellas en las que la transferencia de momento  $q$  es pequeña, reduciendo la sección eficaz diferencial; de hecho  $\frac{d\sigma}{d\tau}$  se anula para  $\tau = 1$  ya que  $q^2(\tau = 1) = 0$ .

En el caso del átomo de hidrógeno, la función de dispersión incoherente admite una expresión analítica ya que  $i = j = 1$ , luego:

$$S_H(q, Z) = 1 - [F_H(q, Z)]^2 \quad (58)$$

Nuevamente, para el caso de átomos multielectrónicos es necesario recurrir al cálculo numérico para evaluar las funciones  $S(q, Z)$  <sup>7</sup>.

En situaciones prácticas puede convenir el empleo de funciones de dispersión incoherente aproximadas pero expresadas en forma analítica <sup>8</sup>, en vez de extensas tablas de difícil manejo. La Figura 6 reporta funciones de dispersión incoherente correspondientes a los átomos de C, Cu y Pb.

La sección eficaz total incoherente (por átomo) es entonces:

$$\sigma(E) = \int_{\tau_{\min}}^{\tau_{\max}} \frac{d\sigma_{KN}}{d\tau} S(q, Z) d\tau \quad (59)$$

El comportamiento de  $\sigma$  en función de la energía del fotón puede observarse en la Figura 7 para dos especies atómicas (Al y Au).

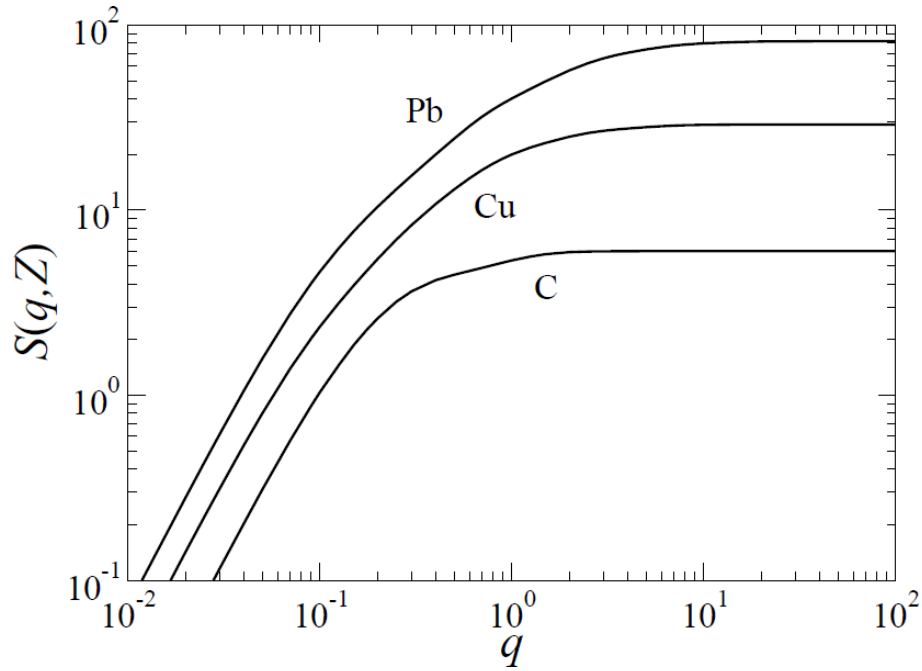


Figura 6. Funciones de dispersión incoherente de C, Cu y Pb (Hubbell et al.)

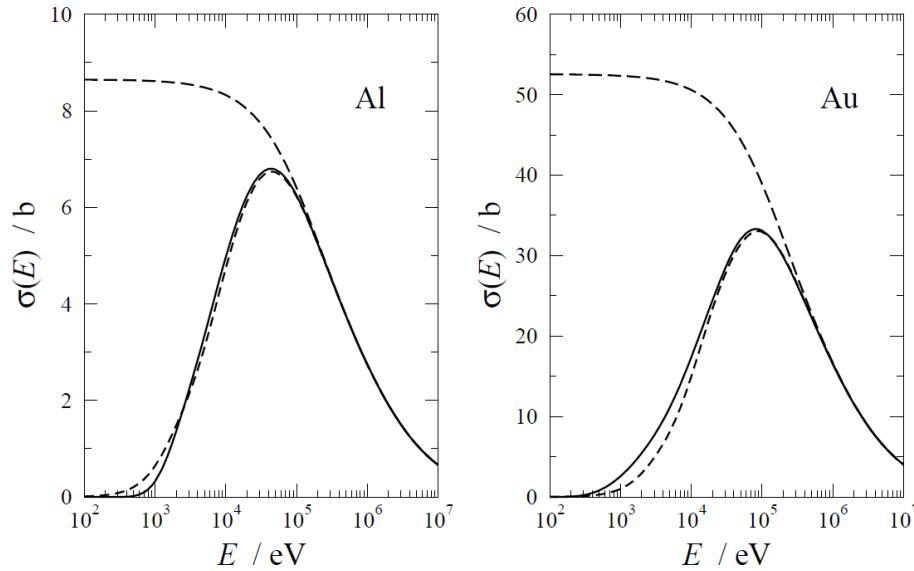


Figura 7. Secciones eficaces Compton de Al y Au. Las curvas a trazos largos y cortos son las predicciones de Klein-Nishina y Waller-Hartree, respectivamente. Las curvas continuas corresponden a la aproximación de impulso relativista.

<sup>7</sup>Hubbell et al. compilaron tablas de  $S(q, Z)$  para todos los elementos desde  $Z = 1$  a 100, a partir de funciones de onda atómicas autoconsistentes de tipo Hartree-Fock.

<sup>8</sup>Véase, por ejemplo, J. Baró et al. *Radiat. Phys. Chem.* **44**, 531, 1994.

La sección eficaz total tiende a cero para fotones de bajas energías, mientras que la sección eficaz total obtenida a partir de la fórmula de Klein-Nishina ( $\sigma_{KN}$ ) permanece finita en  $E = 0$ . La diferencia entre secciones eficaces totales obtenidas de la expresión 59 y de la fórmula de Klein-Nishina aumenta cuando la energía del fotón disminuye y es apreciable para energías menores a  $\sim 100$  keV.

### Scattering Compton: aproximaciones de mayor precisión

Existen modelos teóricos más elaborados para describir la dispersión incoherente de fotones teniendo en cuenta que el electrón activo está ligado y en movimiento antes de la colisión. Entre ellos, cabe mencionar: la *aproximación de impulso* y el *método de la matriz S de dispersión*. La aproximación de impulso sólo considera  $\mathbf{H}_{\text{fot}}^2$  a primer orden, mientras que el método de la matriz S de dispersión trata  $\mathbf{H}_{\text{fot}}$  a segundo orden. Desafortunadamente, la dificultad de realizar los cálculos numéricos hace que aún no existan tabulaciones completas basadas en estos formalismos.

#### 1.3.4.. Producción de pares electrón-positrón

En la creación de pares el fotón desaparece y su energía es invertida en crear un electrón y su antipartícula, el positrón. Sea  $E_{\pm}$  la energía cinética de estas dos partículas cargadas,  $e^{-}$  y  $e^{+}$  respectivamente, la conservación de la energía exige que sea:  $E = E_{-} + E_{+} + 2m_e c^2$ . Puede observarse que la creación de pares sólo será posible si  $E > 2m_e c^2 \approx 1,022$  MeV. Por otra parte, la conservación de la cantidad de movimiento obliga a que el proceso tenga lugar cerca de una partícula cargada masiva que absorba una pequeña cantidad de movimiento y una fracción despreciable de energía. Esa partícula masiva podrá ser tanto un núcleo como alguno de los electrones atómicos. En este último caso -sólo puede suceder si  $E > 4m_e c^2$ - el proceso se denomina *creación de tripletes*, pues el electrón que absorbe la cantidad de movimiento es arrancado del átomo.

El cálculo de las secciones eficaces del proceso de creación de pares es complicado, pues se debe recurrir a la electrodinámica cuántica. Empleando este formalismo, y suponiendo que las partículas cargadas emergentes son lo bastante rápidas como para poder ser descritas mediante ondas planas (aproximación de Born), Bethe y Heitler obtuvieron una expresión para la sección eficaz diferencial en la energía cinética del electrón creado ( $E_{-}$ )<sup>9</sup>:

$$\frac{d\sigma_{BH}^{e^{-}-e^{+}}}{dE_{-}} = Z(Z+1)f(Z, E, E_{-}) \quad (60)$$

No resulta de interés prioritario, para los fines de esta exposición, dar los detalles de la función  $f(Z, E, E_{-})$ , pero cabe mencionar que ésta depende del factor de forma atómico. En cambio, vale la pena destacar que -tal como se anticipó- aparecen dos contribuciones, una proporcional a  $Z^2$  que da cuenta de la creación de pares en el campo del núcleo y otra proporcional a  $Z$  que se debe a la contribución de los  $Z$  electrones atómicos al proceso (creación de tripletes).

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

$$\langle \theta_{\pm} \rangle \approx \left( 1 + \frac{E}{m_e c^2} \right)^{-1} \quad (61)$$

La sección eficaz total de creación de pares se obtiene al integrar  $\frac{d\sigma_{BH}^{e^{-}-e^{+}}}{dE_{-}}$  respecto de  $E_{-}$ . La Figura 8 reporta las secciones eficaces de creación de pares y tripletes en C, Cu y Pb según la energía del fotón incidente.

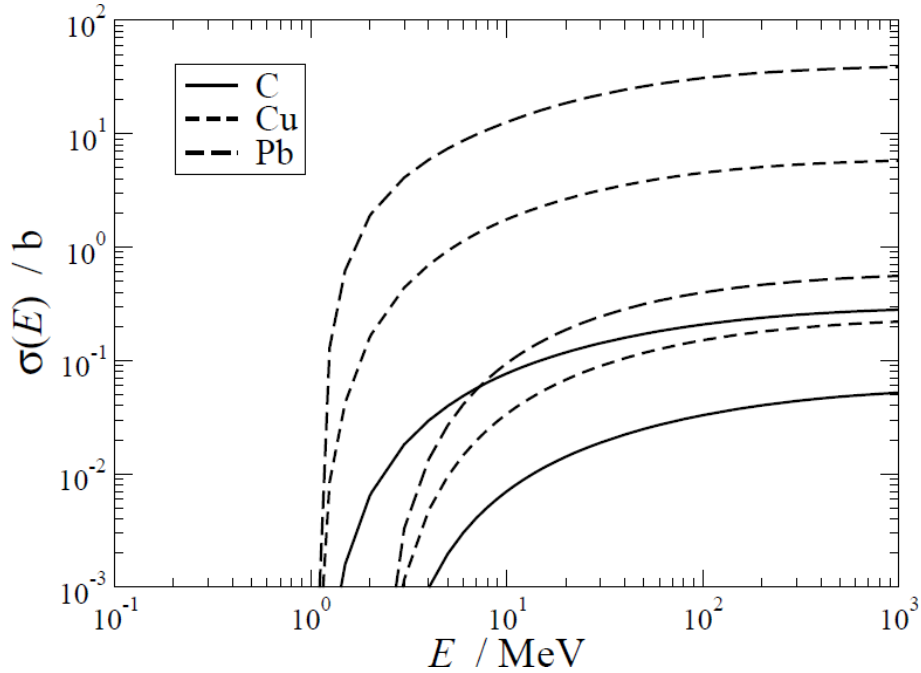


Figura 8. Secciones eficaces de creación de pares y tripletes en C, Cu y Pb.

### 1.3.5.. Reacciones fotonucleares

Cuando el fotón tiene una energía superior a algunos MeV aparece la posibilidad de que interactúe directamente con el núcleo atómico. Las reacciones fotonucleares más probables son las de tipo  $(\gamma, n)$ , en las que el fotón arranca un neutrón, que es liberado. Por supuesto, las correspondientes secciones eficaces dependen fuertemente de la energía, así como del nucleido en cuestión (es decir, de  $Z$  y  $A$ ).

## 1.4.. Coeficiente de atenuación: Introducción

Para cada modo de interacción  $i$  ( $i =$  “fotoeléctrico”, “Rayleigh”, “Compton”, “creación de pares”, “creación de tripletes”), se define el coeficiente de atenuación (lineal)  $\mu_i$  dado por:

$$\mu_i \equiv \mathcal{N} \sigma_i \quad (62)$$

donde  $\mathcal{N}$  es el número de átomos o moléculas por unidad de volumen. Como  $\mathcal{N}$  es proporcional a la densidad másica  $\rho$ , resulta más conveniente definir los coeficientes de atenuación másicos parciales  $\mu_i/\rho$ , y el coeficiente de atenuación másico total:

$$\frac{\mu}{\rho} \equiv \frac{N_{Av}}{A_w} \sum_i \sigma_i \quad (63)$$

<sup>9</sup>Expresión conocida como fórmula de Bethe-Heitler.



Las dos tabulaciones de coeficientes de atenuación másicos más empleadas son la base de datos EPDL '97, de Cullen et al. y la del NIST de Berger-Hubbell. Esta última cubre energías de fotones superiores a 1 keV y se puede generar mediante el programa llamado XCOM. Nótese que, convencionalmente, las tabulaciones de coeficientes de atenuación másicos no incluyen la contribución debida a reacciones fotonucleares. A modo de ejemplo, la Figura 9 reporta los coeficientes de atenuación másicos de Al y Pb generados con XCOM.

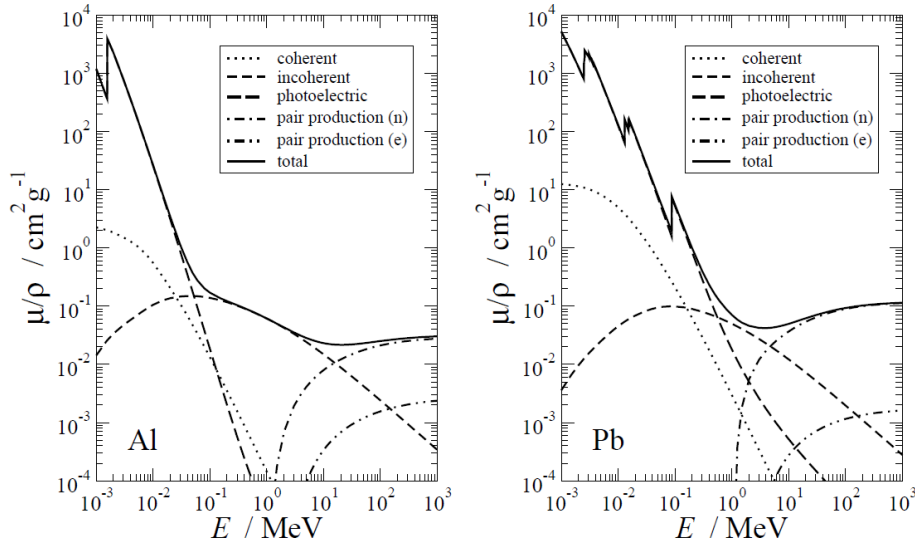


Figura 9. Coeficientes de atenuación másicos de Al y Pb, obtenidos con el programa XCOM.

### 1.5.. Coeficiente de atenuación másico para compuestos

Cuando el medio por el que se propagan los fotones es un compuesto o una mezcla, el coeficiente de atenuación másico puede aproximarse como sigue:

$$\frac{\mu}{\rho_{comp}} \approx \sum_j w_j \frac{\mu}{\rho_j} \quad (64)$$

donde la suma se extiende sobre los  $j$  componentes elementales (puros) presentes en el compuesto siendo  $w_j$  la fracción en peso del elemento  $j$ -ésimo. Nótese que en esta expresión 64 se ignoran los efectos de agregación, ya sean moleculares o de materia condensada.

### 1.6.. Introducción a la interacción de las partículas cargadas con la materia

Esta sección se concentra en la descripción de los procesos de interacción que experimentan las partículas cargadas (carga  $Z_1 q_e$ , masa  $M$ ) al atravesar un medio material de número atómico  $Z_2$ . Se indicará con  $\vec{v}$ ,  $\vec{p}$  y  $E$  la velocidad, momento lineal y energía cinética del proyectil antes de la colisión, mientras que las variables primadas ( $\vec{v}'$ ,  $\vec{p}'$  y  $E'$ ) corresponden a cantidades después de la colisión. Se define, además, las transferencias de momento lineal y energía en la colisión como  $\vec{q} \equiv \vec{p} - \vec{p}'$  y  $W \equiv E - E'$ , respectivamente.

Conviene recordar que, cuando se trata de partículas relativistas, se define  $\beta \equiv \frac{v}{c}$  y  $\gamma \equiv (1 - \beta^2)^{-\frac{1}{2}}$ . El momento lineal y la energía cinética se expresan entonces como  $p = \gamma M \beta c$  y  $E = (\gamma - 1) M c^2$ . Es imprescindible emplear la cinemática relativista cuando  $\beta \gtrsim 0,1$ , lo cual sucede para electrones y positrones con  $E \gtrsim 5$  keV y para partículas cargadas pesadas con  $E/M \gtrsim 10$  MeV/u.

Se verá que son posibles colisiones tanto elásticas como inelásticas y la emisión de radiación de frenado. La masa de las partículas cargadas determina la importancia de cada uno de estos modos de interacción. De hecho, las partículas cargadas pesadas ( $M \gg m_e$ ) apenas sufren cambios de dirección y viajan esencialmente en línea recta.

### 1.6.1.. Scattering elástico de electrones y positrones

Las partículas cargadas pueden interactuar elásticamente con los átomos del material, cambiando de dirección pero sin perder energía, *i.e.*  $E' = E$  y  $\Psi_f = \Psi_i$ .

#### Sección eficaz diferencial de Rutherford

Considérese un electrón (o positrón) que modifica su dirección de vuelo al interactuar elásticamente con el potencial de Coulomb producido por el núcleo del átomo blanco. El correspondiente Hamiltoniano es  $\mathbf{H}'_{cp1}$  (expresión 21). Es un hecho notable que para este Hamiltoniano los cálculos no-relativistas clásico y cuántico (tanto exacto como en la aproximación de Born) de la correspondiente sección eficaz diferencial conducen a la misma expresión<sup>10</sup>:

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{(2m_e Z_1 Z_2 q_e^2)^2}{q^4} = \left( \frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{m_e v^2} \right)^2 \frac{1}{(1 - \cos(\theta))^2} \quad (65)$$

Ésta es conocida como *fórmula de Rutherford*, y la versión relativista (ignorando el spin) es:

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{(2m_e Z_1 Z_2 q_e^2)^2}{q^4} = \left( \frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{\beta^2 \gamma m_e c^2} \right)^2 \frac{1}{(1 - \cos(\theta))^2} = \left( \frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{(p\beta c)} \right)^2 \frac{1}{(1 - \cos(\theta))^2} \quad (66)$$

La divergencia de la sección eficaz diferencial de Rutherford en  $\theta = 0$  es una consecuencia directa de no haber tenido en cuenta el apantallamiento del potencial de Coulomb por los electrones atómicos, *i.e.* haber despreciado  $\mathbf{H}'_{cp2}$ .

#### La fórmula de Rutherford con apantallamiento

Una manera relativamente sencilla de evitar los problemas de la fórmula de Rutherford consiste en partir del potencial de Wentzel ( $V_W$ ): -

$$\mathbf{H}'_{cp} \sim V_W = \frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{r} e^{-\frac{r}{R}} \quad (67)$$

El factor exponencial reproduce, al menos cualitativamente, los efectos de apantallamiento de la carga nuclear por los electrones atómicos. La distancia de apantallamiento  $R$  puede ser estimada con ayuda del modelo atómico de Thomas-Fermi, obteniendo:

<sup>10</sup>Véase N. Gauthier, Eur. J. Phys. **21** L17, 2000.

$$R \approx 0,885 Z^{-\frac{1}{3}} a_0 \quad (68)$$

Luego, la sección eficaz diferencial se obtiene empleando la primera aproximación de Born:

$$\frac{d\sigma_{SR}}{d\Omega} = \left( \frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{(p\beta c)} \right)^2 \frac{1}{(2A + 1 - \cos(\theta))^2} \quad (69)$$

que es la *fórmula de Rutherford con apantallamiento*. El parámetro de apantallamiento (adimensional)  $A$  está dado por:

$$A \equiv \frac{1}{4} \left( \frac{\hbar}{p} \right)^2 R^{-2} \quad (70)$$

Finalmente, puede calcularse la correspondiente sección eficaz total:

$$\sigma_{SR} = \left( \frac{Z_1 Z_2 q_e^2}{(p\beta c)} \right)^2 \frac{\pi}{A(A + 1)} \quad (71)$$

### Método de ondas parciales

En el caso de energías bajas y números atómicos altos es necesario recurrir a formalismos más sofisticados para obtener las secciones eficaces elásticas. En particular, los métodos basados en los desarrollos en ondas parciales proporcionan una descripción adecuada de estos procesos para energías superiores a unos 100 eV, ya que están en buen acuerdo con las medidas experimentales disponibles. Además dan cuenta de las diferencias en el *scattering* de electrones y positrones, que según la fórmula de Rutherford (con o sin apantallamiento) no debieran existir.

Recientemente, ICRU <sup>11</sup> ha revisado a fondo los modelos de dispersión elástico de electrones y positrones y ha elaborado una tabulación basada en el método de ondas parciales relativista. La Figura 10 reporta, a modo de ejemplo, las secciones eficaces diferenciales de Al y Pb para electrones y positrones de varias energías, tomadas de la base de datos del informe 77 de ICRU.

### 1.6.2.. Scattering inelástico de electrones y positrones

En estas colisiones la partícula cargada incidente experimenta una reducción de su energía, *i.e.*  $E' < E$ , que se invierte en excitar o ionizar el átomo blanco ( $\Psi_f \neq \Psi_i$ ). Normalmente un único electrón, al que se denomina “electrón activo”, efectúa una transición desde un orbital ligado  $i$  a otro  $f$ , que puede ser ligado (excitación) o libre (ionización). Por supuesto sólo se podrá ionizar la capa atómica  $i$ -ésima si  $E > U_i$  mientras que el electrón secundario (rayo  $\delta$ ) se emite con energía cinética  $\epsilon_e = WU_i$ .

### Fórmulas de Rutherford, Møller y Bhabha

<sup>11</sup>International Commission on Radiation Units and Measurements, Inc. (ICRU)

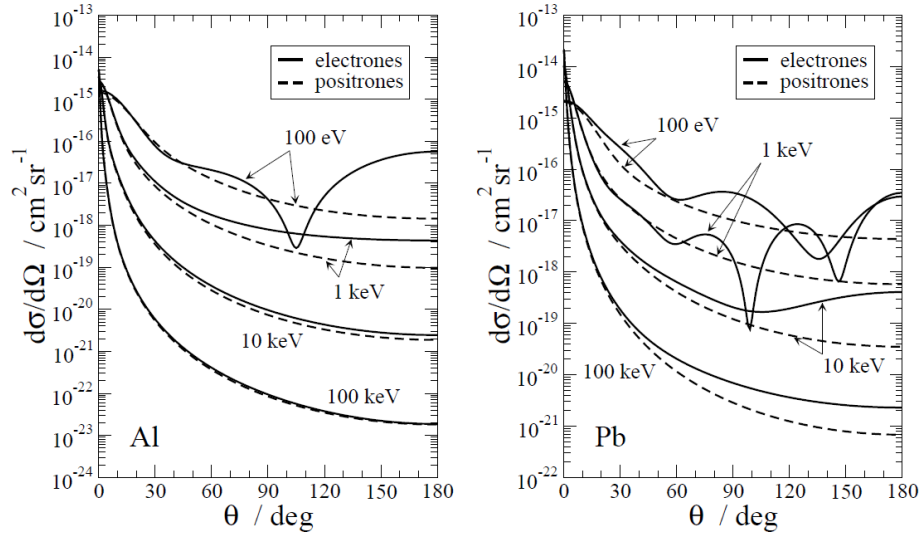


Figura 10. Secciones eficaces diferenciales de *scattering* elástico de electrones y positrones en átomos de Al y Pb.

Una manera relativamente simple de abordar el problema consiste en suponer que los  $Z_2$  electrones del átomo blanco están libres y en reposo, de modo que  $W \approx \epsilon_e$ . La conservación del momento y energía imponen que la pérdida de energía  $W$  del proyectil (no-relativista) cumpla:

$$W \leq W_{\text{máx}} \equiv \frac{2m_e v^2}{\left(1 + \frac{m_e}{M}\right)^2} \quad (72)$$

En esta aproximación, la sección eficaz diferencial (por electrón) en la transferencia de energía  $W$  está dada por la fórmula de Rutherford (no-relativista):

$$\frac{d\sigma_R}{dW} = \frac{2\pi Z_1^2 q_e^4}{m_e v^2} \frac{1}{W^2} \quad (73)$$

para  $W \leq W_{\text{máx}}$ . Vale destacar que  $\frac{d\sigma_R}{dW}$  depende de la carga y velocidad del proyectil, pero no de su masa.

Si la partícula cargada es un electrón, la fórmula de Rutherford no es correcta, pues no tiene en cuenta el carácter indistinguible de los electrones incidente y blanco. Debe emplearse en su lugar la *fórmula de Møller* (relativista):

$$\frac{d\sigma_M}{dW} = \frac{2\pi q_e^4}{m_e c^2 \beta^2} \frac{1}{W^2} \left[ 1 - \frac{W}{E-W} + \left(\frac{W}{E-W}\right)^2 + \left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)^2 \left(\frac{W}{E-W} + \frac{W^2}{E^2}\right) \right] \quad (74)$$

limitando las pérdidas de energía a  $W \leq W_{\text{máx}} = E/2$ , pues por convenio se considera que después de la colisión el electrón más energético es el primario.

Cuando la partícula incidente es un positrón, la expresión relativista correcta para la sección eficaz diferencial (por electrón) es la *fórmula de Bhabha*:

$$\frac{d\sigma_B}{dW} = \frac{2\pi q_e^4}{m_e c^2 \beta^2} \frac{1}{W^2} \left[ 1 - b_1 \frac{W}{E} + b_2 \left( \frac{W}{E} \right)^2 - b_3 \left( \frac{W}{E} \right)^3 + b_4 \left( \frac{W}{E} \right)^4 \right] \quad (75)$$

con  $W \leq W_{\text{máx}} = E$  y

$$\begin{aligned} b_1 &\equiv \left( \frac{\gamma-1}{\gamma} \right)^2 \frac{2(\gamma+1)^2-1}{\gamma^2-1} & b_2 &\equiv \left( \frac{\gamma-1}{\gamma} \right)^2 \frac{3(\gamma+1)^2-1}{(\gamma+1)^2} \\ b_3 &\equiv \left( \frac{\gamma-1}{\gamma} \right)^2 \frac{2\gamma(\gamma-1)}{(\gamma+1)^2} & b_4 &\equiv \left( \frac{\gamma-1}{\gamma} \right)^2 \frac{(\gamma-1)^2}{(\gamma+1)^2} \end{aligned} \quad (76)$$

El factor  $\frac{1}{W^2}$  presente en todas estas fórmulas indica que predominarán las colisiones con pequeñas pérdidas de energía. Sin embargo la divergencia en  $W = 0$  no se debe producir, pues los electrones atómicos no están libres sino ligados.

### Aproximación de Born con ondas planas (no-relativista)

Un modelo más realista, que tiene en cuenta los efectos de ligadura y movimiento de los electrones atómicos (y por tanto evita la divergencia de las fórmulas de Rutherford, Møller y Bhabha en  $W = 0$ ), está basado en la aproximación de Born con ondas planas. Este formalismo trata la perturbación  $\mathbf{H}'_{\text{cp}}$ , a primer orden y proporciona una expresión para la sección eficaz doble diferencial de ionización del orbital atómico  $i$ -ésimo ( $\frac{d^2\sigma_i}{d\Omega dW}$ ) tomando ondas planas como funciones de onda no perturbadas del proyectil. En concreto, en el caso no-relativista:

$$\frac{d^2\sigma_i}{dQ dW} = \frac{2\pi Z_1^2 q_e^4}{m_e v^2} \frac{1}{W Q} \frac{df_i(Q, W)}{dW} \quad (77)$$

donde en vez del ángulo polar de dispersión  $\theta$  del proyectil (o el ángulo sólido) es más conveniente utilizar la variable

$$Q \equiv \frac{q^2}{2m_e} = \frac{M}{m_e} \left[ 2E - W - 2\sqrt{E(E-W)} \cos(\theta) \right] \quad (78)$$

Los primeros factores de la expresión 77 son puramente cinemáticos, mientras que el último describe la respuesta del átomo blanco a la perturbación causada por el proyectil incidente. Este último factor se conoce como *intensidad de oscilador generalizada*, y se calcula a partir de las funciones de onda inicial y final del átomo ionizado:

$$\frac{df_i(Q, W)}{dW} = \frac{W}{Q} |\langle \Psi_f | \sum_{j=1}^{Z_2} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{r}_j} | \Psi_i \rangle|^2 \quad (79)$$

Expresando las funciones de onda atómicas  $\Psi_i$  y  $\Psi_f$  como determinantes de Slater que difieren únicamente en el orbital de spin monoparticular del electrón activo, el elemento de matriz se reduce a  $\langle \Psi_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{r}} | \Psi_i \rangle$ . La intensidad de oscilador generalizada del orbital 1S del átomo de hidrógeno admite una expresión analítica, pero la de los orbitales de átomos multielectrónicos ha de calcularse

numéricamente tras efectuar un desarrollo en ondas parciales de la función de onda  $\Psi_f$  del orbital libre.

La sección eficaz diferencial en la transferencia de energía  $W$  se obtiene integrando la expresión 77 respecto de  $Q$ :

$$\frac{d\sigma_i}{dW} = \int_{Q_-}^{Q_+} \frac{d^2\sigma_i}{dQ dW} \wedge Q_{\pm} \equiv Q \cos(\theta) = \pm 1. \quad (80)$$

Las predicciones de la fórmula de Rutherford están en buen acuerdo con los resultados que se obtienen de la ecuación anterior (80) sólo para  $U_i \ll W < W_{\text{máx}}$ , *i.e.* cuando la transferencia de energía es tan grande que los efectos de ligadura y movimiento pasan a ser irrelevantes. Además,  $\frac{d\sigma_i}{dW} = 0$  para  $W < U_i$ , lo que elimina la divergencia de la fórmula de Rutherford en  $W = 0$ .

En el límite  $Q \rightarrow 0$  la intensidad de oscilador generalizada es proporcional a la sección eficaz de efecto fotoeléctrico calculada en la aproximación dipolar eléctrica. En cambio, para valores grandes de  $W$  y  $Q$  los  $N_i$  electrones del orbital activo se comportan como si estuvieran libres y en reposo, y entonces:

$$\frac{df_i(Q, W)}{dW} \approx N_i \delta(W - Q) \quad (81)$$

Cabe destacar que empleando esta aproximación e integrando la expresión 80 respecto de los valores cinemáticamente permitidos de  $Q$  se recupera la fórmula de Rutherford.

Finalmente, la sección eficaz inelástica total para la ionización de la capa atómica considerada es:

$$\sigma_i(E) = \int_{U_i}^E \frac{d\sigma_i}{dW} dW \quad (82)$$

que toma un valor finito.

### **Métodos más precisos para la ionización de capas atómicas por impacto de $e^-/e^+$**

La aproximación de Born con ondas planas predice que las secciones eficaces (diferenciales y totales) de ionización son iguales para  $e^-$  y  $e^+$ . Esta sobresimplificación puede evitarse si se emplea la *aproximación de Born con ondas distorsionadas*. En este formalismo, parte de la perturbación  $\mathbf{H}_{\text{cp}}$  se incluye en el Hamiltoniano  $H_0$ , con lo que la función de onda de orden cero del proyectil pasa a ser una onda distorsionada. La nueva “perturbación”, que es “menor” que  $\mathbf{H}_{\text{cp}}$  se trata a primer orden.

Trabajos como La referencia [23] contienen una parametrización, basada en las aproximaciones de Born con ondas planas y distorsionadas (relativistas), de las secciones eficaces de ionización de las capas  $K$ ,  $L$  y  $M$  de todos los átomos por impacto de electrones y positrones. La Figura 11 presenta estas secciones eficaces para las capas más internas del átomo de Al.

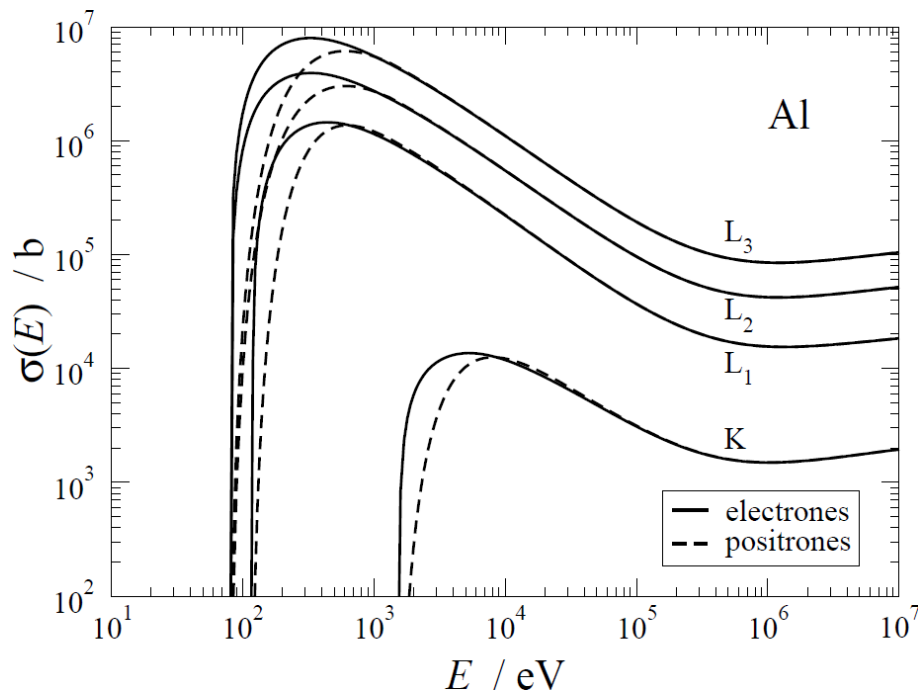


Figura 11. Sección eficaz de ionización de las capas 1s1/2, 2s1/2, 2p1/2 y 2p3/2 del átomo de Al por impacto de electrones (curvas continuas) y positrones (curvas a trazos).

### 1.6.3.. Scattering inelástico de iones positivos “vestidos”

Un ión de carga positiva (protón, partícula  $\alpha$ , etc.) puede viajar acompañado de uno o varios electrones que reducen su carga neta, apantallándolo parcial o totalmente. Se dice que es un “ión vestido”. Es posible incorporar este apantallamiento en la expresión de la sección eficaz doble diferencial (80) reemplazando  $Z_1$  por  $Z_1 - F(q, Z_1)$ , donde  $F(q, Z_1)$  es el factor de forma atómico del proyectil. Dado que  $0 \leq F(q, Z_1) \leq Z_1$ , la interacción del ión vestido es menor que cuando se trata de una carga  $Z_1 q_e$  “desnuda”.

Además, en el transcurso de la colisión el ión puede capturar o perder un electrón, modificando su estado de carga. Las correspondientes secciones eficaces de captura y pérdida varían con la velocidad del proyectil, predominando los procesos de captura/pérdida a velocidades bajas/altas, respectivamente.

### 1.6.4.. Emisión de radiación de frenado o Bremsstrahlung

Es bien sabido que las partículas cargadas emiten radiación electromagnética (radiación de frenado Bremsstrahlung) cuando están sometidas a aceleraciones. Un resultado de la electrodinámica clásica indica que la intensidad de radiación ha de ser proporcional al cuadrado de la aceleración. Recurriendo a la primera ley de Newton, y sabiendo que la interacción Coulombiana es la responsable de la fuerza que da lugar a dicha aceleración, se deduce que la intensidad será proporcional a los cuadrados de las cargas del proyectil y del núcleo, e inversamente proporcional al cuadrado de la masa de la partícula. Este resultado cualitativo indica que la emisión de Bremsstrahlung es muchos órdenes de magnitud más baja (prácticamente despreciable) para partículas cargadas pesadas ( $M \gg m_e$ ) que para electrones y positrones. De hecho, la emisión de Bremsstrahlung acaba siendo el

proceso dominante de pérdida de energía de estos leptones <sup>12</sup> cuando su energía es suficientemente alta.

Del mismo modo que para el caso de la creación de pares, hay que recurrir a la electrodinámica cuántica para obtener expresiones de las secciones eficaces. Como la emisión de Bremsstrahlung es un proceso emparentado con la creación de pares, no es de extrañar que Bethe y Heitler establecieran también una fórmula para este proceso, basada en la aproximación de Born:

$$\frac{d\sigma_{BH}}{dW} = Z(Z+1) \frac{1}{W} f(Z, E, W) \quad (83)$$

donde  $W$  es igual a la energía del fotón emitido. La función  $f(Z, E, W)$  involucra el factor de forma atómico y es complicada de calcular. El factor  $\frac{1}{W}$  indica que será más probable la emisión de fotones poco energéticos, y el factor  $Z(Z+1)$  da cuenta de las contribuciones del núcleo y de los electrones atómicos.

Seltzer y Berger prepararon, sintetizando diferentes modelos teóricos (cálculos de ondas parciales, aproximación de Bethe-Heitler), una tabulación de secciones eficaces diferenciales reducidas:

$$\chi(Z, E, W/E) = \frac{\beta^2}{Z^2} W \frac{d\sigma}{dW} \quad (84)$$

para electrones con energías comprendidas entre 1 keV y 10 GeV. La Figura 12 presenta algunas de estas funciones para Al y Pb.

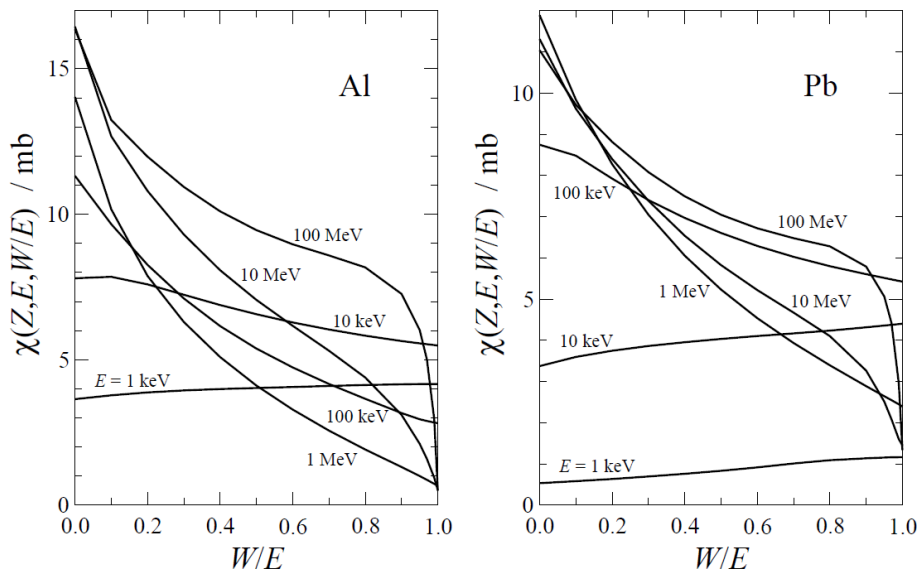


Figura 12. Secciones eficaces diferenciales reducidas para la emisión de Bremsstrahlung por electrones en Al y Pb.

<sup>12</sup>Electrones y positrones son clasificados dentro del conjunto denominado “leptones”, que refiere - brevemente- a partículas con spin  $\pm 1/2$  ( $-1/2$  en el caso de los neutrinos y  $/pm 1/2$  en los demás, “fermiones”) que no experimenta interacción fuerte.



La distribución angular del fotón emitido se obtiene a partir de la sección eficaz doble diferencial. En concreto, dados  $Z$ ,  $E$  y  $W/E$  la densidad de probabilidad de  $\cos(\theta)$  es:

$$p(Z, E, W/E, \cos(\theta)) = \frac{d^2\sigma}{dW d(\cos(\theta))} \quad (85)$$

Kissel et al. calcularon secciones eficaces diferenciales, empleando métodos de ondas parciales, para electrones con energía cinética entre 1 y 500 keV, y a partir de sus resultados tabularon  $p(Z, E, W/E, \cos(\theta))$  para unos cuantos valores de  $Z$ ,  $E$  y  $W/E$ . Éstos y otros autores han propuesto fórmulas analíticas que permiten obtener la densidad de probabilidad de  $\cos(\theta)$  cuando el número atómico o la energía no se corresponden con los de las tablas. También existen en la literatura expresiones analíticas sencillas para estimar la distribución angular en el límite de altas energías. En este límite  $\gamma \gg 1$  el ángulo polar promedio de emisión del fotón de Bremsstrahlung disminuye al aumentar la energía del electrón siguiendo la relación aproximada:

$$\langle \theta \rangle \approx \gamma^{-1} \quad (86)$$

Una descripción detallada, desde principios de electrodinámica clásica a modelos cuánticos de la emisión de Bremsstrahlung para electrones en regímenes típicos de aplicaciones en física médica se encuentra en Valente et al. *Characterisation of a megavoltage linear accelerator Bremsstrahlung by means of Monte Carlo simulations*. X-ray Spectrometry **39** (6), 2010

### 1.6.5.. Aniquilación $e^+e^-$

Como se vió, los positrones interactúan con la materia de manera similar a como lo hacen los electrones (aunque las correspondientes secciones eficaces no son idénticas). Sin embargo, al ser el positrón la antipartícula del electrón, es inestable mientras se propaga por la materia, pudiéndose aniquilar ambos en uno o varios fotones. Con diferencia lo más probable es que la aniquilación tenga lugar una vez que el positrón se encuentra prácticamente en reposo (después de frenarse) y se emitan dos fotones. Las leyes de conservación de energía y momento lineal obligan entonces a que éstos tengan una energía igual a  $m_e c^2 \approx 511$  keV y viajen en la misma dirección y sentidos contrarios.

### 1.6.6.. Scattering elástico múltiple de electrones y positrones

Los recorridos libres medios entre colisiones elásticas de electrones o positrones son muy pequeños. Como consecuencia de este hecho, si un electrón/positrón recorre un cierto camino  $s$  dentro del medio material en el que se mueve, experimentará numerosas deflexiones angulares, aunque la mayor parte de ellas será de ángulo pequeño, relativamente. Despreciando las pérdidas de energía, se considera un régimen de *condiciones de dispersión elástica múltiple*.

Conviene entonces recurrir a una descripción global del cambio de dirección tras recorrer la distancia  $s$ . El objetivo es por tanto determinar, dado un valor de  $s$ , la distribución  $p(\Theta, s)$  de ángulos polares de dispersión acumulados  $\Theta$ .

#### Modelo gaussiano de scattering elástico múltiple de $e^-$ y $e^+$

Se presenta en esta sección un modelo que permite evaluar de un modo simple la distribución de ángulos  $\Theta$  en función de  $s$ . La Figura 13 indica esquemáticamente la situación que se aborda:  $\Theta_x$  es el ángulo proyectado sobre el plano  $x-z$ .

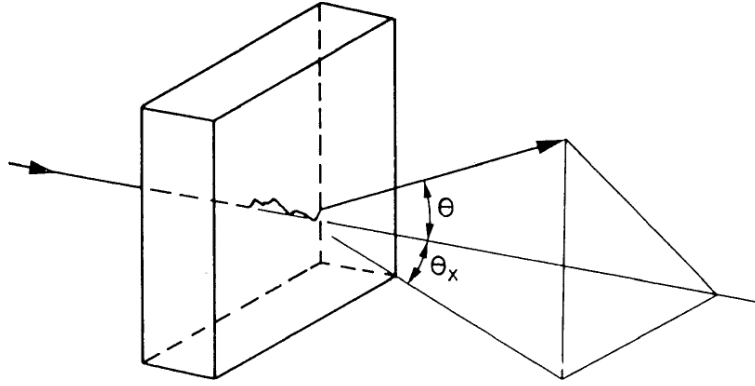


Figura 13. *Scattering* elástica múltiple. (manual de ENELOPE v. 2008 y Fernández-Várea et al.)

Debido a la simetría axial del problema, tenemos que  $\langle \Theta_x \rangle = 0$ , y por tanto la varianza de  $\Theta_x$  será igual a  $\langle \Theta_x \rangle^2$ . Como ya mencionado,  $\Theta_x$  es el resultado de numerosos cambios de dirección diminutos. El teorema del límite central garantiza que en estas condiciones la distribución ha de ser gaussiana, luego:

$$p(\Theta_x, s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\langle \Theta_x \rangle^2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{\Theta_x^2}{\langle \Theta_x \rangle^2}} \quad (87)$$

y una expresión análoga para  $p(\Theta_y, s)$ .

Visto que  $\Theta^2 \approx \Theta_x^2 + \Theta_y^2$  (aproximación de ángulos pequeños) y  $\langle \Theta_x^2 \rangle = \langle \Theta_y^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle \Theta^2 \rangle$ . Luego,

$$p(\Theta, s) = p(\Theta_x, s)p(\Theta_y, s) = \frac{1}{\pi\langle \Theta^2 \rangle} e^{-\frac{\Theta^2}{\langle \Theta^2 \rangle}} \quad (88)$$

Sólo queda por determinar el valor de  $\langle \Theta^2 \rangle$ , que es proporcional al número de colisiones promedio  $s/\lambda$  y al valor esperado de  $\theta^2$  en una colisión:

$$\langle \Theta^2 \rangle = \frac{s}{\lambda} \langle \theta^2 \rangle = s \mathcal{N} \int_{\mathcal{R}^+} \theta^2 \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi\theta d\theta \quad (89)$$

que depende de la sección eficaz diferencial elástica adoptada, por ejemplo la fórmula de Rutherford apantallada relativista.

Considerando que  $\langle \Theta^2 \rangle \propto s$ , puede definirse el *poder de scattering/dispersión*  $T$ :

$$T \equiv \frac{d\langle \Theta^2 \rangle}{ds} \quad (90)$$

que proporciona el incremento de  $\langle \Theta^2 \rangle$  por unidad de recorrido <sup>13</sup>. El modelo gaussiano que presentado es válido para ángulos  $\Theta \ll 1$  rad y está emparentado con el modelo de Fermi-Eyges.

<sup>13</sup>ICRU publica tablas con poderes de dispersión másicos,  $T/\rho$ , para diversos materiales.

**Distribuciones angulares de Goudsmit y Saunderson y de Molière**

Goudsmit y Saunderson obtuvieron en 1940 la siguiente expresión para la distribución angular de un electrón que ha recorrido un trayecto  $s$ :

$$p(\Theta, s) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} e^{-\frac{s}{\lambda_{\ell}}} P_{\ell}(\cos(\Theta)) \quad (91)$$

donde los  $P_{\ell}$  son polinomios de Legendre y

$$\lambda_{\ell} \equiv \mathcal{N} \int_{-1}^1 [1 - P_{\ell}(\cos(\theta))] \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi d(\cos(\theta)) \quad (92)$$

Este resultado es más realista que la aproximación gaussiana, pues es válido para ángulos  $\Theta$  arbitrarios y cualquier sección eficaz diferencial elástica.

La Figura 14 presenta, a modo de ejemplo, las distribuciones angulares de electrones de 1 MeV en Al después de recorrer distancias  $s$  iguales a  $10 \mu\text{m}$  y  $20 \mu\text{m}$  (49.4 y 98.8 colisiones elásticas en promedio, respectivamente).

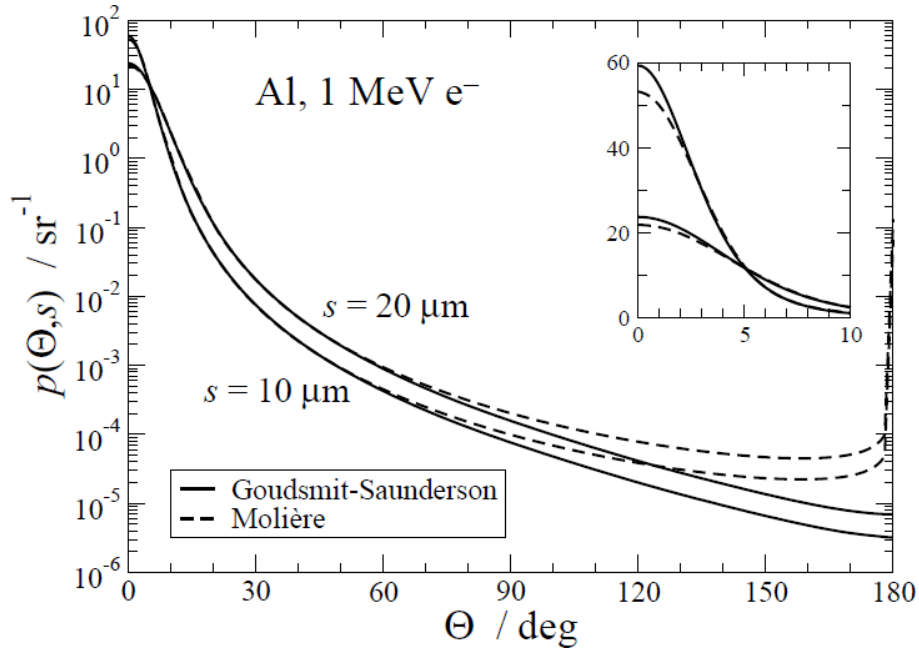


Figura 14. Distribuciones angulares de electrones de 1 MeV tras recorrer  $10 \mu\text{m}$  y  $20 \mu\text{m}$  en Al. Las curvas continuas y a trazos corresponden a las distribuciones de Goudsmit-Saunderson y de Molière, respectivamente.

Las distribuciones de Goudsmit-Saunderson y Molière están en buen acuerdo excepto para ángulos acumulados  $\Theta$  grandes, cuyas probabilidades son muy pequeñas. Obsérvese la patología que presenta la distribución de Molière en  $\theta = 180^\circ$ . También se aprecian discrepancias entre ambos modelos de  $p(\Theta, s)$  para ángulos cercanos a cero, aunque son poco relevantes pues los correspondientes ángulos sólidos son pequeños.

### 1.6.7.. Scattering inelástico múltiple de electrones y positrones

Al igual que en el caso de dispersión elástica múltiple, resulta de interés lograr una descripción global de las colisiones inelásticas que experimenta una partícula cargada al recorrer una distancia  $s$  mucho mayor que el correspondiente recorrido libre medio inelástico (que es pequeño). Se trata de condiciones de *scattering/dispersión inelástico múltiple*. De manera análoga, surge una distribución gaussiana en la pérdida de energía acumulada  $w$ . No obstante se suele simplificar aún más esta descripción, y se adopta la denominada *aproximación de frenado continuo*, que retiene el valor promedio de  $w$  pero desprecia las fluctuaciones estadísticas. Es decir, sólo interesa el valor medio de la gaussiana sin tomar en cuenta la varianza (ni, por supuesto, momentos de orden superior).

La cantidad clave en esta forma de proceder es el *stopping power / poder de frenado*, definido como la pérdida de energía cinética por unidad de recorrido ( $S$ ):

$$S \equiv -\frac{dE}{ds} = \frac{\langle W \rangle}{\lambda} = \mathcal{N} \int_0^E W \frac{d\sigma}{dW} dW \quad (93)$$

En el caso de electrones y positrones, las pérdidas de energía pueden deberse a colisiones inelásticas y a la emisión de Bremsstrahlung, por lo que se definen el *stopping power / poder de frenado de colisión*,  $S_{col}$ , y el de radiación,  $S_{rad}$ , respectivamente. Recordando que  $S_{rad} \approx 0$  para partículas cargadas pesadas.

#### Stopping power de colisión o electrónico

En 1915, previo a la formulación de la mecánica cuántica, Bohr dedujo el poder de frenado de partículas cargadas pesadas suponiendo que los electrones atómicos están ligados armónicamente, obteniendo:

$$S_{col} = \frac{4\pi Z_1^2 q_e^4}{m_e v^2} \mathcal{N} Z_2 \ln \left[ \frac{1,123 m_e v^3}{Z_1 q_e^2 \langle w \rangle} \right] \quad (94)$$

donde la frecuencia angular promedio  $\langle w \rangle$  se define mediante:

$$Z_2 \ln(\langle w \rangle) = \sum_j f_j \ln(w_j) \quad (95)$$

Esta fórmula es válida para partículas  $\alpha$  lentas e iones pesados (incluyendo fragmentos de fisión), pero sobreestima el poder de frenado de electrones, protones e incluso partículas  $\alpha$  rápidas.

Trabajando en el formalismo de la mecánica cuántica,  $S_{col}$  puede calcularse a partir de la expresión 93, con la sección eficaz diferencial  $\frac{d\sigma}{dW}$ . Este procedimiento requiere evaluar la intensidad de oscilador generalizada con las funciones de onda de todos los electrones de los átomos del medio. Como éstas son complicadas de obtener en el caso de un sólido, es más pragmático realizar de entrada simplificaciones que eviten tener que calcularlas.

Hacia 1930, Bethe fue capaz de deducir una expresión analítica para  $S_{col}$  empleando la aproximación de Born con ondas planas, con la hipótesis adicional de que la partícula cargada se mueve mucho más rápido que los electrones atómicos. Este importante resultado, conocido como *fórmula de Bethe* (no-relativista), es:

$$S_{col} = \frac{4\pi Z_1 q_e^2}{m_e v^2} \mathcal{N} Z_2 \ln \left[ \alpha \frac{m_e v^2}{I} \right] \quad (96)$$

donde:

$$\alpha = \begin{cases} 2 & \text{part. cargadas pesadas} \\ 1 & \text{positrones} \\ \sqrt{e/8} \approx 0,583 & \text{electrones} \end{cases} \quad (97)$$

La magnitud más relevante que aparece en esta expresión es la *energía media de excitación, I*, una propiedad de cada sustancia que debe determinarse experimentalmente o mediante la relación:

$$Z_2 \ln(I) = \int_{\mathfrak{R}^+} \frac{df(Q=0, W)}{dW} \ln(W) dW \quad (98)$$

donde  $\frac{df(Q=0, W)}{dW}$  es la intensidad de oscilador óptica.

Nótese la similitud de esta expresión con la ecuación 95. Los valores de *I* para los elementos de la tabla periódica se han representado en la Figura 15. Obsérvese que, salvo oscilaciones características,  $I \approx 10 \times Z_2$  eV para  $Z_2 \geq 15$ . Otro aspecto notable de la fórmula de Bethe es que el poder de frenado depende de la velocidad y la carga de la partícula, pero no de su masa.

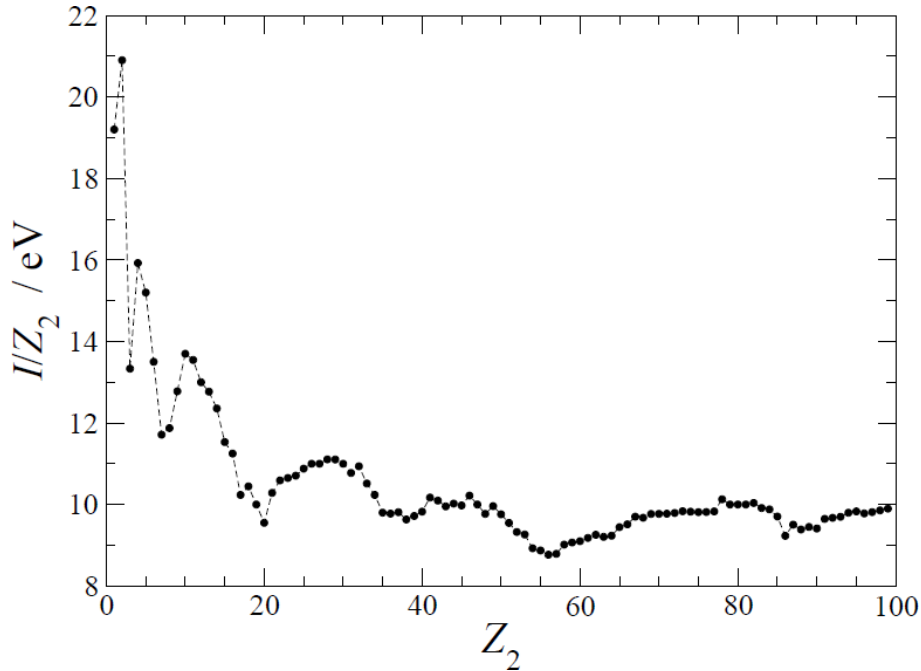


Figura 15. Energías medias de excitación *I* en función del número atómico  $Z_2$  (ICRU 37 *Stopping Powers for Electrons and Positrons*).

La validez de la fórmula de Bethe puede ser extendida a energías mayores y menores incluyendo varios efectos que no son tenidos en cuenta por la expresión 96. Introduciendo  $\mathcal{N}(1)$ , y el radio

clásico del electrón  $r_e$ , la expresión resultante es la *fórmula de Bethe-Bloch* para el poder de frenado másico por colisión de partículas cargadas pesadas.

$$\frac{S_{col}}{\rho} = \frac{K}{\beta^2} \frac{Z_2}{A} Z_1^2 L(\beta) \quad (99)$$

donde:

$$K \equiv 4\pi r_e^2 c^2 / m_u = 0,307 \text{ MeV cm}^2 / \text{g} \wedge L(\beta) = L_0 + Z_1 L_1 + Z_1^2 L_2 + \dots \quad (100)$$

$L(\beta)$  es una función adimensional. El primer término de esta serie es:

$$L_0(\beta) = \ln \left( \frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2}{I} \right) - \beta^2 - \frac{C}{Z_2} - \frac{\delta}{2} \quad (101)$$

e incluye una corrección de capas,  $C/Z_2$ , y una corrección por *efecto de densidad*,  $\delta$ . Los términos  $Z_1 L_1$  y  $Z_1^2 L_2$  extienden el tratamiento más allá de la primera aproximación de Born añadiendo términos de orden superior en la serie de Born.

La corrección por efecto de densidad da cuenta de la reducción del poder de frenado debido a la polarización del medio, más apreciable cuanto mayor es la energía del proyectil como muestra la Figura 16.

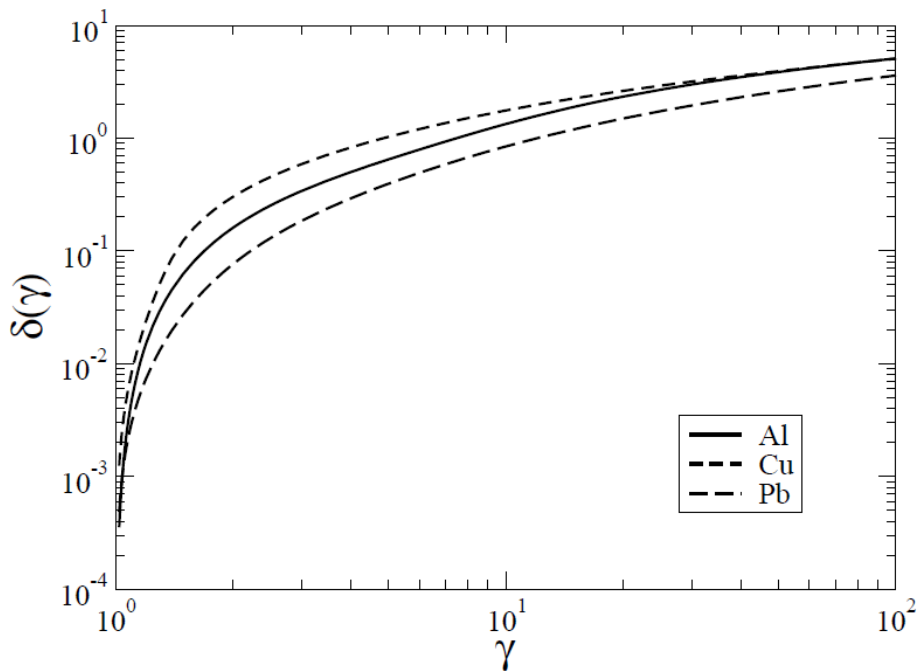


Figura 16. Efecto de densidad de Al, Cu y Pb (ICRU 37 *Stopping Powers for Electrons and Positrons*).

Vale la pena indicar que, dada una sustancia,  $\delta$  sólo depende de la velocidad de la partícula cargada o, equivalentemente, del factor relativista  $\gamma$ .

El término  $Z_1 L_1$  se conoce como corrección de Barkas, y origina diferencias en el poder de frenado de partículas de carga opuesta (como por ejemplo un protón y un antiprotón). Este fenómeno fue observado por Barkas y colaboradores en los años cincuenta. Varios autores han evaluado  $Z_1 L_1$  teóricamente, aunque los valores de Ashley, Ritchie y Brandt son los más usados. El término  $Z_1^2 L_2$  resulta de una extensión de la fórmula de Bethe debida a Bloch, por lo que se le denomina corrección de Bloch. Incorpora, de modo aproximado, la perturbación de las funciones de onda de los electrones atómicos causada por el proyectil incidente. Este término puede ser escrito en la forma:

$$Z_1^2 L_2 = -y^2 \sum_{n=1}^{\infty} [n(n^2 + y^2)]^{-1} \quad (102)$$

con  $y \equiv Z_1 v_0/v = Z_1 \alpha/\beta$ .  $Z_1^2 L_2 \approx 0$  si  $y \ll 1$ , mientras que para  $y \approx 1$  es

$$Z_1^2 L_2 \approx -c_E - \ln(y) \quad (103)$$

donde  $c_E = 0,577216\dots$  es la constante de Euler.

Sumando este valor asintótico al límite no-relativista de la ecuación 101 (con  $C/Z_2 = 0$  y  $\delta = 0$ ) se recupera la expresión clásica de Bohr para el poder de frenado.

### Stopping power de iones vestidos

En el caso de partículas cargadas pesadas positivas, sólo si viajan con velocidades elevadas pueden ser considerados como iones desnudos de carga  $Z_1$ . En cambio conforme se van frenando aumenta la probabilidad de capturar electrones del medio atravesado; el ión viaja entonces parcial o totalmente apantallado. El estado de carga promedio  $\langle \mathcal{Q} \rangle$  es el resultado del equilibrio dinámico entre estos procesos de captura y pérdida de electrones. Una expresión muy empleada para  $\langle \mathcal{Q} \rangle$  es la debida a Northcliffe:

$$\langle \mathcal{Q} \rangle = Z_1 \left[ 1 - e^{-\frac{v}{v_0 Z_1^{2/3}}} \right] \quad (104)$$

donde  $v_0$  es la velocidad de Bohr.

La Figura 17 se presenta los estados de carga promedio de varios iones ligeros en función de su velocidad, calculados con la ecuación 104. Puede observarse que  $\langle \mathcal{Q} \rangle \rightarrow 0$  cuando  $v \rightarrow 0$ , mientras que  $\langle \mathcal{Q} \rangle \rightarrow Z_1$  si  $v \gg v_0 Z_1^{2/3}$ .

Para tener en cuenta este fenómeno, en la fórmula de Bethe-Bloch, se suele reemplazar  $Z_1$  por una carga efectiva  $Z_1^*(v) \leq Z_1$  que reduce el poder de frenado electrónico. Tomar  $Z_1^*(v) = \langle \mathcal{Q} \rangle$  es una buena aproximación, siempre y cuando  $Z_1$  no sea demasiado grande.

ICRU ha publicado tablas con valores recomendados de  $S_{col}/\rho$  para protones y partículas  $\alpha$ ; estos valores pueden generarse fácilmente empleando los programas *pstar* y *astar*, respectivamente. A modo de ejemplo, la Figura 18 muestra los poderes de frenado máxicos electrónicos de protones y partículas  $\alpha$  en Al, Cu y Pb. Recientemente ICRU también ha proporcionado tablas de  $S_{col}/\rho$  para iones comprendidos entre el Li y el Ar.

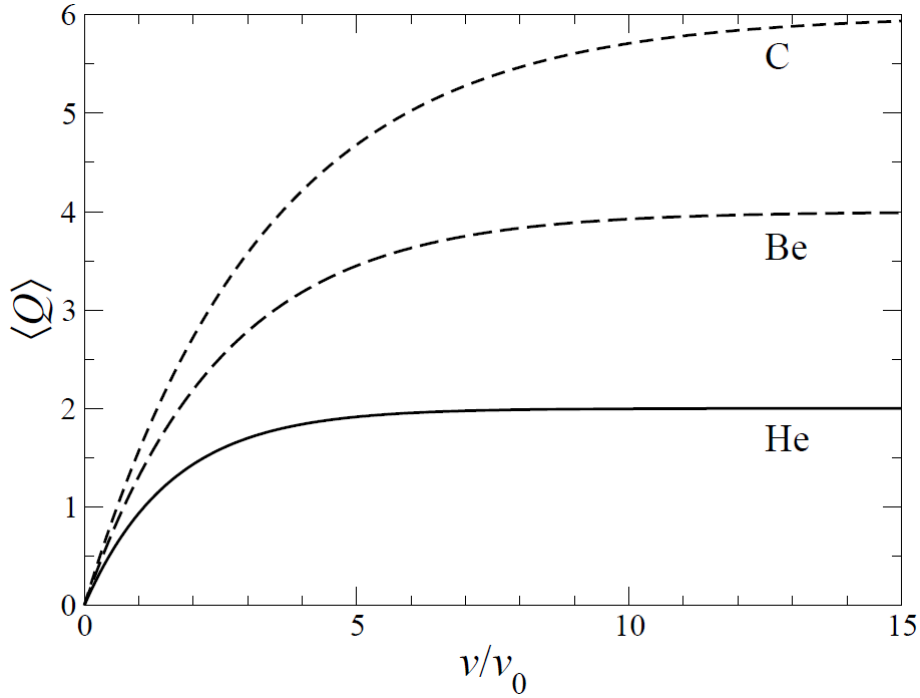


Figura 17. Estado de carga promedio de iones de He, Be y C en función de su velocidad, calculado con la ecuación 104.

### Stopping power de electrones y positrones

El *stopping power* por colisión de electrones y positrones relativistas está dado por:

$$S_{col} = \mathcal{N}Z_2 \frac{2\pi q_e^4}{m_e c^2 \beta^2} \left[ \ln \left( \frac{E^2 \gamma + 1}{I^2} \frac{\gamma + 1}{2} \right) + f^\pm(\gamma) - \delta \right] \quad (105)$$

Con:

$$f^-(\gamma) = \gamma^{-2} \left[ 1 - (2\gamma - 1) \ln(2) + \frac{1}{8} (\gamma - 1)^2 \right] \quad (106)$$

$$f^+(\gamma) = 2 \ln(2) - \frac{1 - \gamma^{-2}}{12} \left[ 23 + \frac{14}{\gamma + 1} + \frac{10}{(\gamma + 1)^2} + \frac{4}{(\gamma + 1)^3} \right] \quad (107)$$

ICRU ha publicado tabulaciones extensas con valores recomendados de  $S_{col}/\rho$  para numerosos materiales. La Figura 18 muestra los poderes de frenado máxicos por colisión de electrones en Al, Cu y Pb. Los valores de  $S_{col}/\rho$  han sido obtenidos empleando el programa *estar*.

### Regla de Bragg-Kleeman

Cuando el medio por el que se propagan las partículas cargadas es un compuesto o una mezcla, en las expresiones de  $S_{col}$  debe emplearse el valor de  $I$  determinado experimentalmente para la



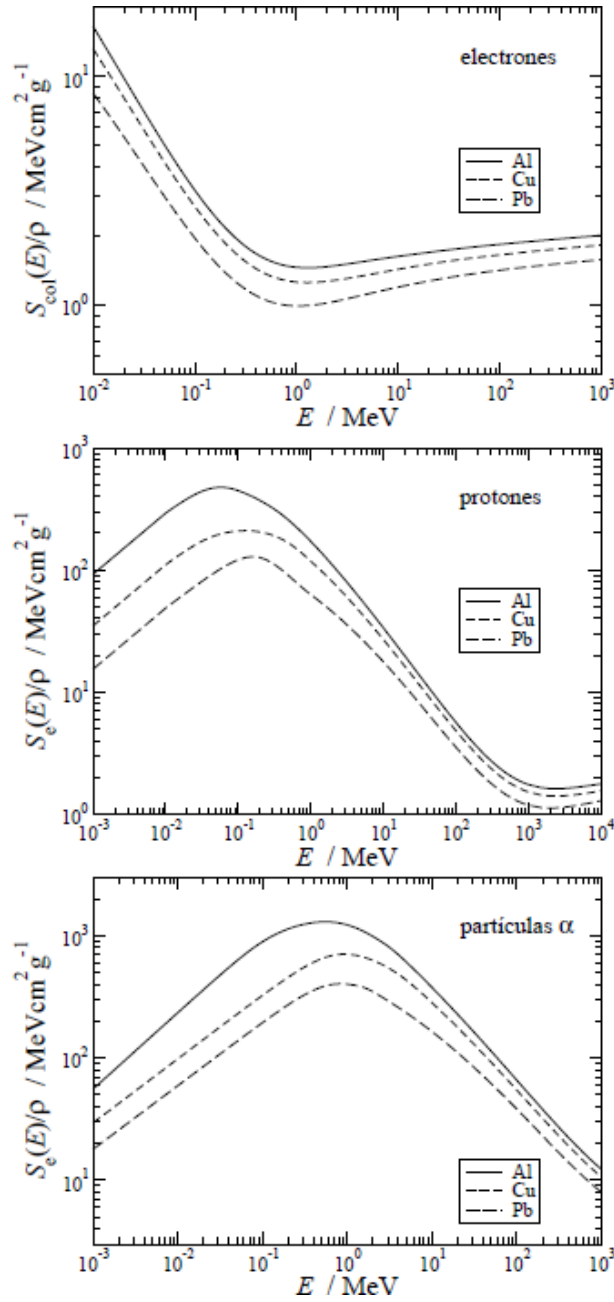


Figura 18. Poder de frenado másico por colisión de electrones, protones y partículas  $\alpha$  en Al, Cu y Pb.

sustancia en cuestión. Cuando esto no es posible por desconocerse  $I$  procederemos, análogamente al caso de fotones, haciendo:

$$\frac{S_{col}}{\rho} = \sum_j w_j \left( \frac{S_{col}}{\rho} \right)_j \quad (108)$$

indicando  $w_j$  la fracción en peso del elemento  $j$ -ésimo. Como  $S_{col}/\rho(Z/A)\ln(I)$  (cuando el ión es suficientemente rápido), esta regla equivale a definir:

$$\langle Z/A \rangle = \sum_j w_j \left( \frac{Z_j}{A_j} \right) \quad (109)$$

$$\langle Z/A \rangle \ln(I) = \sum_j w_j \left( \frac{Z_j}{A_j} \ln(I_j) \right) \quad (110)$$

Esta manera de estimar el valor de  $I$  se conoce como *regla de Bragg-Kleeman* y, al igual que en el caso de la aditividad de coeficientes de atenuación másicos, no tiene en cuenta los efectos de agregación del medio.

### Stopping Power de radiación (o radiativo)

A energías elevadas la emisión de radiación de frenado acaba siendo responsable de la mayor parte de pérdidas de energía de electrones y positrones. El programa *estar* permite generar tablas con los poderes de frenado másicos radiativos de estas partículas que son idénticas a la publicadas por ICRU. La Figura 19 reporta los valores para electrones en Al, Cu y Pb.

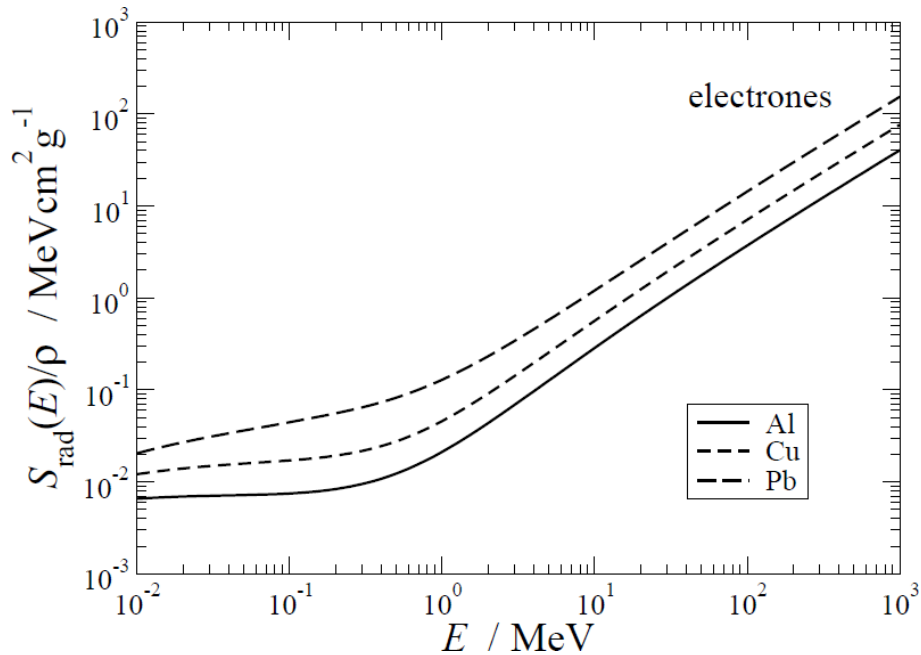


Figura 19. Poder de frenado másico por radiación de electrones en Al, Cu y Pb

Obsérvese que  $S_{rad} \propto E$  para energías por encima de unos pocos MeV.

### Rango de partículas cargadas

En la aproximación de frenado continuo (*Continuous Slowing Down Approximation - CSDA*) se asume que las partículas cargadas pierden energía de una forma gradual, a un ritmo dictado por el poder de frenado. La distancia que recorren desde que poseen una cierta energía cinética hasta quedar en reposo se denomina *rango* o *alcance* de CSDA y será igual para todas ellas (pues se ha despreciado el carácter estocástico de las colisiones inelásticas). El rango  $r_0$  se calcula mediante la expresión:

$$r_0(E) \equiv \int_0^s ds' = \int_0^E \frac{dE'}{-\frac{dE'}{ds}} = \int_0^E \frac{dE'}{S(E')} \quad (111)$$

donde  $S$  es el poder de frenado total, incluyendo las contribuciones de colisión y radiativa (esta última sólo en el caso de electrones y positrones). La Figura 20 presentado el rango máasico de electrones, protones y partículas  $\alpha$  en Al, Cu y Pb.

### Rendimiento radiativo de electrones y positrones

El *rendimiento radiativo*  $Y(E)$  es la fracción de la energía inicial  $E$  de un electrón (o positrón) que es convertida en Bremsstrahlung durante su frenado. En la aproximación de frenado continuo está dado por:

$$Y(E) = \frac{1}{E} \int_0^E \frac{S_{rad}(E')}{S_{col}(E') + S_{rad}(E')} dE' \quad (112)$$

Tablas con los rendimientos radiativos de todos los elementos pueden encontrarse en literatura; los mismos valores pueden generarse con el programa *estar*. La Figura 21 muestra que  $Y(E)$  de electrones varía entre 0 y valores cercanos a 1, aumentando con la energía, y siendo mayores para los materiales de número atómico elevado. Esto último es debido a que aproximadamente  $S_{col} \propto Z_2$ , mientras que  $S_{rad} \propto Z_2^2$ .

## 1.7.. Radiación fluorescente: rayos X característicos y electrones Auger

La ionización de capas atómicas internas puede producirse por interacciones de fotones (efecto fotoeléctrico o Compton) o por impacto de partículas cargadas. Tras la ionización tiene lugar la relajación atómica, es decir, el exceso de energía del ión excitado residual se emite isótrópicamente en forma de radiación uorescente. Ésta comprende los rayos X característicos y los electrones Auger.

### Rayos X característicos

Si la vacante en la capa atómica interna se “llena” con un electrón proveniente de capas menos ligadas y la diferencia de energías se emite en forma de un fotón (rayo X característico), la transición se denomina radiativa. Las transiciones que respetan las reglas de selección  $\Delta\ell = \pm 1$  y  $j = 0, \pm 1$  están “permitidas” (a primer orden de teoría de perturbaciones) y son muy probables; de lo contrario están fuertemente inhibidas (son “prohibidas”). La energía del fotón vendrá dada aproximadamente por  $E_X \approx U_X - U_Y$ , donde  $X$  es la (sub)capa donde se produjo la vacante e  $Y$  la (sub)capa de la que proviene el electrón que realiza la transición, respectivamente.

Las notaciones clásica (de Siegbahn) y moderna (IUPAC) de los rayos x característicos se indican en la Figura 22 para las principales líneas  $K$  y  $L$ .

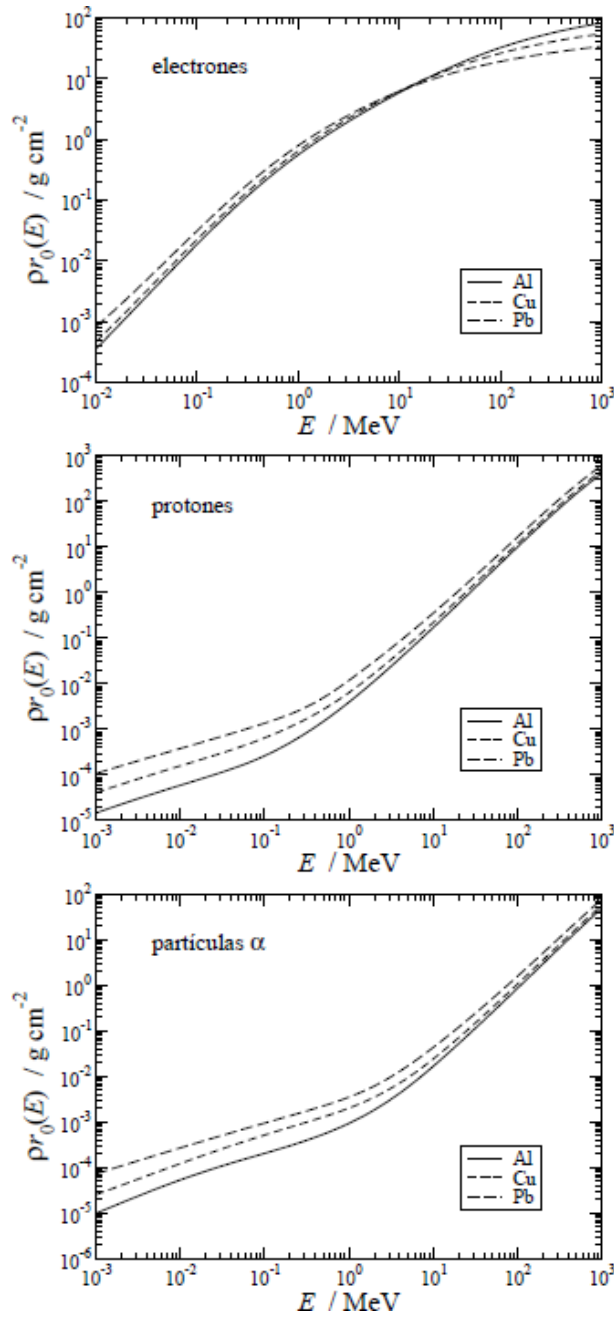


Figura 20. Rango másico (en la aproximación de frenado continuo) de electrones, protones y partículas  $\alpha$  en Al, Cu y Pb.

La probabilidad  $w_i$  de que tras producirse una vacante en la capa  $i$ -ésima el átomo emita un rayo X característico se denomina rendimiento de uorescencia;  $w_i(Z)$  es una función creciente.

### Electrones Auger

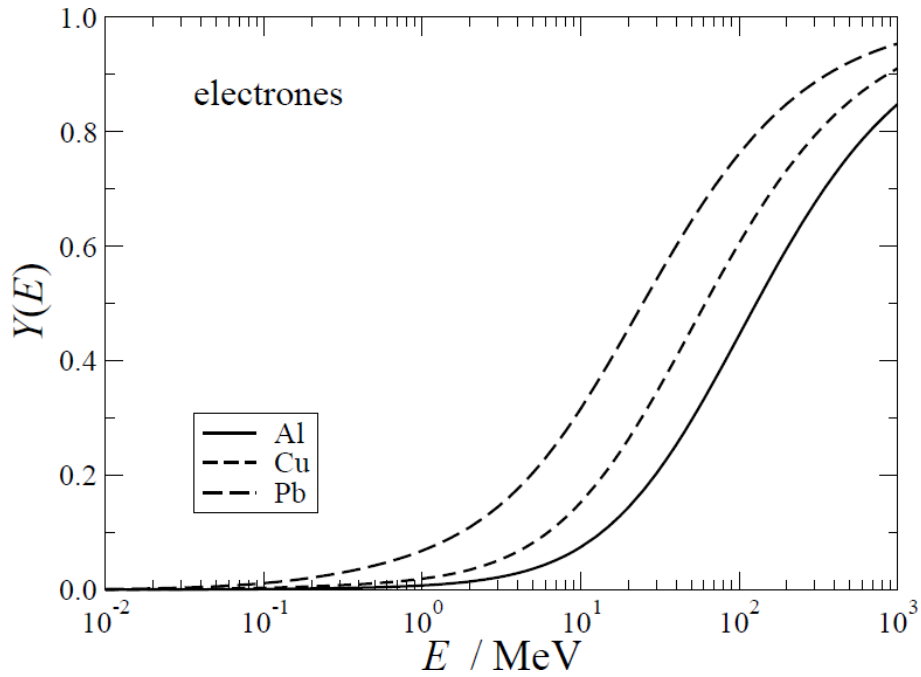


Figura 21. Rendimiento radiativo de electrones en Al, Cu y Pb en función de la energía.

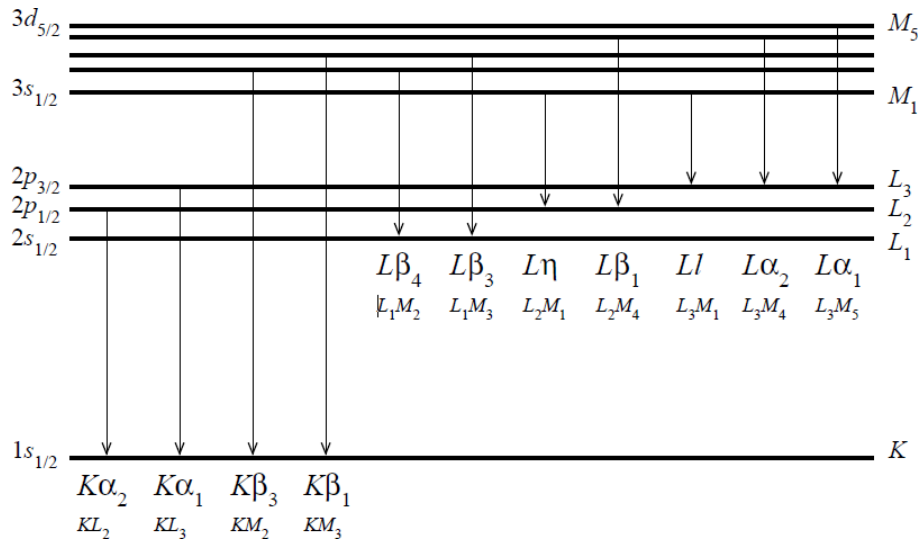


Figura 22. Notaciones de Siegbahn e IUPAC de los rayos X característicos de las líneas K y L más importantes.

En algunos casos la energía del electrón que efectúa la transición de Y a X se entrega a otro electrón, inicialmente en la subcapa Z que es liberado con energía cinética  $\epsilon_e \approx U_X - U_Y - U_Z$ . La emisión de electrones Auger es por tanto un proceso no radiativo. Por razones históricas, cuando la transición la efectúa un electrón de la misma capa en la que está la vacante original, el proceso se denomina Coster-Kronig. Si el electrón liberado también es de la misma capa, el proceso se llama

super Coster-Kronig. Después de una transición no radiativa el átomo queda con una vacante más.

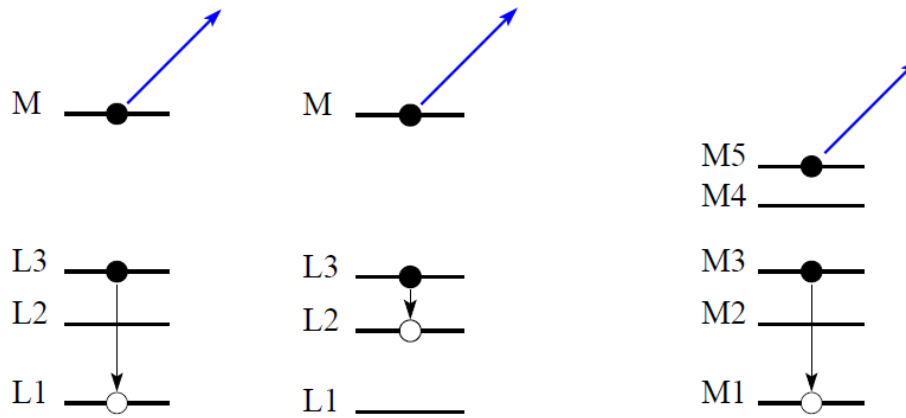


Figura 23. Ejemplos de transiciones Coster-Kronig  $L_1L_3M$ ,  $L_2L_3M$  y super Coster-Kronig  $M_1M_3M_5$ .

La Figura 24 muestra las probabilidades de las transiciones no radiativas (KYZ) y radiativas (KY) que ocurren tras producirse una vacante en la capa  $K$ , *i.e.*  $a_K$  y  $w_K$ , respectivamente. Como puede verse, la emisión de electrones Auger predomina para números atómicos bajos, mientras que para valores de  $Z$  intermedios o grandes es más probable la emisión de rayos  $X$  característicos, sobre todo  $K_{\alpha 1}$ . Las probabilidades han sido extraídas de la base de datos EADL.

### 1.8.. Interacción de los neutrones con la materia: Conceptos básicos

Al igual que el fotón, el neutrón carece de carga eléctrica, y por lo tanto no experimenta interacciones Coulombianas con los núcleos y electrones del medio atravesado. Su principal forma de interacción es mediante la fuerza fuerte con los núcleos. Como la fuerza fuerte es de muy corto alcance y los núcleos ocupan un volumen minúsculo en comparación con el tamaño atómico, no es de extrañar que los neutrones sean partículas muy penetrantes. Se les considera, junto con los fotones, radiación indirectamente ionizante. Por otro lado el neutrón posee una masa en reposo similar a la del protón, y es una partícula inestable, con un período de unos 10.6 min.

Los neutrones pueden experimentar diversos procesos nucleares, principalmente dispersiones elásticas y reacciones de absorción. Debido a la considerable dependencia con la energía de tales interacciones, es habitual clasificar a los neutrones atendiendo a su energía cinética:

térmicos	$E \approx 25meV$
epitérmicos	$E \sim 1eV$
lentos	$E \sim 1keV$
rápidos	$E \approx 100keV - 10MeV$

Cuadro 1. Denominación de los neutrones.

Análogamente al caso de los fotones, un haz de neutrones monoenergéticos bien colimado se atenúa siguiendo la denominada ley de atenuación exponencial. El coeficiente de atenuación másico

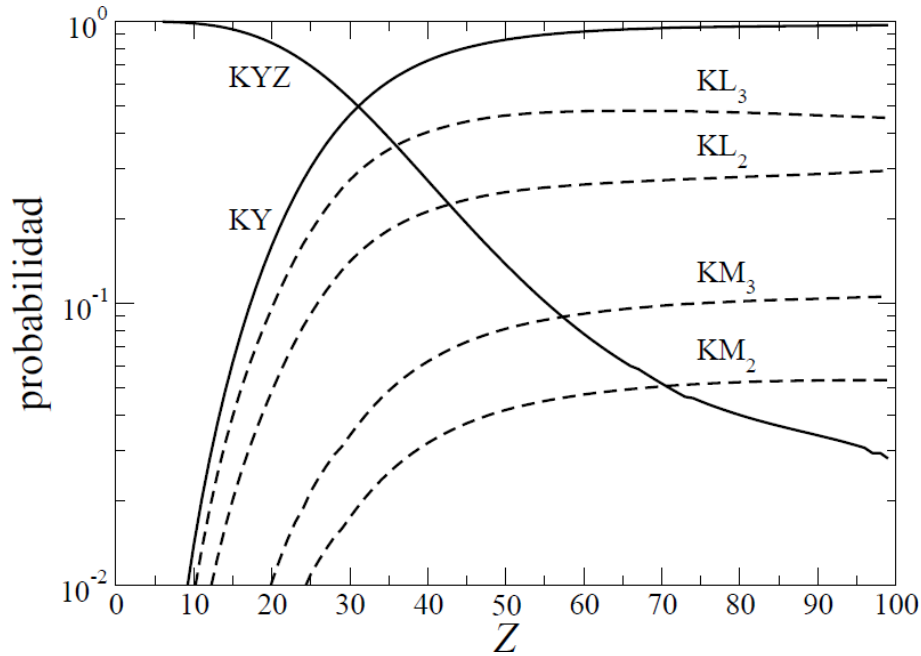


Figura 24. Las curvas continuas representan las probabilidades de las transiciones no radiativas (KYZ) y radiativas (KY) consecuencia de una vacante en la capa K, mientras que las curvas a trazos indican las transiciones radiativas más probables (KL<sub>2</sub>, KL<sub>3</sub>3 KM<sub>2</sub> y KM<sub>3</sub>).

también se define mediante la ecuación 63, aunque ahora  $\sigma_i$  son las secciones eficaces de los distintos mecanismos de interacción de los neutrones.

### Scattering elástico de n<sup>0</sup>

Considerando una colisión elástica entre un neutrón con energía cinética  $E_0$  y un núcleo blanco de número másico  $A$  inicialmente en reposo. Como la colisión es elástica, el neutrón cambia de dirección sin modificar el estado cuántico del núcleo blanco. Aunque se conserva la energía cinética en el sistema de referencia del centro de masas, la energía final  $E$  del proyectil es menor que  $E_0$  (tanto  $E_0$  como  $E$  están referidas al sistema de referencia del laboratorio). De hecho las colisiones elásticas son las principales responsables del frenado de los neutrones rápidos, proceso que se suele denominar *moderación*. Empleando las leyes de conservación de momento lineal y energía cinética es fácil ver que:

$$\frac{E_0}{E} = \frac{A^2 + 1 + 2A \cos(\theta_{cm})}{(A + 1)^2} \tag{113}$$

donde  $\theta_{cm}$  es el ángulo de dispersión del neutrón en el sistema de referencia del centro de masas; en esta sección las masas se expresan en unidades de la masa del neutrón. Cuando no hay dispersión ( $\theta_{cm} = 0^\circ$ ) se tiene que  $(E/E_0)_{\text{máx}} = 1$ . La mayor pérdida de energía ocurre en colisiones frontales ( $\theta_{cm} = 180^\circ$ ), con lo que:

$$\left(\frac{E_0}{E}\right)_{\text{mín}} = \left(\frac{A - 1}{A + 1}\right)^2 \equiv \alpha \tag{114}$$

En consecuencia los valores permitidos de  $E/E_0$  están comprendidos en el intervalo  $(\alpha, 1)$ . Obsérvese que cuando la dispersión tiene lugar con un átomo de hidrógeno ( $A = 1$ ), el neutrón puede ceder toda su energía al protón pues  $\alpha = 0$  (lo mismo sucede en un choque frontal de dos bolas de billar de igual masa). En general los mejores moderadores de neutrones son sustancias con  $A$  bajo (hidrógeno, deuterio, agua, agua pesada, grafito, parafina, etc).

En el caso de neutrones con energías de unos 10 MeV e inferiores, la sección eficaz diferencial elástica en el sistema de referencia del centro de masas es prácticamente isotrópica. Entonces la probabilidad  $dp_1$  de dispersión hacia el ángulo sólido  $d\Omega_{cm}$  es simplemente:

$$dp = \frac{d\Omega_{cm}}{4\pi} = \frac{2\pi \sin(\theta_{cm}) d\theta_{cm}}{4\pi} \quad (115)$$

Derivando la expresión 113:

$$\frac{dE}{dE_0} = \frac{2A}{(A+1)^2} \sin(\theta_{cm}) d\theta_{cm} \quad (116)$$

Y combinando las dos últimas ecuaciones, se obtiene:

$$p_1(E) \equiv \frac{dp}{dE} = \frac{(A+1)^2}{4A} \frac{1}{E_0} = \frac{1}{(1-\alpha)E_0} \quad (117)$$

Los valores de  $E$  en una colisión están uniformemente distribuidos en el intervalo  $(\alpha E_0, E_0)$ . Este resultado puede ser utilizado para evaluar, de forma iterativa, la distribución de energía  $p_n(E)$  después de  $n \geq 2$  colisiones; las expresiones analíticas para  $n = 2$  y 3 pueden encontrarse en literatua. Después de  $n$  colisiones los valores de  $E$  están comprendidos en el intervalo  $(\alpha^n E_0, E_0)$ .

La Figura 25 muestra las distribuciones  $p_n(E)$  de neutrones cuya energía inicial es de 1 MeV tras experimentar entre 1 y 10 colisiones elásticas con núcleos de  $^{12}\text{C}$ .

En este punto surge la pregunta de cuántas colisiones elásticas hacen falta en promedio para reducir la energía de un neutrón desde  $E_0$  hasta un valor dado  $E$ . Este número de colisiones,  $\bar{n}(E)$ , se puede estimar fácilmente si primero se define:

$$\begin{aligned} \xi(E) &\equiv \left\langle \ln \left( \frac{E_0}{E} \right) \right\rangle = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{cm} \ln \left[ \frac{(A+1)^2}{A^2 + 1 + 2A \cos(\theta_{cm})} \right] \\ &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos(\theta_{cm})) \ln \left[ \frac{(A+1)^2}{A^2 + 1 + 2A \cos(\theta_{cm})} \right] \end{aligned} \quad (118)$$

El resultado de esta integral es:

$$\xi(E) = 1 + \frac{(A-1)^2}{2A} \ln \left( \frac{A-1}{A+1} \right) = 1 + \frac{\alpha \ln(\alpha)}{1-\alpha} \quad (119)$$

que no depende de la energía del neutrón. En cada colisión  $\langle \ln(E) \rangle$  decrece en  $\xi$ , y después de  $\bar{n}$  colisiones será:



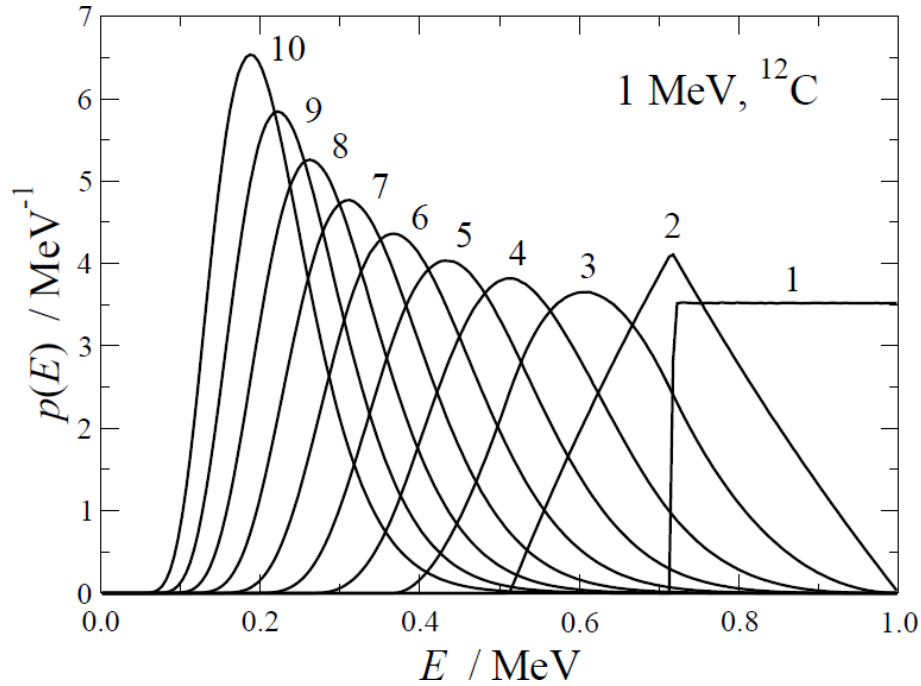


Figura 25. Distribuciones de energía de neutrones después de 1, 2,  $\dots$ , 10 colisiones elásticas con núcleos de  $^{12}\text{C}$  ( $\alpha = 0.716$ ). La energía inicial es  $E_0 = 1$  MeV.

$$\ln(E) = \ln(E_0) - \bar{n}\xi \quad (120)$$

De donde se obtiene:

$$\bar{n} = \xi^{-1} \ln(E_0/E) \quad (121)$$

### Scattering inelástico, reacciones nucleares y captura radiativa de $n^0$

Las colisiones inelásticas ( $n, n'$ ) dejan al núcleo en un estado excitado, que posteriormente puede decaer mediante la emisión de un fotón. Como el neutrón debe tener energía suficiente para excitar al núcleo, la sección eficaz es cero por debajo de una energía umbral del orden de 1 MeV.

Los neutrones también pueden interactuar con los núcleos mediante un amplio abanico de reacciones nucleares. Los procesos con mayor probabilidad son las reacciones de tipo ( $n, p$ ), ( $n, \alpha$ ), ( $n, d$ ), etc, en las que el neutrón incidente arranca del núcleo blanco uno o más nucleones. Además son posibles reacciones ( $n, \gamma$ ), denominadas captura radiativa. Las secciones eficaces de estos procesos son en general proporcionales a  $v^{-1}$ , lo cual favorece tales mecanismos en el caso de neutrones con velocidad pequeña. A este comportamiento suave se le superpone un número variable de resonancias, intervalos de energía estrechos en los que la sección eficaz pasa por un máximo pronunciado. Estos picos están relacionados con la gran estabilidad del núcleo compuesto que se forma al ser absorbido el neutrón. Por último, la fisión nuclear por neutrones térmicos es viable para nucleidos con  $A$  muy elevado.

# **MÓDULO II**

## **Medidas de radiación**

---

## 2.. Módulo II: Medidas de radiación

El *Capítulo 2.* está orientado a exponer una breve introducción a los conceptos básicos sobre cantidades involucradas en dosimetría de radiaciones así como consideraciones sobre los principios y teorías de las cuales derivar las cantidades dosimétricas así como las condiciones que deben satisfacerse para la validez de los modelos.

### 2.1.. Transporte de radiación e interacciones

Para facilitar la exposición, se iniciará el desarrollo en términos de las propiedades de haces de fotones. La generalización a otro tipo de radiación es posible incorporando las particularidades de cada caso, pero conceptualmente el desarrollo es análogo. Sin embargo, cuando corresponda, se hará mención explícita a situaciones específicas que requieran tratamiento particular para otro tipo de radiación.

El principio básico para estudiar los efectos de la interacción de la radiación con la materia, requiere describir el modo en que se transfiere y absorbe energía del haz al medio material. El transporte de partículas en un medio material está descrito por la ecuación de transporte de Boltzmann, que vincula la fluencia de energía emitida por una fuente con las propiedades físicas del medio irradiado de modo que puedan determinarse los mecanismos por los que la energía es impartida y depositada (difundida) en el material.

La ecuación de transporte de radiación de Boltzmann representa, en términos matemáticos, una ecuación integro-diferencial de difusión. A continuación se realiza una breve exposición del formalismo de Boltzmann, con el fin de completitud, pero no se trata de un argumento que requiera especial profundización para los objetivos de este curso.

Existen diferentes maneras en que se produce la interacción entre el haz incidente y el medio irradiado. La probabilidad de que ocurra una interacción de un cierto tipo está físicamente determinada por la sección eficaz  $\sigma_j$ , referida al  $j$ -ésimo mecanismo de interacción. Análogamente, la probabilidad total de que se produzca una interacción (de cualquier tipo) está determinada por la sección eficaz total  $\sigma$ .

A nivel macroscópico, la sección eficaz total macroscópica  $\Sigma$  se define mediante:

$$\Sigma \equiv N \sigma \quad (122)$$

donde  $N$  es la densidad de centros de dispersión por unidad de volumen, *i.e.*  $[N] = \text{cm}^{-3}$ .

En vista que los procesos de interacción incluyen absorción y dispersión (*scattering*) de radiación, conviene escribir en modo explícito la dependencia en cada tipo de proceso. Por lo tanto, se tiene:

$$\Sigma = \Sigma_{abs} + \Sigma_{sca} \quad (123)$$

donde  $\Sigma_{abs}$  y  $\Sigma_{sca}$  se refieren a los procesos de absorción y *scattering*, respectivamente.

Así mismo puede determinarse la distribución de colisiones a lo largo del recorrido (*path*) de la partícula:

$$\frac{dn}{ds} = -\Sigma n \quad (124)$$

donde  $n$  representa el número de eventos y  $s$  es la distancia a lo largo del *path*.

De aquí es inmediato verificar:

$$n(s) = n(0) e^{-\Sigma s} \quad (125)$$

Por lo tanto, la distancia promedio entre colisiones sucesivas está dada por:

$$\lambda \equiv \frac{\int_0^{\infty} s e^{-\Sigma s} ds}{\int_0^{\infty} e^{-\Sigma s} ds} = \frac{1}{\Sigma} \quad (126)$$

La cantidad  $\lambda$  se denomina camino libre medio (*mean free path*). De aquí se pone de manifiesto la importancia de la sección eficaz y del *mean free path*, que se determinan de acuerdo con el momento de primer orden de la función de distribución.

Una partícula de momento  $p$  con longitud de onda  $\frac{h}{p}$  transportada en un medio material de espesor  $x$  tal que  $x \ll \frac{h}{p}$  estará completamente determinada (en su espacio de fase) por la posición  $\vec{r}$ , la dirección de movimiento  $\vec{\Omega}$ , la energía  $E$  y el tiempo  $t$ .

Sea  $N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$  la densidad angular de partículas en estados de fase (7D)  $[(x, y, z); (\theta, \phi); E; t]$ , que representa la densidad de partículas en el volumen  $d\vec{r}$  alrededor de  $\vec{r}$ , viajando en direcciones  $d\vec{\Omega}$  entorno a  $\vec{\Omega}$  con energía  $E$  a tiempo  $t$ .

El flujo vectorial angular de partículas  $\vec{\Psi}$  puede obtenerse a partir de la densidad angular y la velocidad  $\vec{v}$  de las partículas:

$$\vec{\Psi} \equiv \vec{v} N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \quad (127)$$

El flujo angular escalar (o simplemente flujo angular)  $\Psi$  se obtiene a partir de la expresión 127, y sus unidades son  $cm^{-2} s^{-1} str^{-1}$ .

Integrando el flujo angular  $\Psi$  en todas direcciones para valores dados de  $E$ ,  $\vec{r}$  y  $t$  se obtiene una cantidad proporcional a la tasa de población-ocupación del estado  $(\vec{r}, R, t)$ , a veces denominado tasa de “reacción” o “creación”. A partir de esto, puede determinarse el flujo escalar (o simplemente flujo)  $\phi$  dado por:

$$\phi \equiv \int_{4\pi} \Psi d\Omega \quad (128)$$

La tasa de ocurrencia de eventos (por unidad de volumen), en términos de la probabilidad de cada  $j$ -ésimo tipo de interacción  $R$  queda determinada por:

$$R \equiv \Sigma_j \phi \quad (129)$$

La fluencia angular se obtiene a partir de la integral en el tiempo del flujo, y representa el número total de partículas por unidad de área por unidad de energía atravesando el punto  $\vec{r}$  con dirección  $d\Omega$  entorno a  $\Omega$ .

Así mismo, puede calcularse la fluencia escalar (o fluencia total)  $J(\vec{r}, E, t)$  que resulta de integrar la fluencia angular para todas las direcciones posibles:

$$J = |\vec{J}(\vec{r}, E, t)| = \int_{4\pi} |\vec{v} N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)| d\vec{\Omega} \cdot \hat{n} \quad (130)$$

donde  $|\vec{J}|$  es la corriente de partículas y  $\hat{n}$  representa un versor en dirección arbitraria para el cálculo de la fluencia escalar  $J$ .

A partir de esto, puede plantearse la ecuación de transporte de radiación de Boltzmann, dada por:

$$\frac{1}{|\vec{v}|} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Psi - S = \iint_{4\pi} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) K(\vec{r}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) dE' d\vec{\Omega}' \quad (131)$$

donde  $S$  es la fuente de radiación y  $K(\vec{r}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E)$  es el operador del kernel que cambia el estado de fase de las “coordenadas” primadas  $(\vec{\Omega}', E')$  a las sin primar  $(\vec{\Omega}, E)$  debido a los procesos de *scattering* en la posición  $\vec{r}$ .<sup>14</sup>

<sup>14</sup>Nótese que el efecto de la interacción es un cambio en la energía y en la dirección de movimiento!

Operando y reordenando los términos en la ecuación de Boltzmann 131, resulta:

$$\begin{aligned} t &= t_0 + \frac{s}{|\vec{v}|} \\ \vec{r} &= \vec{r}_0 + s\vec{\Omega} \end{aligned} \quad (132)$$

Por lo tanto, se obtiene:

$$\frac{d}{ds} \Psi \left( \vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E, t_0 + \frac{s}{|\vec{v}|} \right) + \Sigma \Psi \left( \vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E, t_0 + \frac{s}{|\vec{v}|} \right) = \Gamma \left( \vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E, t_0 + \frac{s}{|\vec{v}|} \right) \quad (133)$$

donde se ha definido  $\Gamma \left( \vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E, t_0 + \frac{s}{|\vec{v}|} \right)$  como sigue:

$$\Gamma \equiv S + \iint \Sigma_s \left( \vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, (\vec{\Omega}', E') \rightarrow (\vec{\Omega}, E) \right) \Psi \left( \vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}', E', t_0 + \frac{s}{|\vec{v}|} \right) d\vec{\Omega}' dE' \quad (134)$$

Puede verse<sup>15</sup>

$$\Psi \left( \vec{r}_0, \vec{\Omega}, E, t_0 \right) = \int_{-\infty}^0 ds \left[ e^{\int_0^s \Sigma(\vec{r}_0 - s'\vec{\Omega}, E) ds'} \Gamma \left( \vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E, t_0 + \frac{s}{|\vec{v}|} \right) \right] \quad (135)$$

Considerando que las variables  $\vec{r}_0$  y  $t_0$  son arbitrarias, se obtiene:

$$\begin{aligned} \Psi \left( \vec{r}, \vec{\Omega}, E, t \right) &= \int_0^{\infty} e^{\int_0^s \Sigma(\vec{r}_0 - s'\vec{\Omega}, E) ds'} . \\ \left[ \iint \Sigma_s \left( \vec{r} - s\vec{\Omega}, (\vec{\Omega}', E') \rightarrow (\vec{\Omega}, E) \right) \Psi \left( \vec{r} - s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E, t - \frac{s}{|\vec{v}|} \right) + S \left( \vec{r} - s'\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E, t \right) \right] \end{aligned} \quad (136)$$

Es decir, se obtuvo una forma integral para la ecuación de Boltzmann, que puede escribirse en término de operadores<sup>16</sup>:

$$\Psi = \mathbf{K} \Psi + S' \quad (137)$$

Se obtiene la solución para el flujo:

$$\Psi = \sum_{i=0}^{\infty} \Psi_i \quad (138)$$

Donde los términos son:

$$\begin{aligned} \Psi_i &= \mathbf{K} \Psi_{i-1} \\ \Psi_0 &= S' \end{aligned} \quad (139)$$

Matemáticamente, la solución obtenida se denomina serie de von Neuman. La interpretación física del formalismo desarrollado es particularmente apropiada en el vínculo entre los términos de la serie y los procesos físicos involucrados. El término de orden 0 se refiere al flujo primario estrictamente proveniente de la fuente de emisión  $S$ , mientras que los términos  $\Psi_i$  son las contribuciones de *scattering* a orden  $i$  obtenidas a partir del operador del *kernel de scattering*  $\mathbf{K}$ .

<sup>15</sup>Hint: Introdúzcase  $e^{\int_{-\infty}^s \Sigma(\vec{r}_0 + s'\vec{\Omega}, E) ds'}$  y calcúlese  $\frac{d}{ds} \Psi$ .

<sup>16</sup>Resulta conveniente expresar la ecuación de este modo para la resolución numérica de la misma, por ejemplo utilizando métodos estadísticos como Monte Carlo.

## 2.2.. Magnitudes y unidades

La dosimetría es una de las áreas más importantes en el campo de la física médica, ya que permite establecer las bases formales para comprender y estudiar cuantitativamente los procesos de interacción de la radiación con la materia, por medio de determinaciones experimentales o cálculos analíticos y/o estocásticos de cantidades relevantes asociadas a los procesos de interacción, como energía transmitida de la fuente de radiación al medio irradiado y dosis absorbida por éste como consecuencia. En el caso de la dosimetría *convencional*, que se refiere a las metodologías *standard* y canónicas desarrolladas durante décadas y que actualmente cuentan con absoluto consenso sobre su capacidad y fiabilidad, el principal interés se concentra en la radioterapia externa utilizando haces de fotones y electrones de megavoltaje. La dosimetría convencional surgió acompañando las técnicas de irradiación para estimar los efectos en los pacientes irradiados. Es por tanto comprensible que la dosimetría se concentrara en haces externos de fotones y electrones durante sus inicios, ya que los principales generadores de radiación de uso médico proveían este tipo de haces.

Por otro lado, la dosimetría *no convencional* se refiere a las técnicas modernas, muchas de ellas en desarrollo, orientadas a describir los efectos de interacción entre radiación *no convencional*<sup>17</sup> y el material irradiado.

La dosimetría estudia dos aspectos diferentes: por un lado el haz de radiación en sí mismo (en términos de propiedades físicas de éste, como espectro, características geométricas, etc.) y, por otro, la cantidad de energía que es transferida desde el haz al medio irradiado, que será depositada en el material (típicamente considerando aire, agua o materiales biológicos).

## 2.3.. Definiciones de transporte y dosimétricas básicas

A continuación se realiza una presentación introductoria para la definición de cantidades dosimétricas. A fin de facilitar la exposición se concentra la discusión inicial sobre haces de fotones, lo cual puede ser posteriormente generalizado, con las particularidades y consideraciones necesarias para los casos de haces de partículas cargadas.

### 2.3.1.. Fluencia y tasa de fluencia de fotones, Kerma y exposición

La fluencia de fotones (partículas sin carga, desde un punto de vista más general) ( $j$ ) se define como sigue:

$$j \equiv \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta N}{\Delta A} \quad (140)$$

En la expresión 140 se ha introducido el número de fotones  $\Delta N$  que ingresa a una esfera (imaginaria) de sección transversal  $\Delta A$ . De aquí que  $[j] = \text{cm}^{-2}$ , típicamente.

Por lo tanto, se tiene que la tasa de fluencia  $\phi$  definida como la fluencia de fotones por unidad de tiempo resulta:

$$\phi \equiv j = \frac{dj}{dt} \quad (141)$$

La energía que transporta el haz de partículas es la fluencia de energía ( $\Psi$ ) dada por:

$$\Psi \equiv \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta E}{\Delta A} \quad (142)$$

<sup>17</sup>Haces de protones, radiación sincrotron, iones pesados, columnas de neutrones; hadrones en general.

donde  $\Delta E$  representa la cantidad de energía que atraviesa el área  $\Delta A$ . Para propósitos de los rangos de interés en aplicaciones en física médica, típicamente la unidad de fluencia de energía es  $[\Psi] = MeV cm^{-2}$ .

La fluencia de energía  $\Psi$  se obtiene inmediatamente, a partir de la fluencia de partículas, para el caso de haces monoenergéticos<sup>18</sup>:

$$\Psi = j h \nu \quad (143)$$

De donde se obtiene la tasa de fluencia de energía ( $\dot{\Psi}$ ):

$$\dot{\Psi} \equiv \frac{d\Psi}{dt} = \dot{\psi} \quad (144)$$

La unidad típica para la de tasa de fluencia de energía es:  $[\dot{\psi}] = MeV cm^{-2} s^{-1}$ .

La Kerma<sup>19</sup> está definido, para un dado medio - en particular para el aire, lo que usualmente se denomina Kerma en aire  $(K_{air})_{air}$ , es<sup>20</sup> proporcional a la fluencia de energía  $\Psi$ :

$$(K_{air})_{air} \equiv \Psi \left( \frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{air} = j h \nu \left( \frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{air} \quad (145)$$

donde sea ha introducido  $\left( \frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{air}$  que es el coeficiente de transferencia masa-energía para el aire evaluado a la energía del haz de fotones ( $h\nu$ ) en el caso de un haz monocromático.

Puede identificarse a la Kerma total  $K$  como formada por dos contribuciones: la componente debida a la transferencia de energía por parte de fluencia de partículas del haz primario que fue transferida en colisiones con el material irradiado, denominada Kerma de colisión  $K^{col}$  y la segunda componente de Kerma debida a la transferencia de energía por medio de los procesos radiativos asociados al transporte de partículas cagadas, Kerma radiativa  $K^{rad}$ :

$$K = K^{col} + K^{rad} \quad (146)$$

Como ejemplo, en la consideración de un haz de monoenergético en aire, la Kerma por colisión  $K^{col}$  resulta entonces proporcional a la fluencia de energía  $\Psi$  y, por tanto a la fluencia  $j$ :

$$(K^{col})_{air} = \Psi \left( \frac{\mu_{ab}}{\rho} \right)_{air} = j h \nu \left( \frac{\mu_{ab}}{\rho} \right)_{air} \quad (147)$$

En la expresión 147 se ha introducido el coeficiente de absorción másico para aire  $\left( \frac{\mu_{ab}}{\rho} \right)_{air}$  evaluado a la energía del haz, supuesto monocromético,  $h\nu$ <sup>21</sup>.

La relación entre los coeficientes de tranferencia masa-energía (en la expresión 145) y de absorción (en la expresión 147) es:

$$\frac{\mu_{ab}}{\rho} = \frac{\mu_{tr}}{\rho} (1 - \bar{f}) \quad (148)$$

<sup>18</sup>Para haces polienergéticos la fluencia de energía se calcula utilizando la fluencia de partículas pesando por la distribución espectral correspondiente.

<sup>19</sup>**Kerma**:= **K**inetic energy released in **m**atter

<sup>20</sup>Aproximación a primer orden, *i.e.* se desprecian las contribuciones de *scattering* de órdenes superiores, y debe ser considerado en puntos "suficientemente alejados" de la fuente de radiación.

<sup>21</sup>En bibliografía es posible encontrar denominaciones diferentes, en las que el coeficiente de absorción másico  $\mu_{ab}$  es llamado  $\mu_{en}$ .

La relación se establece a partir de considerar la fracción radiativa, es decir la fracción de energía de las partículas<sup>22</sup> cargadas que es liberada como radiación de Bremsstrahlung. El parámetro  $\bar{f}$  da cuenta precisamente de esta fracción de emisión radiativa. Considerando situaciones típicas en dosimetría de radiaciones de uso médico por medio de técnicas convencionales, puede verse que para materiales de interés biológico, el número atómico  $Z$  es bajo, y para energías del haz primario del orden de megavoltaje, la contribución radiativa es una fracción significativamente menor, es decir  $\bar{f} \approx 0$ , debido a que prácticamente toda la energía transferida por parte del haz primario es absorbida por el material irradiado  $\mu_{tr}/\rho \approx \mu_{ab}/\rho$ . Entonces  $\frac{K^{rad}}{K^{col}} \rightarrow 0$  y  $K \approx K^{col}$ .

La exposición en aire  $X$  está definida a partir de la Kerma en aire de colisión en aire  $(K_{air}^{col})_{air}$  por medio de:

$$X \equiv (K_{air}^{col})_{air} \left[ \left( \frac{W_{air}}{q_e} \right) \right]^{-1} \quad (149)$$

donde  $W_{air}/q_e$  es la energía media (trabajo) requerida para producir un par iónico en aire seco, cuyo valor es  $33,97eV/par$ , aproximadamente.

La exposición se mide usualmente, por razones históricas, en unidades  $[X] = R$  (Roentgen), lo cual equivale a  $2,58 \cdot 10^{-4} Ckg^{-1}$ , por lo tanto, trabajando en el Sistema **SI** se tiene:

$$(K_{air}^{col})_{air} = \left( 0,876 \frac{cGy}{R} \right) X \quad (150)$$

donde se ha introducido la unidad de Gray Gy definida por:  $1 Gy \equiv \frac{1J}{1kg}$ .

## 2.4.. Teoría de la Cavidad de Bragg-Gray

Anteriormente se definieron cantidades para describir las propiedades fundamentales de un campo de radiación, que conjuntamente con las teorías de transporte e interacción de radiación y materia constituyen la base para introducir modelos dosimétricos y correspondientes fundamentos.

Considerando una región del espacio donde exista una interfaz entre dos medios diferentes, como podría ser aire y agua. El transporte de radiación en esta región producirá el paso de fluencia de partículas cargadas ( $\Phi$ ) a través de la interfaz. Por continuidad, la dosis en la interfaz que funciona de frontera entre los medios materiales satisface:

$$\begin{aligned} D_{air} &\rightarrow \Phi \left( \frac{dT}{\rho ds} \right)_{col air} \\ D_{wat} &\rightarrow \Phi \left( \frac{dT}{\rho ds} \right)_{col wat} \end{aligned} \quad (151)$$

donde  $\left( \frac{dT}{\rho ds} \right)_{col med}$  es el poder de frenado (*stopping power*) másico por colisión correspondiente al medio *med* y evaluado a la energía del haz de partículas cargadas que atraviesen la interfaz. El camino a largo del cual se calcula el poder de frenado es la dirección de la trayectoria  $s$  en el medio material de densidad másica  $\rho$ .

Por lo tanto, el cociente de los valores de dosis en la frontera entre los medios resulta:

$$\frac{D_{air}}{D_{wat}} = \frac{\left( \frac{dT}{\rho ds} \right)_{col air}}{\left( \frac{dT}{\rho ds} \right)_{col wat}} \quad (152)$$

<sup>22</sup>Secundarias para el caso de un haz primario de partículas no cargadas.



El problema planteado en la expresión 152 desestabiliza la continuidad de la cantidad física dosis cuando se encuentra en interfaces frontera entre dos medios materiales. La dosis puede obtenerse a partir de la teoría de la cavidad de Bragg-Gray, basada en 2 hipótesis principales:

- **La cavidad, región donde se determina la dosis absorbida, i.e. el pequeño volumen rodeado por medio material, debe ser de dimensiones significativamente menores al alcance<sup>23</sup> de las partículas cargadas que atraviesan la interfaz entre los medios materiales, de manera que su presencia no produzca alteraciones en el campo de radiación, concretamente en la fluencia de partículas cargadas en el medio material.**
- **La dosis absorbida en la cavidad debe ser consecuencia solo de interacciones de partículas cargadas que atraviesan la interfaz en el pequeño volumen de la cavidad.**

Cabe aclarar algunos aspectos relevantes que se derivan de los principios de Bragg-Gray para la teoría de la cavidad. La fluencia de partículas cargadas que producen interacciones en el pequeño volumen de la cavidad, provienen típicamente de componentes de *scattering* producido en regiones aledañas. La teoría es aplicable tanto para haces de partículas cargadas como no cargadas (denominados “indirectamente ionizantes”).

A partir de estos principios, puede determinarse las dosis  $D_{air}$  y  $D_{wat}$  por medio de:

$$\begin{aligned} D_{air} &= \int_0^{T_{max}} dT \frac{d\Phi}{dT} \left( \frac{dT}{\rho ds} \right)_{col air} \\ D_{wat} &= \int_0^{T_{max}} dT \frac{d\Phi}{dT} \left( \frac{dT}{\rho ds} \right)_{col wat} \end{aligned} \quad (153)$$

La cantidad  $\frac{d\Phi}{dT}$  refiere a la distribución espectral (de energía cinética  $T$ ) de la fluencia de partículas cargadas que atraviesan la cavidad de Bragg-Gray.

Como se mostró en la expresión 149, la dosis  $D_{air}$  puede obtenerse a partir de la carga eléctrica  $Q$ :

$$D_{air} = \frac{Q}{m} \left( \frac{W_{air}}{q_e} \right) \quad (154)$$

Y, a partir de ésta la dosis en agua  $D_{wat}$  se calcula utilizando el cociente de los *stopping powers*. Para un medio arbitrario  $MED$ , la dosis absorbida  $D_{MED}$  se obtiene como sigue:

$$D_{MED} = D_{wat} \left( \frac{\mu_{en}}{\rho} \right)_{wat}^{MED} = \frac{Q}{\rho V} s_{air}^{wat} \left( \frac{W_{air}}{q_e} \right)_{air} \left( \frac{\mu_{en}}{\rho} \right)_{wat}^{MED} \quad (155)$$

donde  $\left( \frac{\mu_{en}}{\rho} \right)_{wat}^{MED}$  indica el cociente (efectivo) medio-agua de los coeficientes de transferencia de energía  $\mu_{en}$ .

A partir de la relación 155 se calcula la dosis absorbida utilizando detectores basados en pequeños volúmenes, como cámaras de ionización, puede obtenerse determinaciones dosimétricas a partir de lecturas de carga colectada.

<sup>23</sup>En términos estrictos, por “alcance” se entiende “rango”.

### 2.5.. Equilibrio electrónico

El principio de equilibrio electrónico, más precisamente el equilibrio de partículas cargadas *Charged Particle Equilibrium - CPE*, presupone un equilibrio basado en que por cada partícula cargada (específicamente electrones) originada en el pequeño volumen y que sale del volumen llevándose una energía cinética  $T$ , existe una partícula cargada análoga originada fuera del pequeño volumen que ingresa al mismo portando energía cinética  $T$ . Esta asunción fue implícitamente utilizada para identificar la dosis con Kerma de colisión  $K_{col}$ .

Las condiciones específicas para el equilibrio de partículas cargadas son:

1. Medio homogéneo (densidad másica  $\rho$  constante en el medio material).
2. Composición química homogea del medio material.
3. Uniformidad del campo radiante indirectamente ionizante.
4. Ausencia de campos electromagnéticos no uniformes.

Debido a que estas condiciones difícilmente se cumpla en un sentido estricto en la mayoría de los casos prácticos, se introduce el concepto de equilibrio transitorio de partículas cargadas (*transitorium charged particle equilibrio - TCPE*).

La energía transferida (Kerma) por parte del haz incidente a las partículas cargadas del medio (electrones) no necesariamente es absorbida en modo completo por parte del medio material en el volumen donde se transfirió la energía, ya que el recorrido de las partículas cargadas que absorbieron la energía es finito y no nulo.

Se introduce entonces el concepto de que existe *TCPE* cuando se satisface:

$$D = \beta K_{col} \quad (156)$$

En ausencia de atenuación del haz primario, se verificaría  $\beta = 1$  una vez que se alcanzó la zona de *build up*, donde  $\beta < 1$ . Teniendo en cuenta la atenuación del medio material, resulta que la Kerma es máxima en superficie y disminuye acorde con la atenuación del medio. La fluencia de partículas cargadas aumenta en profundidad hasta que se alcanza el equilibrio.

### 2.6.. Dosis en aire y dosis en medio material

El punto de partida para la dosimetría es el concepto de “dosis en un pequeño volumen rodeado por aire”, que puede denominarse también “dosis en espacio libre (*dose in free space*)”. Este concepto, originalmente introducido por Johns y Cunningham, fue utilizado para caracterizar la radiación producida por un dispositivo y proporcionar, al mismo tiempo, información para un valor de referencia para los cálculos dosimétricos que involucran razones Tejido-aire (TAR, Tissue-Air Ratio) y factores de dispersión en pico (*Peak Scatter Factor PSF*).

Se define  $D'_{med}$  a la dosis en un pequeño volumen rodeado aire se designa por medio de determinaciones de Kerma aire en aire ( $(K_{air})_{air}$ ). Esta definición original ha sido significativamente aprovechada para haces de energías de unas centenas de kilovoltios o incluso energía levemente por encima del megaelectronvolt, como el caso de las bombas de  $^{60}\text{Co}$ , que emiten 2 líneas características de rayos  $\gamma$  de 1.33 y 1.17 MeV, lo cual genera un haz prácticamente monocromático de energía “efectiva” de 1.25 MeV. Sin embargo, el concepto de dosis en un pequeño volumen rodeado aire pierde significado para haces de terapia de los megavoltajes, como el caso de aceleradores lineales de uso médico para terapia convencional.

De acuerdo con la teoría de Jogns-Cunningham, el procedimiento empírico para determinar la dosis en un pequeño volumen (de material) rodeado por aire  $D'_{med}$  en un dado punto  $P$  del haz de

radiación, es a partir de una medición  $M_P$  de una señal medida en aire con una cámara de ionización en el punto  $P$ , como se muestra a continuación:

$$M_P \xrightarrow{(1)} X_P \xrightarrow{(2)} (K_{air})_{air} \xrightarrow{(3)} (K_{\Delta m})_{air} \xrightarrow{(4)} (K_{med})_{air} \xrightarrow{(5)} D'_{med} \quad (157)$$

donde  $M_P$  es la señal medida en aire con una cámara de ionización en el punto  $P$ , ya corregida por efectos de temperatura y presión y pérdidas por recombinación de iones<sup>24</sup>.

Cada paso involucrado en el proceso se describe a continuación.

1. Paso I: Determinación de la exposición  $X_P$ , utilizando el factor de calibración de cámara  $N_X$ , como sigue:

$$X_P = M_P N_X \quad (158)$$

2. Paso II: Determinación de Kerma aire en aire  $(K_{air})_{air}$ :

$$(K_{air})_{air} = 0,876 \frac{cGy}{R} X_P \quad (159)$$

Alternativamente (si se cuenta con el coeficiente  $N_K$ ) puede calcularse directamente:

$$(K_{air})_{air} = M_P N_K \quad (160)$$

3. Paso III: Determinación de Kerma de colisión para  $\Delta m$  en aire ( $\Delta m$  es la representación de una masa infinitesimal de material, por ejemplo agua):

$$(K_{\Delta m})_{air} = (K_{air})_{air} \left( \frac{\bar{\mu}_{ab}}{\rho} \right)_{air}^{\Delta m} \quad (161)$$

donde  $(\bar{\mu}_{ab}/\rho)_{air}^{\Delta m}$  es la razón entre los coeficientes máscicos de absorción, *pesados según el espectro del haz de fotones*, correspondientes al material de la masa infinitesimal  $\Delta m$  y el aire.

4. Paso IV: Determinación de Kerma por colisión para una masa esférica (radio  $r_{med}$ , tal que se garantiza equilibrio electrónico de partículas cargadas en el punto  $P$ ) de material centrada en el punto  $P$ :

$$(K_{med})_{air} = (K_{\Delta m})_{air} k(r_{med}) \quad (162)$$

donde  $k(r_{med})$  representa el factor de corrección para tener en cuenta la atenuación del haz de fotones dentro del medio material esférico, y puede aproximarse por:

$$k(r_{med}) = e \left[ - \left( \frac{\bar{\mu}_{ab}}{\rho} \right)_{med} \rho r_{med} \right] \quad (163)$$

donde  $(\bar{\mu}_{ab}/\rho)_{med}$  es el coeficiente de absorción del medio y  $\rho$  su densidad. Para el caso del agua, que es el material típicamente seleccionado,  $k(r_{med}) = 0,985$  para un haz de fotones de  $^{60}\text{Co}$  y resulta muy aproximadamente 1 para haces de fotones con energías menores.

<sup>24</sup>La cámara de ionización debe contar con el capuchón de protección adecuado (*buildup cap*) y debe contar con el correspondiente factor de calibración para exposición en aire  $N_X$ , o bien con el coeficiente de calibración de Kerma aire en aire  $N_K$ .

5. Paso V: Cálculo de la “dosis en un pequeño volumen de material rodeado por aire”  $D'_{med}$  como sigue:

$$D'_{med} = \beta (K_{med})_{air} = \beta 0,876 \frac{cGy}{R} \left( \frac{\mu_{ab}}{\rho} \right)_{air}^{med} X_P k(r_{med}) \quad (164)$$

donde  $\beta$  es prácticamente constante (con valor 1.003, 1.001 y 1.000 para  $^{60}\text{Co}$ ,  $^{137}\text{Cs}$  y rayos X por debajo de 350 keV)<sup>25</sup>.

Además, el producto  $0,876 \frac{cGy}{R} \left( \frac{\mu_{ab}}{\rho} \right)_{air}^{med}$  suele denominarse factor de conversión cGy-Roentgen designado  $f_{med}$ , por tanto, asumiendo  $\beta \approx 1$ , la “dosis en un pequeño volumen de material rodeado aire” resulta:

$$D'_{med} = f_{med} X_P k(r_{med}) \quad (165)$$

El haz de radiación puede clasificarse según la emisión del mismo, isotrópica o anisotrópica, y a la vez, monoenergético o policomponente.

Una fuente isotrópica produce la misma tasa de fluencia en todas direcciones, mientras la tasa de fluencia de una fuente anisotrópica depende de la dirección (respecto de la fuente) donde se realice la medición.

### 2.6.1.. Propagación de fluencia: inverso de cuadrado

Para haces de uso típico en radioterapia se asume que las fuentes pueden aproximarse por fuentes puntuales, y que los haces producidos presentan la divergencia consecuente. Para una fuente  $S$  que forma un campo cuadrado de lado  $a$  a una distancia  $f_a$  de la fuente  $S$ , resulta que a una distancia  $f_b$  de la fuente  $S$  y proyecta una sección cuadrada de lado  $b$ , que se obtiene geoméricamente.

La fuente  $S$  emite partículas con fluencias  $\phi_A$  en  $f_a$  y  $\phi_B$  en  $f_b$ . Por conservación del número total de partículas  $N_{tot}$ , se obtiene:

$$\frac{\phi_A}{\phi_B} = \frac{B}{A} = \frac{b^2}{a^2} = \frac{f_b^2}{f_a^2} \quad (166)$$

Debido a que, para un punto de interés  $P$ , la exposición  $X$ , la Kerma aire en aire  $(K_{air})_{air}$  y la “dosis en un volumen pequeño de material rodeado aire”  $D'_{med}$  son directamente proporcionales a la fluencia de fotones  $j$  en el punto  $P$ , se concluye que todas estas cantidades cumplen con la ley del inverso del cuadrado<sup>26</sup>.

<sup>25</sup>A veces, se considera  $\beta = 1$ , incluso para haces de  $^{60}\text{Co}$ .

<sup>26</sup>Bajo las aproximaciones realizadas.

# **MÓDULO III**

## **Simulaciones Monte Carlo**

---

### 3.. Módulo III: Simulaciones Monte Carlo

El capítulo 3. es una breve introducción a los conceptos de técnicas numéricas de simulación Monte Carlo para aplicaciones en problemas de aplicación en física, y en particular en transporte de radiación. La exposición es de carácter escueta y está basada en bibliografía especializada, de donde pueden estudiarse los temas desarrollados en este módulo.

#### 3.1.. Introducción a procesos estocásticos

En los procesos estocásticos se representan todos y cada uno de los pasos necesarios para la realización de un cierto evento así como también las maneras en que cada uno de los pasos puede ser realizado en términos de las respectivas probabilidades. Por tanto, cualquier proceso en el que se vean involucradas probabilidades de ocurrencia resulta ser un proceso estocástico.

Al describir variables de carácter aleatorio, vinculadas a fenómenos de tipo probabilísticos como lo es el transporte de radiación, es asumido, como premisa implícita por defecto, el hecho de que las características aleatorias permanecen constantes durante el intervalo de tiempo de interés, aunque desde una perspectiva genérica podría no satisfacerse esta asunción. En efecto, al incorporar la dependencia (o evolución) de variables consideradas determinísticas, éstas describirán un proceso evolutivo de tipo analítico, mientras que para el caso de variables aleatorias mostrarán una evolución condicionada por el vínculo al fenómeno probabilístico asociado.

Entonces, toda función definida a partir de variables aleatorias, como por ejemplo funciones de distribución o funciones de densidad, presentarán dependencia temporal determinada por su carácter aleatorio, dando lugar a la naturaleza estocástica del fenómeno físico involucrado. Una definición más formal de un proceso estocástico es la siguiente:

*El proceso estocástico consiste en el conjunto (o familia) de variables aleatorias  $\{X_t, t \in [t_{ini}, t_{fin}]\}$  que se ordenan de acuerdo con el índice  $t$ , por lo general identificando al tiempo.*

En consecuencia, se tiene que para cada valor de  $t$  (instante) existe la variable aleatoria representada por  $X_t$ , de modo que el proceso estocástico puede interpretarse como una sucesión de variables aleatorias, las que pueden variar (evolucionar) en sus características.

Los *estados de variables aleatorias* son los posibles valores que éstas pueden asumir. Por lo tanto, existe un *espacio de estados* asociados a las variables aleatorias.

En particular, la variable temporal  $t$  puede ser de tipo discreto o bien de tipo continuo. La modificación de la variable  $t$ , por ejemplo, daría lugar a cambios de estado que ocurren en el instante  $t$ .

Por tanto, de acuerdo con el conjunto de índices<sup>27</sup>  $t \in T = [t_{ini}, t_{fin}]$ , la variable aleatoria  $X_t$  puede clasificarse según los siguientes criterios para procesos estocásticos:

- Si el conjunto  $T$  es continuo (por ejemplo  $\mathfrak{R}^+$ ), resulta que  $X_t$  describe un proceso estocástico de parámetro continuo.
- Si el conjunto  $T$  es discreto,  $X_t$  describe un proceso estocástico de parámetro discreto.
- Si para cada valor (instante)  $t$  la variable aleatoria  $X_t$  es de tipo continuo, resulta que proceso estocástico es de estado continuo.
- Si para cada valor (instante)  $t$  la variable aleatoria  $X_t$  es de tipo discreto, resulta que proceso estocástico es de estado discreto.

Una *cadena* es un proceso estocástico para el cual el tiempo evoluciona de manera discreta y la variable aleatoria sólo puede tomar valores discretos en el espacio de estados correspondiente.

Un *proceso de saltos puros* es un proceso estocástico para el cual los cambios de estados suceden de forma aislada y aleatoria pero la variable aleatoria sólo asume valores discretos en el espacio de

<sup>27</sup> Estrictamente, subíndices.

estados correspondiente. Diversamente, un *proceso continuo* se refiere al caso en que los cambios de estado se producen para cualquier valor de  $t$  (instante) y hacia cualquier estado dentro de un espacio continuo de estados correspondiente.

### 3.1.1.. Procesos de estado discreto y cadenas de Markov

En el caso de procesos estocásticos con espacio de estados discreto, una secuencia de variables que indique el valor del proceso en instantes sucesivos<sup>28</sup> puede representarse del siguiente modo:

$$\{X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n\} \quad (167)$$

donde cada variable  $X_j$   $j \in [1, n]$  presenta una distribución de probabilidades tal que, en general, es diferente de las otras variables aunque podría haber características comunes.

Uno de los principales objetivos del estudio del caso discreto es el cálculo de probabilidades de ocupación de cada estado a partir de las probabilidades de cambio de estado. Si para el valor  $t_{j-1}$  (instante) el sistema está en el estado  $x_{j-1}$ , la probabilidad de que al instante siguiente  $t_j$  se encuentre en el estado  $x_j$  se obtiene a partir de la probabilidad de transición o cambio de estado de  $x_{j-1}$  a  $x_j$  (o probabilidad condicionada) denotada por  $P(X_j = x_j / X_{j-1} = x_{j-1}) = P_{j,j-1}$ , donde  $P_{j,j-1}$  es el valor que asume la probabilidad para el caso específico en consideración. Donde cada variable  $X_j$   $j \in [1, n]$  presenta una distribución de probabilidades tal que, en general, es diferente de las otras variables aunque podría haber características comunes.

Uno de los principales objetivos del estudio del caso discreto es el cálculo de probabilidades de ocupación de cada estado a partir de las probabilidades de cambio de estado. Si para el valor  $t_{j-1}$  (instante) el sistema está en el estado  $x_{j-1}$ , la de que al instante siguiente  $t_j$  se encuentre en el estado  $x_j$  se obtiene a partir de la probabilidad de transición o cambio de estado de  $x_{j-1}$  a  $x_j$  (o probabilidad condicionada) denotada por  $P(X_j = x_j / X_{j-1} = x_{j-1})$  y definida según:

$$P(X_j = x_j / X_{j-1} = x_{j-1}) \quad (168)$$

En este caso, se tiene:

$$P(X_j = x_j / X_{ini} = x_{ini}, \dots, X_{j-1} = x_{j-1}) \quad (169)$$

Por tanto, la probabilidad  $P(X_j = x_j / X_{ini} = x_{ini}, \dots, X_{j-1} = x_{j-1})$  depende de toda la “historia pasada del proceso”, mientras que la probabilidad de transición depende únicamente del estado actual que ocupe el proceso.

#### **Propiedad de Markov:**

Se dice que un proceso cumple la propiedad de Markov cuando toda la historia pasada del proceso se puede resumir en la posición actual que ocupa el proceso para poder calcular la probabilidad de cambiar a otro estado. Es decir, se cumple:

$$P(X_j = x_j / X_{ini} = x_{ini}, \dots, X_{j-1} = x_{j-1}) = P(X_j = x_j / X_{j-1} = x_{j-1}) \quad (170)$$

Además, una propiedad importante que puede tener una cadena es que los valores  $p_{mn}(j)$  no dependan del valor de  $j$ . Entonces, se tiene que las probabilidades de cambiar de estado son las mismas en cualquier instante. Por lo tanto, esta propiedad indica que las probabilidades de transición son estacionarias.

<sup>28</sup>Se asume que la variable  $t$  refiere al tiempo.

### 3.1.2.. Procesos de saltos puros

En este caso, el proceso sigue siendo discreto en estados pero la gran diferencia es que los cambios de estado ocurren en cualquier instante en el tiempo (tiempo continuo).

Un proceso estocástico en tiempo continuo  $\{N(t) | t \geq 0\}$  se denomina *proceso de conteo* si representa el número de veces que ocurre un suceso hasta el instante de tiempo  $t$ . En particular, se tiene  $N(t) \in \mathbf{N}$  y  $N(t^*) \leq N(t) \forall t^* < t$ . Un proceso de conteo es un *proceso de Poisson homogéneo* de tasa  $\lambda$  si satisface:

1.  $N(0) = 0$
2.  $N(t_k) - N(t_{k-1})$  es una variable aleatoria independientes (proceso de incrementos independientes)  $\forall k$ .
3.  $N(t + t^*) - N(t^*)$ , que denota la cantidad de eventos que ocurren entre el instante  $t^*$  y  $t$ , sigue una distribución de Poisson de parámetro  $\lambda t$ .

### 3.1.3.. Procesos de estados continuos y series temporales

Un concepto importante en procesos estocásticos es la *realización*, o bien una realización de una experiencia aleatoria, que es el resultado de una repetición de esa experiencia. Por tanto, en la experiencia aleatoria de “lanzar una vez un dado” una realización posible sería obtener el número 2, en el único lanzamiento hecho. En ese caso, la realización se reduce a un único número  $\{X\}$ . Si se repite la experiencia, podrían obtenerse otras realizaciones (cualquiera de los números 1, 3, 4, 5 y 6).

En una experiencia  $M$ -dimensional, una realización es el resultado obtenido de los  $M$  parámetros, denotado por  $\{X_1, \dots, X_M\}$ .

Una *serie temporal* es una realización parcial de un proceso estocástico de parámetro tiempo discreto. De aquí que la teoría de los procesos estocásticos es de aplicación a las series temporales. Sin embargo, existe una fuerte restricción que radica en el hecho de que en muchas series temporales, ellas son la única realización observable del proceso estocástico asociado.

## 3.2.. Procesos estocásticos estacionarios

En primera aproximación, se considerarán estacionarios a los procesos estocásticos que tengan un comportamiento constante a lo largo del tiempo.

Un *proceso estocástico estacionario en sentido estricto* requiere que al realizar un mismo desplazamiento en el tiempo de todas las variables de cualquier distribución conjunta finita se obtenga que esta distribución no varía. Es decir:

$$F(X_{i_1}, \dots, X_{i_M}) = F(X_{i_1+j}, \dots, X_{i_M+j}) \quad \forall i_k, j \quad (171)$$

En cambio, un *proceso estocástico estacionario en sentido débil* requiere que se mantengan constantes todas sus características lo largo del tiempo. Es decir, que  $\forall t$ :

1.  $\langle X_t \rangle = \langle X \rangle \quad \forall t$  donde  $\langle X \rangle$  denota el valor medio o de expectación.
2.  $\sigma_{X_t} = \sigma_X \quad \forall t$  donde  $\sigma_X$  denota la varianza.
3.  $Cov(t, t+j) = Cov(t^*, t^* + j) = C_j \quad \forall j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  donde  $Cov$  denota la covarianza y  $C$  es una constante.



### 3.3.. Características y medidas de procesos estocásticos

Para un espacio de estados  $M$ -dimensional, pueden calcularse cantidades y medidas estadísticamente representativas para los estados descritos por las variables  $M$ -dimensionales. En particular, se definen -entre tantos- medidas como tensores de valor medio y de covarianzas, que permiten obtener características representativas de los procesos estocástico.

### 3.4.. Técnicas de simulación Monte Carlo

Existe una amplia variedad de problemas asociados al modelado del transporte de radiación, y que de hecho se presentan en la práctica en muy diversos ámbitos, que carecen de solución dentro del campo analítico, limitando el uso de “matemática pura” (métodos analíticos directos) para la resolución de los mismos.

Un ejemplo típico es la resolución de algunas ecuaciones íntegro-diferenciales. En particular, existen varios teoremas que demuestran la gran limitación de los métodos analíticos para la resolución directa de la ecuación de transporte de Boltzmann, representada por la expresión de Boltzmann para el transporte de radiación (véase Capítulo 2.).

De hecho, se conoce como resultado de teoremas que sólo puede resolverse la ecuación de transporte de Boltzmann para una cantidad muy acotada de situaciones, involucrando condiciones iniciales y de contorno que resultan muy poco realistas en casos de aplicación concreto de problemas físicos.

Por tanto, se propone un método alternativo para encontrar soluciones a la ecuación de transporte de Boltzmann, para lo cual se considerará la re-escritura del problema en modo particular (formulación íntegro-diferencial) para posteriormente aplicar un procedimiento que consiste, básicamente, en el cálculo del valor de una integral definida. De manera tal, que una vez replanteado (re-ordenado) el problema éste se reducirá a la resolución de una ecuación que contiene integrales definidas, y por tanto podría salvarse la imposibilidad o inconveniencia de la aplicación de los métodos tradicionales (analíticos) para la solución de diferentes tipos de problemas, en los cuales se ven limitados debido, fundamentalmente, a:

- Desconocimiento de una función primitiva de aquella que se desea integrar.
- Si bien se conoce una función primitiva, resulta excesivamente compleja o extensa su aplicación.

La evaluación de estimadores, como por ejemplo para integrales definidas, por medio el método de Monte Carlo se realiza aplicando el siguiente teorema:

*Teorema:* Sean  $x_1, x_2, \dots, x_N$   $N$  variables aleatorias independientes, idénticamente distribuidas, con función de densidad  $f(x)$ . Si  $g_i$  son funciones de  $x_i$ , entonces:

$$G = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g_i(x_i) \quad (172)$$

es una variable aleatoria que verifica, el valor medio cumple con:

$$\langle G \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle g_i(x_i) \rangle \quad (173)$$

y la varianza resulta:

$$\sigma^2[G] = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sigma^2[g_i(x_i)] \quad (174)$$

En particular, cuando todas las  $g(x_i)$  son idénticas, e iguales a  $g(x)$ , se tiene que:

$$\langle G \rangle = \langle g(x) \rangle \quad (175)$$

y también:

$$\sigma^2[G] = \frac{1}{N} \sigma^2[g(x)] \quad (176)$$

Por lo tanto, en virtud de la definición de valor medio (o esperanza matemática) de  $g(x)$ , puede escribirse en la forma:

$$\langle G \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g_i(x_i) \right\rangle \approx \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) g(x) dx = \langle g(x) \rangle \quad (177)$$

Este resultado justifica la siguiente forma de estimar una integral definida: Muestrear una serie de números aleatorios  $x_i$  con función de densidad  $f(x)$  y evaluar  $g(x)$  para cada  $x$ . La media de los valores obtenidos para  $g(x)$  es una estimación de la integral. De acuerdo con el teorema de límite central la varianza de esta estimación decrece con el número de términos para  $\sigma^2[G]$ :

$$\sigma = \frac{\sigma[g]}{\sqrt{N}} \quad (178)$$

Conviene tener presente la desigualdad de Tchebycheff, de modo que se tiene:

$$P \left[ |G - \langle G \rangle| \geq \sqrt{\frac{\sigma^2[g]}{Nc}} \right] \leq c \quad (179)$$

De modo que se cuenta con argumento para tener una cota para la probabilidad de obtener un error mayor que el propuesto en la estimación del valor de la integral, pudiéndose siempre disminuir este error sin más que aumentar el valor de  $N$ .

### 3.5.. Eficiencia del método Monte Carlo

Se define la *eficiencia del método Monte Carlo* ( $\epsilon$ ) como:

$$\epsilon \equiv \frac{1}{\sigma^2} T^{-1} \quad (180)$$

donde  $T$  es el tiempo de cálculo. Como el valor de  $T$  está fuertemente relacionado con el número de puntos usados en la computación, se suele dar también esta otra definición para la eficiencia:

$$\epsilon \equiv N \frac{1}{\sigma^2} \tag{181}$$

Y, a partir de ésta, la eficiencia relativa ( $\epsilon_{rel}$ ):

$$\epsilon_{rel} \equiv \frac{\epsilon[N]}{\epsilon[N']} = \frac{N' \sigma^2}{N (\sigma')^2} \tag{182}$$

Si  $\epsilon_{rel} < 1$ , entonces el método que corresponde a  $N'$ ,  $(\sigma')^2$  es “mejor” que el método con  $N$ ,  $\sigma^2$ . Si el número de puntos utilizados es el mismo, la eficiencia relativa queda reducida al cociente de las varianzas.

### 3.5.1.. Ejemplos de aplicación

Se propone una serie de ejercicios de aplicación para introducir los conceptos iniciales, y elementos básicos de programación y simulaciones.

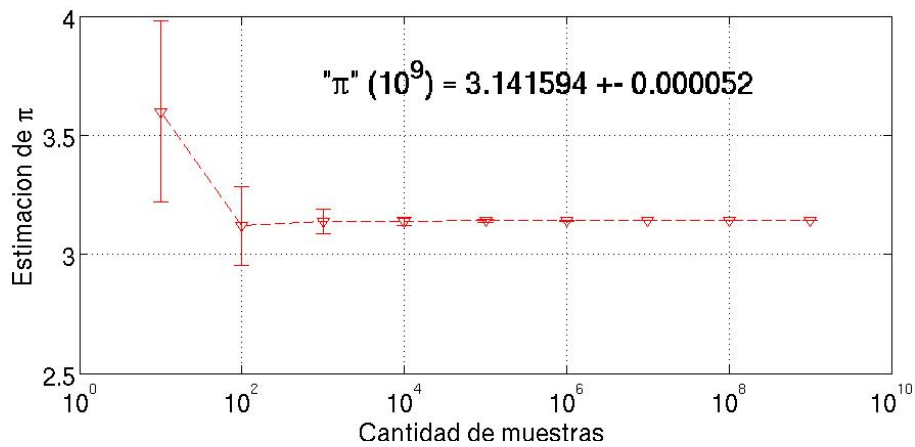


Figura 26. Cálculo de  $\pi$ : Estimador estadístico determinado con simulación Monte Carlo.

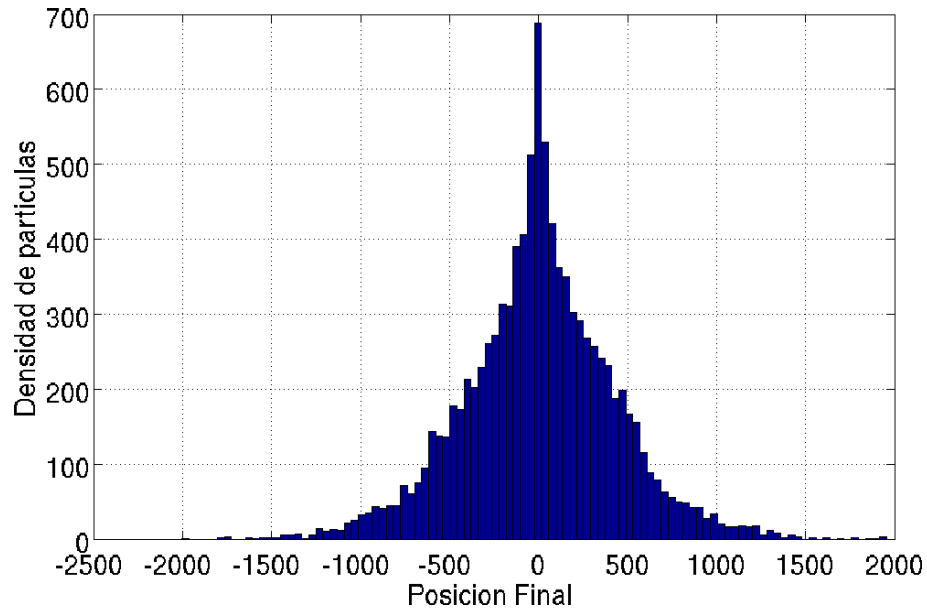


Figura 27. *Random walk*: Distancia de vuelo de partículas de emisión por simulación de la distancia recorrida por partículas emitidas en origen de modo isotrópico en un medio homogéneo.

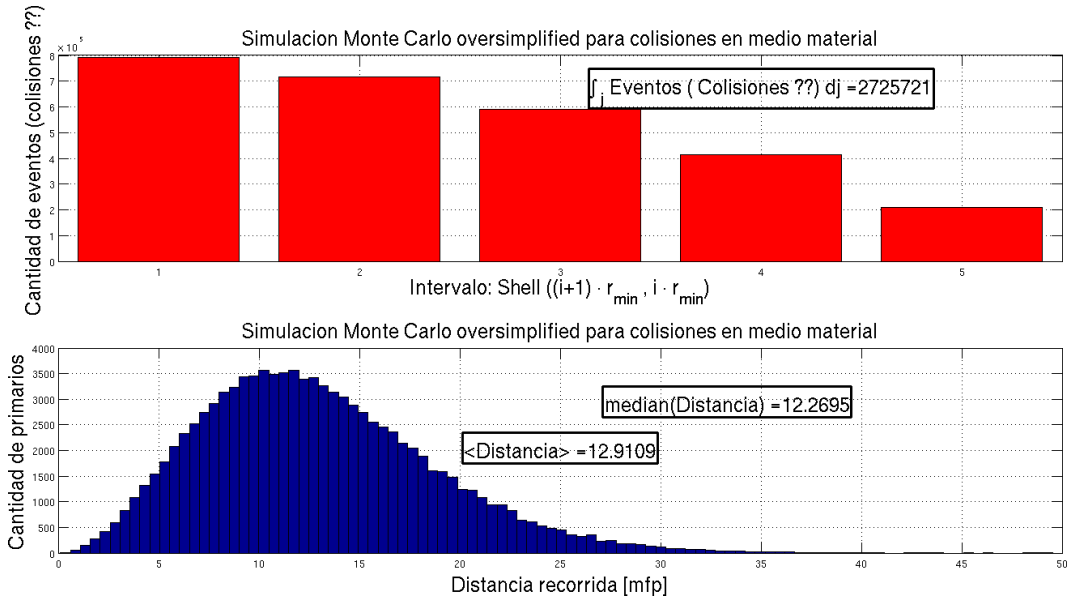


Figura 28. *Random walk*: Alcance de partículas de emisión por simulación en *shells* por partículas emitidas en origen de modo isotrópico en un medio homogéneo.

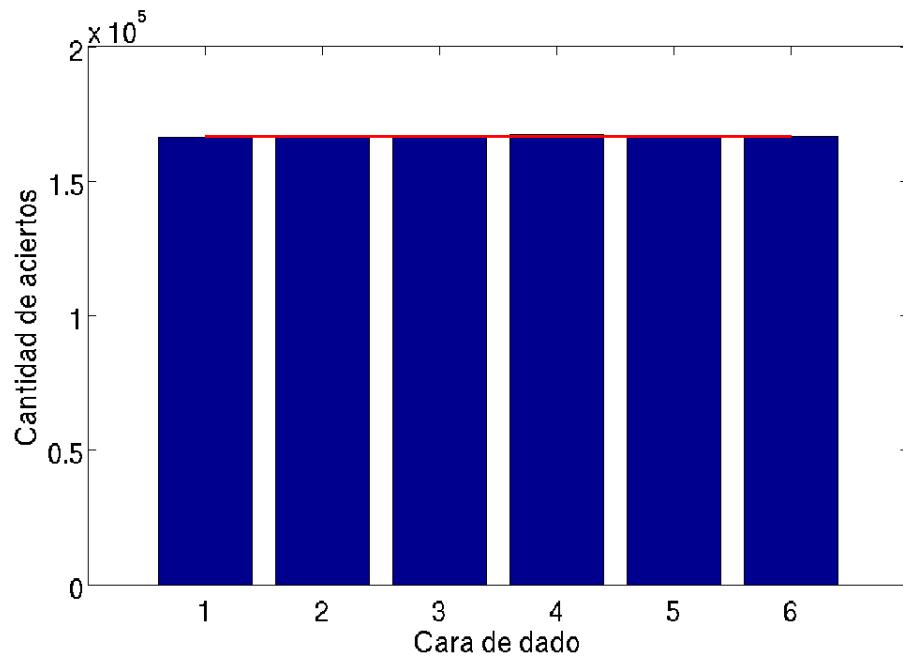


Figura 29. Simulación de lanzamiento de un dado.

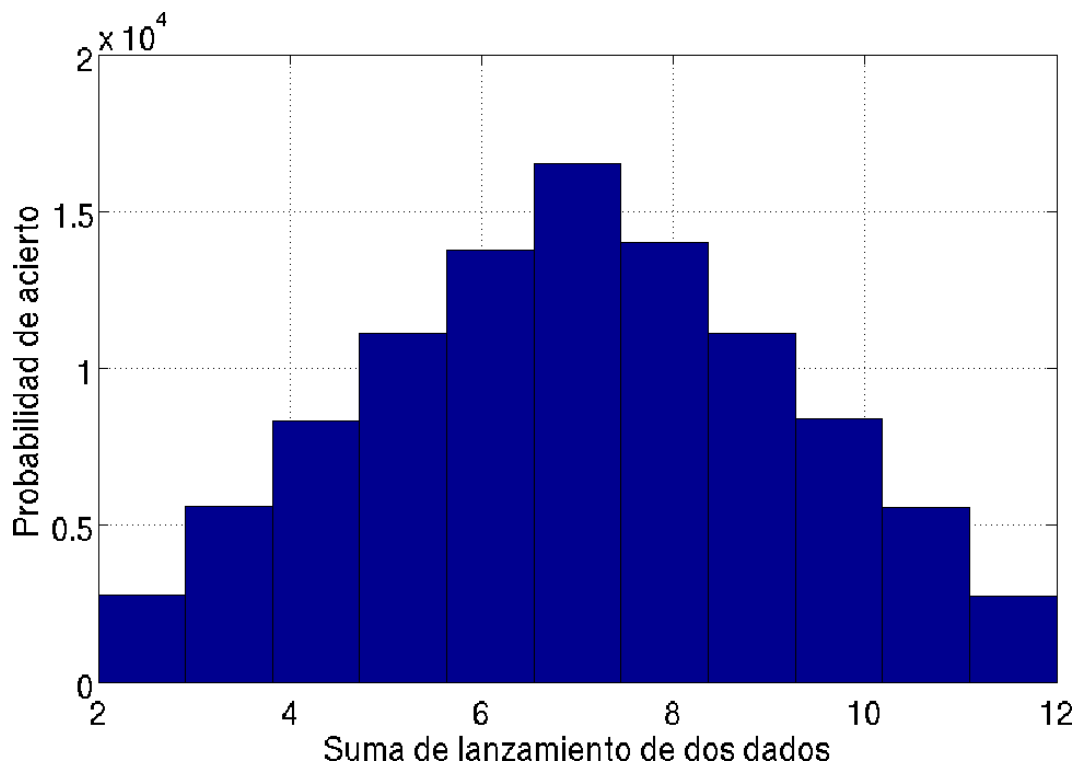


Figura 30. Simulación de lanzamiento de dos dados.

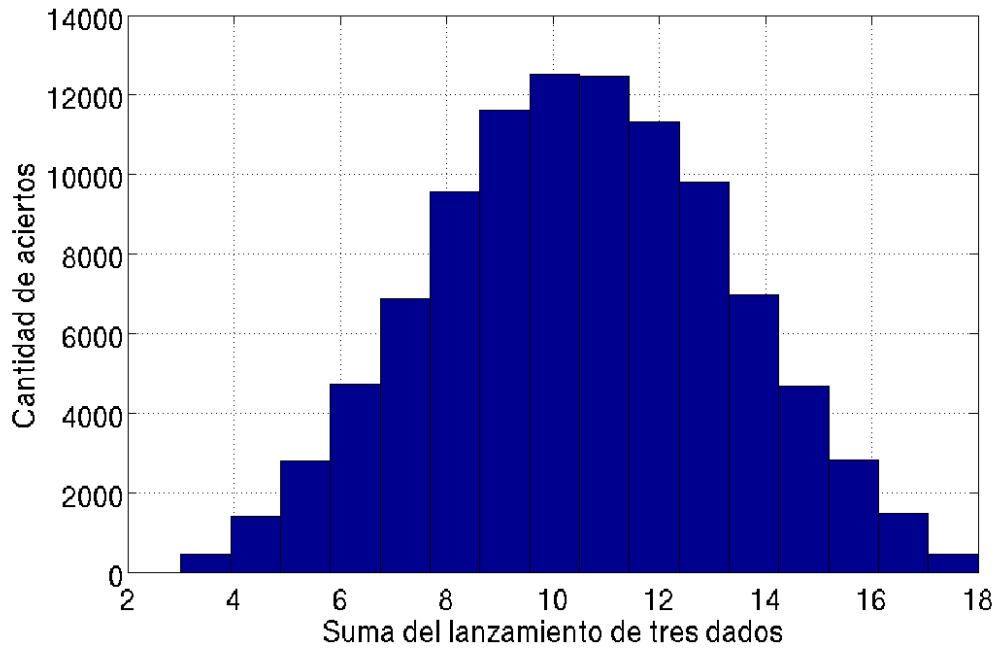


Figura 31. Simulación de lanzamiento de tres dados.

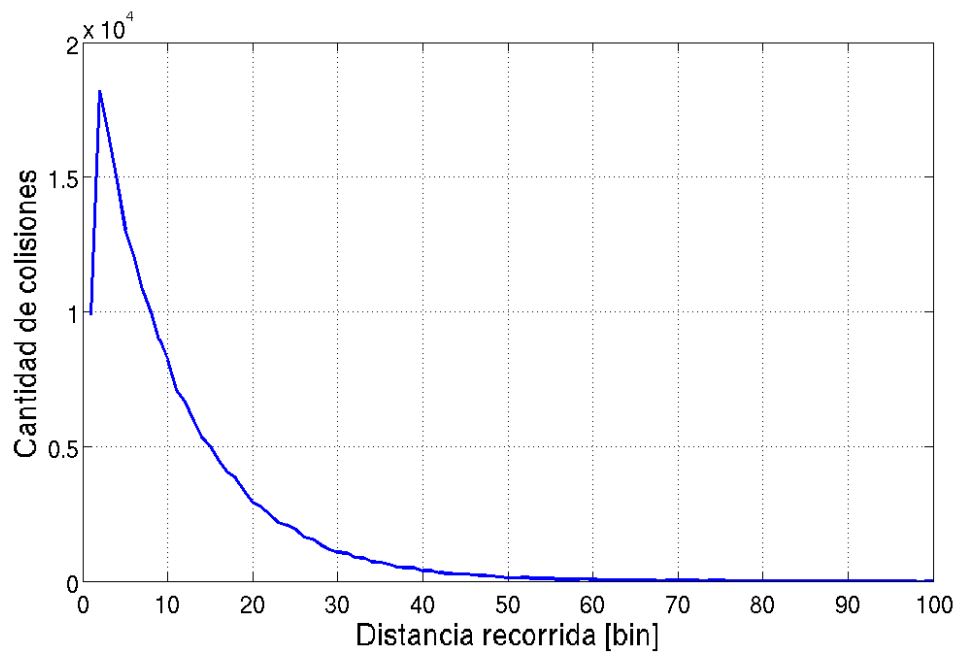


Figura 32. Simulación de colisiones en distancia recorrida por neutrones:  $E = E_0$ ,  $\rho = \rho_0$ ,  $\vec{r} = (0,0,0)$ .

### 3.5.2.. Ejemplo: Cálculo-estimación del número $\pi$ por medio de técnicas Monte Carlo

Uno de los métodos más antiguos utilizados para estimar el valor de  $\pi$  es el método de Buffon, que emplea una serie de líneas paralelas y una vara, cuya longitud guarda correlación con la separación entre líneas, para ser arrojada y determinar el ángulo que forma éstas con las líneas, así como la línea que atraviesa.

El método propuesto a continuación, representa una analogía al método de Buffon. Se considera un círculo de radio unidad centrado en el origen. El área del círculo en el primer cuadrante será  $\pi/4$ . Un modo de resolver este problema usando el método Monte Carlo con técnica éxito-fracaso, también denominado método de rechazo, es el siguiente:

1. Generar un par de números aleatorios  $\zeta_1$  y  $\zeta_2$  uniformemente distribuidos en  $[0,1]$ .
2. Determinar un punto en el primer cuadrante, de coordenadas  $(x,y)$  a partir de  $\zeta_1$  y  $\zeta_2$ .
3. Determinar la distancia  $D$  del punto  $(x,y)$  al origen,  $D = \sqrt{x^2 + y^2}$ .
4. Examinar si la distancia  $D$  es mayor o menor al radio  $R$  ( $R = 1$ ).
5. Considerar con “éxito” los procesos que den lugar a puntos en el plano dentro de círculo y como “fracaso” los que estén fuera.
6. Calcular las proporciones de éxito y de fracaso.

Se deja a los alumnos realizar una propuesta para un código, de propósitos ilustrativos, para resolver el presente ejemplo.

### 3.6.. Códigos FLUKA y PENELOPE

Toda la información y los detalles sobre los códigos de simulación PENELOPE y FLUKA están disponibles en la bibliografía, los respectivos manuales, [10] y [21].

Ejemplos sencillos de transporte de radiación resueltos con los códigos FLUKA y PENELOPE se muestran en las figuras 33 a 39.

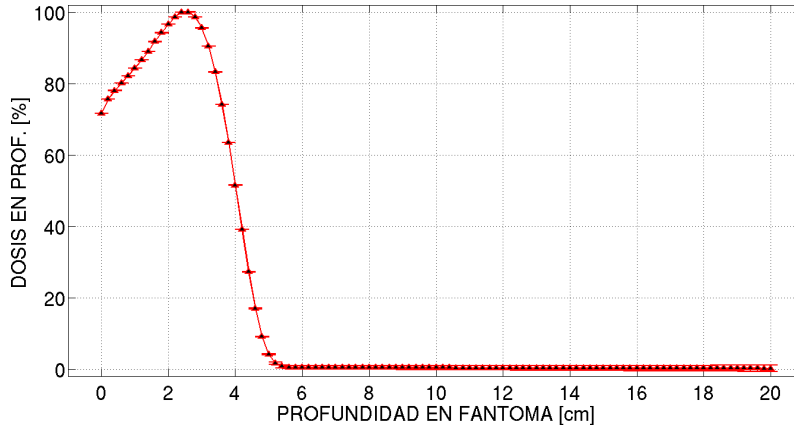


Figura 33. Porcentaje de dosis en Profundidad en fantoma cúbico (20 cm de lado) de agua irradiado con haz de electrones de 10 MeV obtenido con FLUKA.

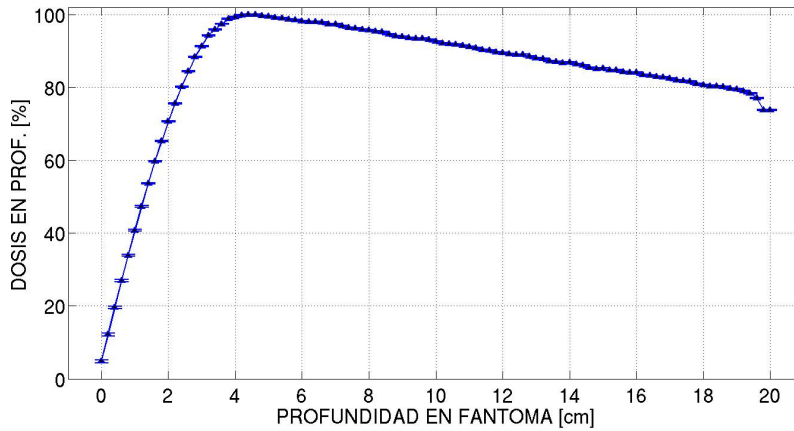


Figura 34. Porcentaje de dosis en Profundidad en fantoma cúbico (20 cm de lado) de agua irradiado con haz de fotones de 10 MeV obtenido con FLUKA.



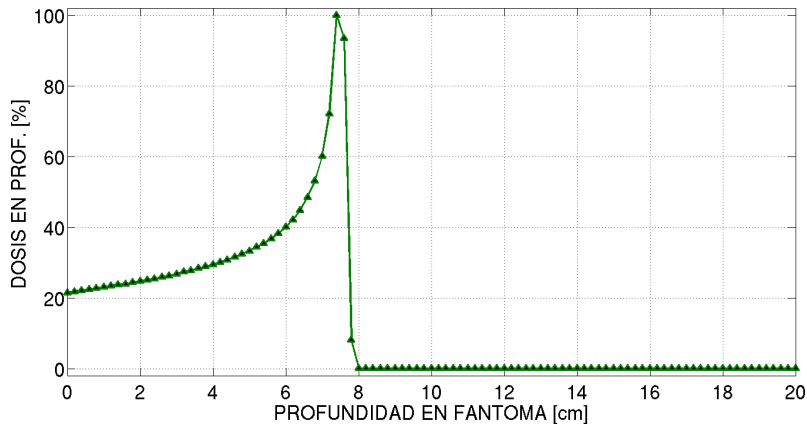


Figura 35. Porcentaje de dosis en Profundidad en fantoma cúbico (20 cm de lado) de agua irradiado con haz de protones de 100 MeV obtenido con FLUKA.

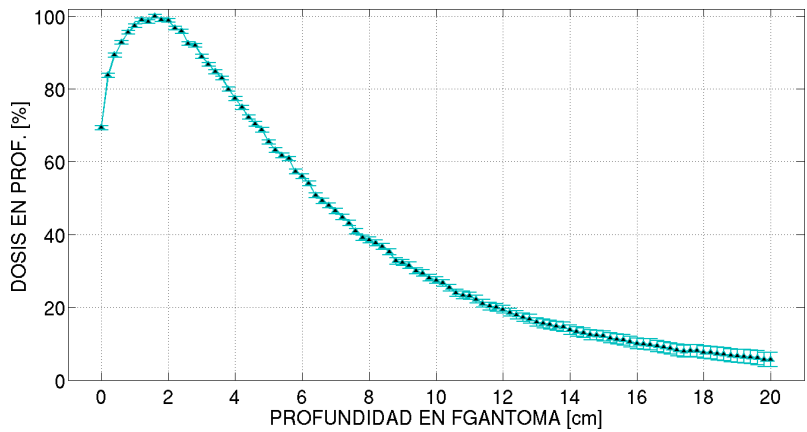


Figura 36. Porcentaje de dosis en Profundidad en fantoma cúbico (20 cm de lado) de agua irradiado en una columna de neutrones de 0.1 eV obtenido con FLUKA.

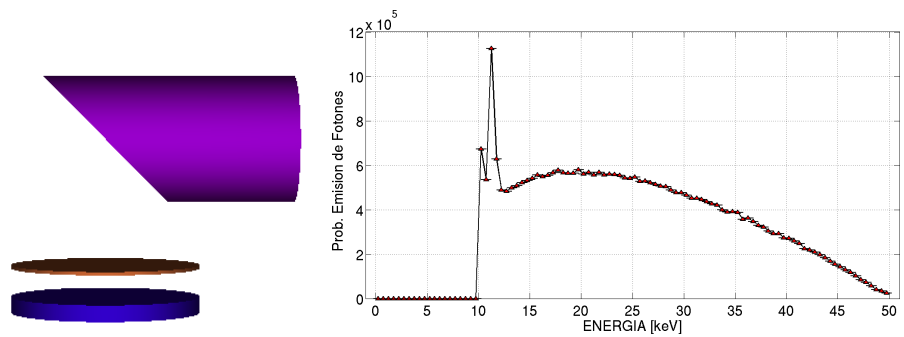


Figura 37. Espectro de emisión de tubo de rayos X de ánodo de W irradiado con electrones de 50 keV (filtro de Al) obtenido con PENELOPE.

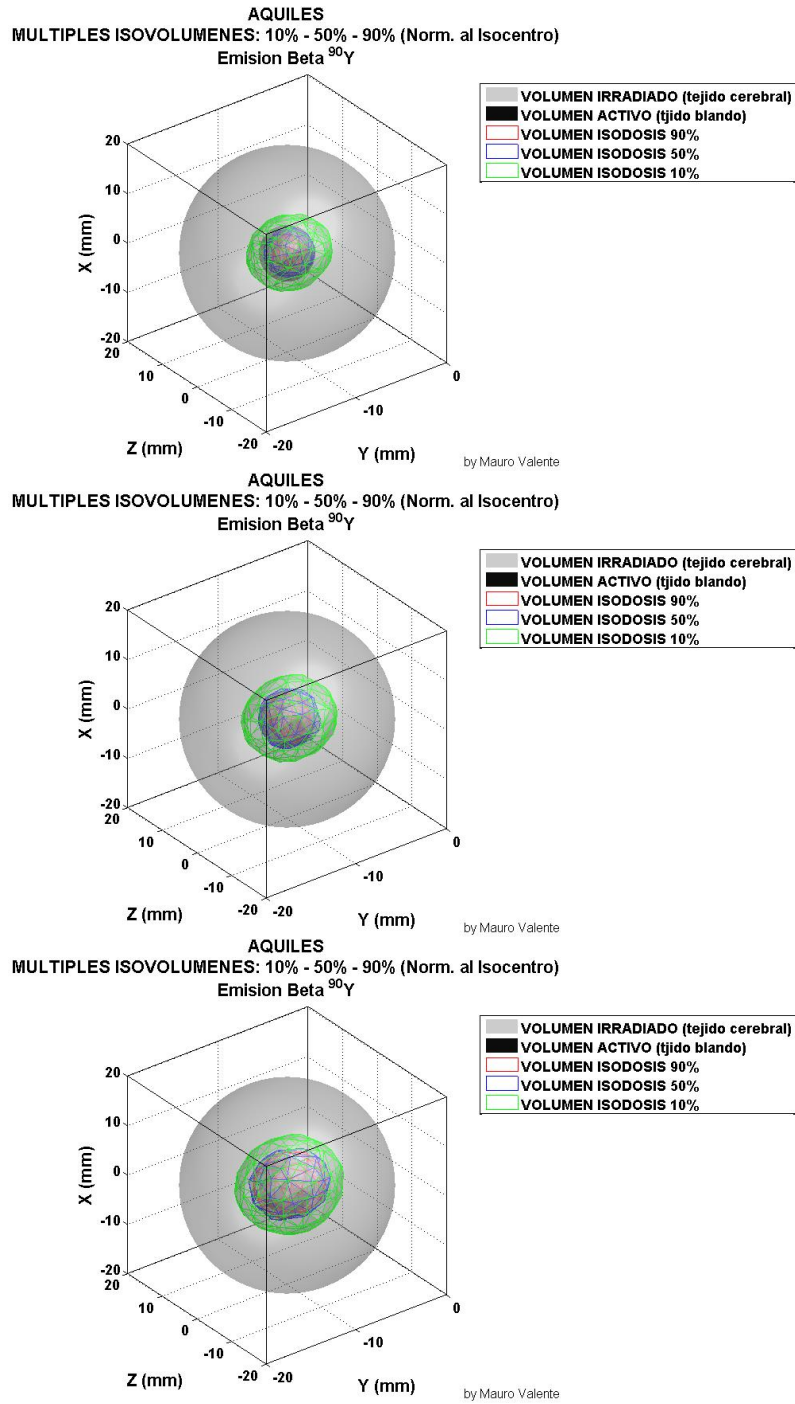


Figura 38. Kernels de dosis para microesferas de  $^{90}\text{Y}$  en tejido blanco con diferente binding (0, 0.5 y 1) obtenido con PENELOPE.

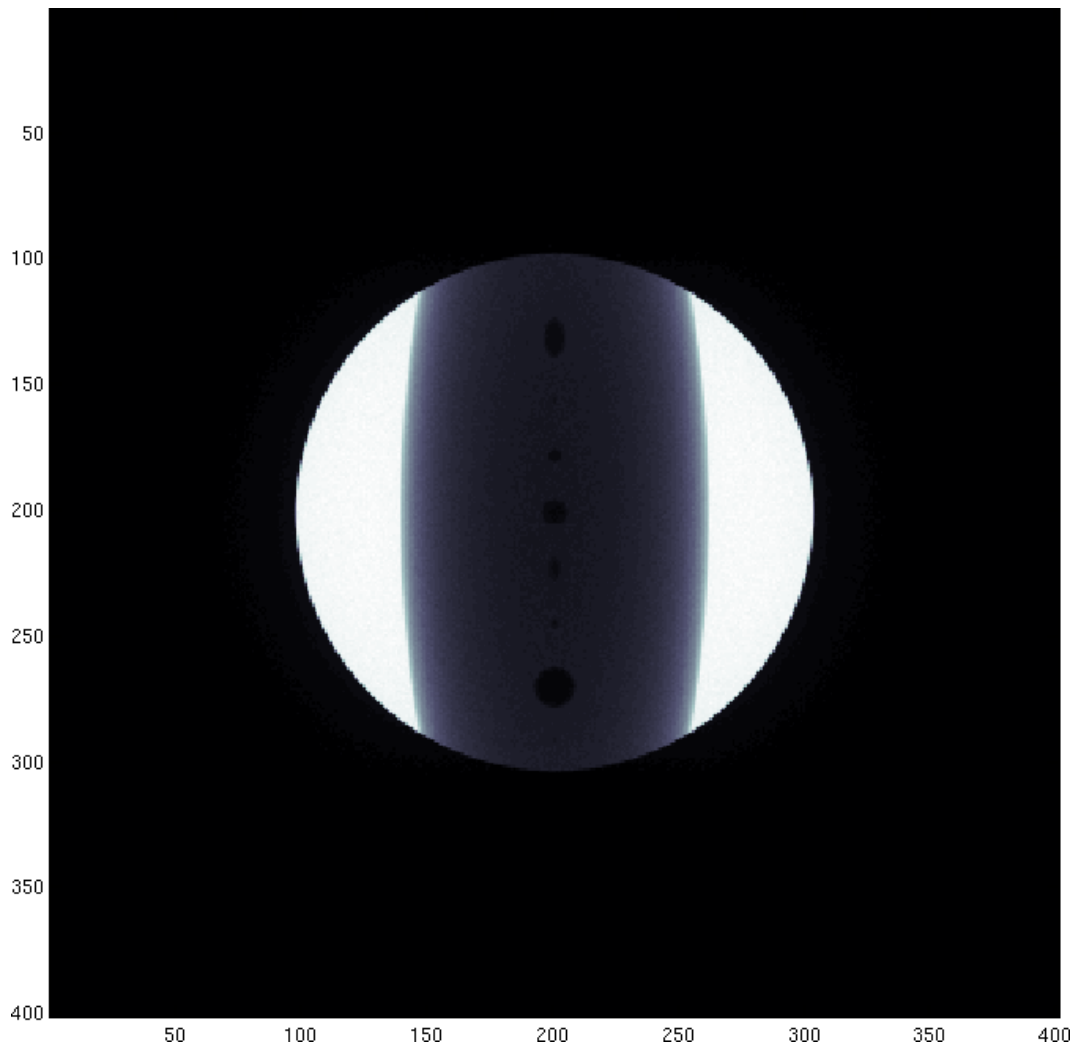


Figura 39. Imagen mamográfica por contraste de absorción de rayos X en fantoma con microcalcificaciones obtenida con PENELOPE.



# MÓDULO IV

## Simulaciones Monte Carlo

---

## **4.. Módulo IV: Ejemplos de aplicación del método Monte Carlo en física médica**

El capítulo 4. es una breve introducción a los conceptos de técnicas numéricas de simulación Monte Carlo para aplicaciones en problemas de aplicación en física, y en particular en transporte de radiación. La exposición es de carácter escueta y está basada en bibliografía especializada, de donde pueden estudiarse los temas desarrollados en este módulo.

### **4.1.. Teleterapia convencional**

...

### **4.2.. Radiología**

...

### **4.3.. Medicina nuclear**

...

### **4.4.. Radioterapia avanzada y dosimetría no-convencional**

...

## **Referencias**

- [1] I. Bankman. *Handbook of medical image processing and analysis*. Elsevier Academic Press, California, 2009.
- [2] Seibert A. Leidholt E. Boone J. Bushberg, J. *The essential physics of medical imaging*. Lippincott Williams and Wilkins, 2001.
- [3] T. Buzug. *Computed Tomography*. Springer-Verlag, 2008.
- [4] P. Suetens. *Fundamentals of Medical Imaging*. Cambridge University Press, second edition, 2009.
- [5] P. Duvauchelle, N. Freud, V. Kaftandjian, and D. Babot. A computer code to simulate x-ray imaging techniques. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, (170):245–258, 2000.
- [6] S. España, J. L. Herraiz, E. Vicente, J. J. Vaquero, M. Desco, and J. M. Udias. Penelopet, a monte carlo pet simulation tool based on penelope: features and validation. *Phys. Med. Biol.*, (54):1723–1742, 2009.
- [7] G. Tirao, C. Quintana, and M. Valente. Mammography image quality optimisation: a monte carlo study. *Int. J. Low Radiation*, 7(4):276–297, 2010.
- [8] C. Epstein. *Introduction to the mathematics of medical imaging*. Siam, Philadelphia, 2003.
- [9] G. Saha. *Physics and radiobiology of nuclear medicine*. Springer-Verlag, 2006.
- [10] J.M. Fernández-Varea, J. empau and F. Salvat, S.; Fernández-Varea. *PENELOPE-2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*. Nuclear Energy Agency, Barcelona, Spain, 2009.

- [11] F.H. Attix. *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*. Wiley-VCH, 1987.
- [12] S Dupree and S. Fraley. *A Monte Carlo premier*. Kluwer-Plenum, New York., 2002.
- [13] P. Bevington and D. Keith Robinson. *Data reduction and error analysis*. McGraw Hill, 2003.
- [14] H. Tijms. *Understanding Probability: Chance Rules in Everyday Life*. Cambridge University Press, 2004.
- [15] M. Ljungberg, S. Strand, and M. King, editors. *Monte Carlo calculations in nuclear medicine: Applications in diagnostic imaging*. Institute of Physics Publishing, 1998.
- [16] J. Ducote and S. Molloy. Scatter correction in digital mammography based on image deconvolution. *Physics in Medicine and Biology*, Vol. 55(No. 5):1295–1309, March 2010.
- [17] C. Arvanitis and R. Speller. Quantitative contrast-enhanced mammography for contrast medium kinetics studies. *Physics in Medicine and Biology*, Vol. 54(No. 5):6041–6064, September 2009.
- [18] A. Kak and M. Slaney. *Principles of Computerized Tomographic Imaging*. IEEE Press, New York, 2001.
- [19] S. Bushong. *Computed Tomography*. McGraw-Hill, 2000.
- [20] M. Stabin. *Fundamentals of nuclear medicine dosimetry*. Springer Science+Business Media, Spring Street, New York, NY 10013, USA, 2008.
- [21] A. Ferrari et al. *Fluka: a multi-particle transport code* v. 2011.1.2 ORGANISATION EUROPÉENNE POUR LA RECHERCHE NUCLÉAIRE CERN, 2012.