



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
INSTITUTO DE FÍSICA

Cálculo de espectros de electrones generados en LiF por rayos-X de
bajas energías y su transferencia lineal de energía (LET)

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA MÉDICA)

PRESENTA:
ALEXIS CABRERA SANTIAGO

DIRECTORA DE TESIS
DRA. GUERDA MASSILLON JACQUES LOUIS
INSTITUTO DE FÍSICA

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR
DRA. MARÍA ESTER BRANDAN SIQUÉS
INSTITUTO DE FÍSICA
DRA. MARÍA ISABEL GAMBOA de BUEN
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES
M. en C. PORFIRIO DÍAZ AGUIRRE
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

MÉXICO, D. F. Marzo de 2014



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

A mi madre, Georgina (Q.E.P.D)

Agradecimientos

A mi directora de tesis, Dra. Guerda Massillon, por haber confiado en mí, por la dirección de este trabajo y por brindarme su valiosa amistad.

A los miembros de mi comité tutor: Dra. María Ester Brandan, Dra. Isabel Gamboa de Buen y M. en C. Porfirio Díaz por su apoyo, orientación y asesoría en el desarrollo de mi tesis.

A los miembros de mi comité sinodal: Dra. María Ester Brandan, Dra. Olga Ávila, Dra. Guerda Massillon, Dr. Salvador A. Cruz y Dr. Jorge Rickards por sus observaciones y comentarios en la revisión de mi tesis.

A la Dra. María Ester Brandan, Dra. Isabel Gamboa de Buen, Dra. Guerda Massillon y M. en C. Eduardo López Pineda por las reuniones en donde se aprendía acerca del código Monte Carlo.

A mi padre, por su apoyo, ánimos y consejos. A mis tíos, Amparo, Gaspar y Jesús por su apoyo y ánimos que siempre me han brindado.

Al M. en C. Cesar Ruiz Trejo e Iván Muñoz Molina por su apoyo, consejos y amistad. A mis amigos, Fernando, Anuar, Luis, Gerardo, Isaí y Jacob por su apoyo y los buenos momentos que hemos compartido. A ti Brisa, por tu compañía y el apoyo incondicional a lo largo de este proceso.

Al instituto de Física de la UNAM por facilitarme un espacio en sus instalaciones. A los proyectos PAPIIT-UNAM “IN105813” y CONACyT “127409”.

Resumen

Se han calculado mediante simulaciones Monte Carlo (EGSnrc) los espectros de fluencia de electrones (totales y secundarios) en LiF y agua líquida generados con rayos-X de bajas energías de la serie de haces angostos del Organismo Internacional de Estándares (NS-ISO). Se ha investigado la correlación de estos espectros con la transferencia lineal de energía (LET) y se han evaluado diferentes materiales dispersores que tienen interés clínico (aire, polimetilmetacrilato, poliestireno y agua sólida). Debido a que los electrones de baja energía tienen un alto poder de frenado y corto alcance, se ha estudiado la LET de los electrones secundarios generados en LiF. En este trabajo se ha observado que la fluencia de electrones secundarios tienen una gran contribución en la fluencia total de electrones (primarios más secundarios) a un 1 keV con porcentajes del 30 % hasta el 95 % dependiendo de la energía del haz de fotones. Como consecuencia de esto, la LET promedio de los electrones secundarios generados en LiF son 3 a 6 veces mayor que la LET de la fluencia total de electrones. La curva de la LET promedio vs la energía promedio del haz de fotones disminuye hacia un mínimo local alrededor de 40 keV, después incrementa y alcanza un máximo local alrededor de 100 keV y finalmente disminuye cuando la energía del haz de fotones incrementa. Los resultados no muestran cambios significativos en la energía promedio de los electrones para los diferentes materiales dispersores ni en la LET (0.1 %) en LiF. La LET de un haz de 20 kV llega a ser hasta 10 veces mayor que la de ^{60}Co , lo cual podría explicar la alta dependencia de la respuesta de los dosímetros LiF y sistemas biológicos con fotones de bajas energía que se reporta generalmente en la literatura.

Abstract

Electron fluence spectra in LiF and water generated by ISO narrow x-ray spectra (20 kV to 300 kV), ^{137}Cs and ^{60}Co gamma were calculated using the EGSnrc Monte Carlo code. This work aimed to investigate the electron fluence spectra generated in LiF by a broad photon energy beams and their relation with the linear energy transfer (LET) as well as the effect of exposing the LiF material in different tissue equivalent materials (polystyrene, solid water y polymethyl metacrylate). In particular, the LET of secondary electron generated in LiF have been studied due to the high stopping power and short range of the low-energy electrons. We observed that the secondary electron fluence has an important contribution on the total electron fluence (primary + secondary) with percentage from 30 % up to 95 % at 1 keV depending on the photon energy beams. As a consequence of that, the average LET of these secondary electrons are three to six times larger than that of the total electron fluence. The LET versus average energy photon curve for both (total and secondary electron fluence) decreases from a maximum value at very low-energy, downs to a minimum value around 40 keV, increases again, reaches a maximum at ~ 100 keV and after decreases toward ^{60}Co gamma energy. No significant difference (variation of $\sim 0.1\%$) in the LET as a function of the mean energy photon for the different scattering materials has been observed. The LET of the 20 kV x-ray is ten times higher than the ^{60}Co gamma, which could explain the high response to low-energy photon generally reported for LiF dosimeter and biological system.

Índice general

Agradecimientos	II
Resumen	III
Abstract	IV
1. Introducción	1
1.1. Objetivos del trabajo	4
1.1.1. Objetivos particulares	4
2. Conceptos básicos	5
2.1. Dosimetría de fotones de bajas energías	5
2.1.1. Interacción de los fotones con la materia	5
2.1.1.1. Efecto fotoeléctrico	6
2.1.1.2. Efecto Compton	7
2.1.1.3. Producción de pares	10
2.1.1.4. Atenuación de los fotones en la materia	11
2.1.2. Interacción de los electrones con la materia	12
2.1.2.1. Poder de frenado	13
2.1.2.2. Poder másico de frenado restringido y transferencia lineal de energía	15
2.1.2.3. Alcance R_{CSDA}	17
2.1.3. Rayos-X	17
2.1.4. Protocolo de dosimetría de rayos-X de bajas energías TG-61 .	19
2.2. Dosimetría termoluminiscente	21
2.3. Simulación Monte Carlo	23
2.3.1. Números aleatorios	23
2.3.2. Teoría del muestreo	24

2.3.2.1.	Método directo	25
2.3.2.2.	Método de rechazo	26
2.3.2.3.	Método mixto	26
2.3.3.	Transporte de fotones	27
2.3.4.	Transporte de electrones	27
2.3.5.	Reducción de varianza	28
3.	Métodos	29
3.1.	Código Monte Carlo	29
3.2.	Geometría a estudiar	31
3.3.	Detalle y optimización de los cálculos	35
3.3.1.	Estepe	35
3.3.2.	Energía de corte	36
3.3.3.	Secciones eficaces	36
3.3.4.	Otros parámetros de transporte	37
3.4.	Simulaciones realizadas	38
3.4.1.	Cálculo de dosis y espectros de fluencia de electrones	38
3.4.2.	Cálculo de la LET	38
4.	Resultados	40
4.1.	Espectro de fluencia total de electrones	40
4.2.	Espectro de fluencia de electrones secundarios	44
4.3.	Alcance y energía promedio del electrón	46
4.4.	LET en LiF	50
4.5.	LET en agua	54
5.	Discusiones	57
5.1.	Espectro de fluencia de electrones	57
5.2.	Alcance y energía promedio del electrón	59
5.3.	LET en LiF	60
5.4.	LET en agua	61
6.	Conclusiones	63

7. Apéndices	65
7.1. Apéndice A	65
7.1.1. Códigos de usuario EGSnrc	65
7.2. Apéndice B	67
7.2.1. Instalación del código Monte Carlo	67
7.2.1.1. Instalación en Mac-OSX	67
7.2.1.2. Instalación en Linux	68
7.3. Apéndice C	69
7.3.1. Código en Matlab para el cálculo de la LET	69
Bibliografía	73

Capítulo 1

Introducción

El nivel de daño biológico o efecto en la respuesta de un dosímetro que produce un tipo de radiación es función de la cantidad y de la distribución espacial de la energía depositada en el medio. Las magnitudes dosimétricas que describen lo anterior son la dosis y la transferencia lineal de energía (LET), respectivamente. La dosis se define como la energía promedio impartida ε por unidad de masa m en un punto de interés [1], mientras que la LET (poder de frenado de colisiones restringido L_{Δ}) se define como la energía promedio que pierden las partículas cargadas al atravesar un medio por unidad de longitud [2]. La LET es una magnitud que determina la calidad de la radiación y es proporcional a la cantidad de ionizaciones que producen las partículas cargadas por unidad de longitud en un medio. La dosis y la LET pueden ser calculadas mediante el espectro de fluencia de partículas cargadas [2], que es el número de partículas cargadas N que atraviesan una sección transversal A por unidad de energía en un medio dado.

La LET y los espectros de electrones han sido estudiados desde hace más de 50 años. En 1946, Lea calculó los poderes de frenado y los espectros de electrones producidos en agua para diferentes tipos de radiación (electrones, protones y partículas alfa). Un año después, Gray introdujo el concepto de densidad de ionización lineal para rayos-X, rayos gamma y partículas beta, y fue hasta 1952 cuando Zirkle introdujo el concepto de transferencia lineal de energía (LET) [2].

Las partículas cargadas pesadas de baja energía tienen un alto poder de ionización y alcances pequeños, por lo que su energía es depositada de manera local. Por otro lado, los fotones son considerados de baja LET, debido a que la energía transferida por los fotones al medio se distribuye de manera uniforme en volúmenes relativamente grandes. El cálculo de la LET para fotones de bajas energías es determinado por los electrones puestos en movimiento en el medio. El espectro de fluencia de electrones originado se conforma de dos componentes: la primera es la contribución de los electrones primarios que se producen en la interacción de los fotones con el medio; la segunda es la contribución de los electrones secundarios, los cuales son puestos en movimiento por los electrones primarios.

En dosimetría personal, ambiental y aplicaciones médicas es de gran importancia conocer de manera precisa la dosis absorbida en un medio para cierto tipo de radiación. Entre los dosímetros más utilizados está el dosímetro termoluminiscente (TL), y el más conocido es el TLD-100, cuya composición es fluoruro de litio (LiF) con impurezas de Mg y Ti. Este dosímetro tiene la característica de ser aproximadamente tejido equivalente (número atómico efectivo 8.2, similar al tejido 7.4) [3] y de tamaño relativamente pequeño. Sin embargo, tiene limitaciones en cuanto a su sensibilidad, eficiencia y la discriminación del tipo y la energía de la radiación a la que se expone.

Durante muchos años, se ha estudiado la respuesta del LiF para diferentes tipos de radiación. En los años 1980s, Waligórski y Katz [4], Horowitz [5], Horowitz y Kalef-Ezra [6], desarrollaron la teoría de estructura de trazas para modelar la respuesta TL del LiF en términos de la energía depositada por partículas cargadas pesadas. Esta teoría es aún utilizada en la actualidad para describir la respuesta del LiF expuesto a partículas cargadas pesadas. Por otro lado, para fotones en el intervalo de energías de 10–300 keV existe un comportamiento anómalo en la respuesta TL del LiF, es decir, la curva de la eficiencia TL versus la energía promedio del haz de fotones tiene un mínimo local alrededor de 100 keV. Este problema ha sido abordado por Davis et al [7], Nunn et al [8] y Massillon-JL et al [9]. Estos autores obtuvieron experimentalmente y mediante simulaciones Monte Carlo la dependencia con la energía de la respuesta TL en LiF expuestos a rayos-X de bajas energías, mientras que Olko et al [10] han desarrollado una interpretación microdosimétrica

de la respuesta TL del LiF expuestos a rayos-X de bajas energías. En estos trabajos los autores concluyen que la respuesta TL del LiF puede ser explicado como un efecto de la densidad de ionización de la radiación en cuestión.

Otro problema de debate actual, donde está involucrada la LET de fotones de bajas energías, es el factor de ponderación por radiación en el cálculo de la dosis efectiva, el cual es de interés en protección radiológica. La Comisión Internacional de Protección Radiológica (ICRP) en su publicación 103 reporta [11] que el factor de ponderación de la radiación es 1, para rayos-X, rayos gamma y electrones de todas las energías. Esto supone que la eficacia biológica de tales haces es la misma. Sin embargo, actualmente se ha renovado la preocupación sobre el daño biológico que los fotones de bajas energías provocan. Se ha reportado que los rayos-X en mamografía podrían ser 3–4 veces más eficaces que los rayos-X de energía intermedia [12], y hasta 8 veces mayor que los rayos gamma de ^{60}Co , y se argumenta [13] que es debido a la producción de electrones secundarios con una alta LET.

Esta tesis se centra en el cálculo de la LET de los espectros de fluencia de electrones (totales y secundarios) generados en LiF y agua líquida por rayos-X en el intervalo de 30 kV a 300 kV de la serie de haces angostos del organismo internacional de estándares (NS-ISO) y por gammas de ^{137}Cs y ^{60}Co . Debido a que en el área clínica, así como en otras áreas de la ciencia, se utilizan materiales dispersores como el polimetilmetacrilato, poliestireno y agua sólida, por lo que en este trabajo se incluye el cálculo de los espectros de electrones en LiF rodeado de estos materiales. El análisis del presente trabajo se llevará a cabo utilizando el código Monte Carlo EGSnrc desarrollado por el National Research Council Canada, en el paquete FLURZnrc y DOSRZnrc.

1.1. Objetivos del trabajo

Calcular los espectros de electrones (totales y secundarios) generados en LiF y agua líquida por rayos-X de bajas energías de la serie de haces angostos del organismo internacional de estándares (NS-ISO) y por rayos gamma de ^{137}Cs y ^{60}Co evaluados en diferentes materiales dispersores (aire, polimetilmetacrilato, poliestireno y agua sólida) y relacionar el espectro de electrones en cuestión con su correspondiente LET (en LiF y agua).

1.1.1. Objetivos particulares

- Optimizar los parámetros de transporte de los fotones y electrones en los códigos FLURZnrc y DOSRZnrc.
- Diseñar la geometría sobre el cual se realizarán las simulaciones Monte Carlo.
- Realizar el cálculo de los espectros de electrones (totales y secundarios) originados en LiF y agua líquida por los diferentes espectros de rayos-X, ^{137}Cs y ^{60}Co , evaluados con diferentes materiales dispersores.
- Calcular la LET en LiF y agua líquida

Capítulo 2

Conceptos básicos

2.1. Dosimetría de fotones de bajas energías

La dosimetría de la radiación tiene como objetivo medir la energía impartida (dosis) por la radiación ionizante en un medio determinado. La radiación ionizante es aquella que por su energía puede desligar un electrón del átomo. Tal efecto es denominado ionización y consiste en la formación de un par de iones, el negativo (electrón) y el positivo (átomo ionizado). Existen fuentes naturales de radiación ionizante que han estado presentes desde los orígenes de la Tierra y se clasifican como de origen extraterrestre y terrestre. La radiación proveniente del espacio exterior son los rayos cósmicos, que son partículas muy veloces y energéticas, mientras que la radiación terrestre es proveniente de algunos minerales presentes en rocas ígneas, como son el ^{238}U , ^{232}Th y el ^{40}K [14]. En la actualidad, además de las fuentes naturales, se producen radiaciones ionizantes de manera artificial mediante tubos de rayos-X y/o aceleradores de partículas.

2.1.1. Interacción de los fotones con la materia

Los rayos-X se clasifican según su energía: baja energía, en donde los electrones son acelerados por una diferencia de potencial que va desde 10 kV hasta 100 kV, y energía intermedia, donde los electrones son acelerados con diferencias de potencial entre 100 kV y 300 kV [15]. Un haz de rayos-X es atenuado mediante la absorción o dispersión de la radiación en el medio. En este último caso el fotón colisiona con

una partícula del medio absorbente y como resultado cambia de dirección. Los tres procesos principales por los cuales los fotones interactúan con la materia son: el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton y la producción de pares. Como se muestra en la figura 2.1, cada proceso tiene cierta probabilidad de ocurrir y esto depende del número atómico del medio absorbente y de la energía del fotón incidente.

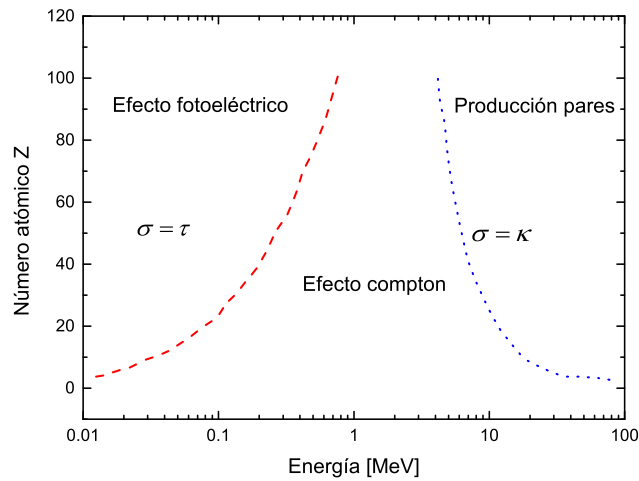


Figura 2.1: Importancia relativa de los tres procesos más importantes en la interacción de los fotones con la materia. La curva roja (discontinua) muestra la energía del fotón incidente y el número atómico del medio donde la probabilidad del efecto fotoeléctrico τ es igual al del efecto Compton σ , y la línea azul (punteada) muestra la probabilidad donde el efecto Compton σ es igual a la producción de pares κ [1].

2.1.1.1. Efecto fotoeléctrico

En la figura 2.2 se ilustra el efecto fotoeléctrico, el cual consiste en la transferencia de toda la energía del fotón al electrón que se encuentra en una capa atómica. El electrón es emitido con una energía cinética T , igual a la energía del fotón incidente $h\nu$ menos la energía de amarre del electrón en el átomo, E_b .

$$T = h\nu - E_b. \quad (2.1)$$

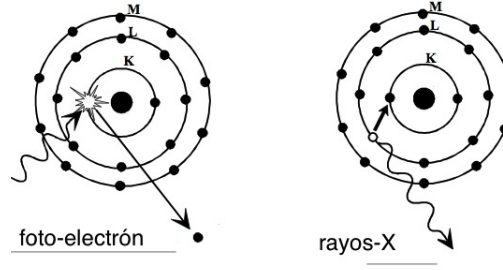


Figura 2.2: Efecto fotoeléctrico.

La probabilidad de interacción está determinada por la sección eficaz. El efecto fotoeléctrico tiene mayor probabilidad de interacción para bajas energías y átomos de número atómico alto debido a que su sección eficaz es inversamente proporcional a $(h\nu)^3$ y directamente proporcional a Z^4 . La sección eficaz está descrita como [1]:

$$\tau \sim \frac{Z^4}{(h\nu)^3}, \quad (2.2)$$

y el coeficiente másico de atenuación esta dado por:

$$\frac{\tau}{\rho} \sim \left(\frac{Z}{h\nu} \right)^3. \quad (2.3)$$

2.1.1.2. Efecto Compton

Este efecto consiste en la interacción de un fotón con un electrón orbital, el cual se considera cuasi-libre y estacionario. A diferencia del efecto fotoeléctrico, el fotón entrega parte de su energía al electrón, este último es expulsado del átomo a un ángulo φ con respecto de la dirección del fotón incidente, y el nuevo fotón se emite a un ángulo θ con una longitud de onda mayor que la del fotón incidente, como se ilustra en la figura 2.3.

La solución de la cinemática del efecto Compton es la siguiente [1]:

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + (h\nu/m_0c^2)(1 - \cos\varphi)}, \quad (2.4)$$

$$T = h\nu - h\nu', \quad (2.5)$$

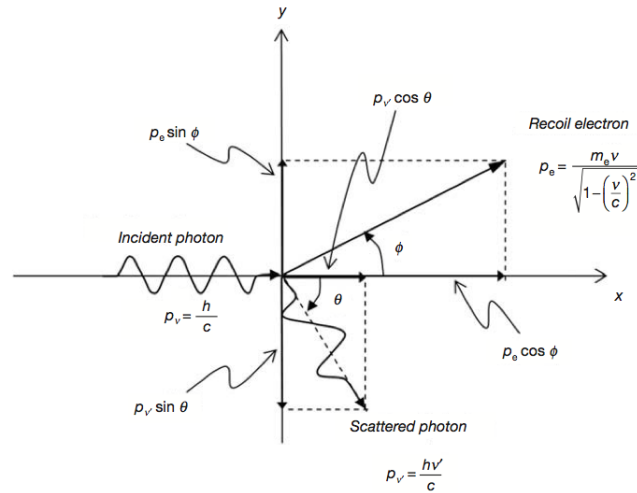


Figura 2.3: Efecto Compton [18].

$$\cot\theta = \left(1 + \frac{h\nu}{m_0c^2}\right) \tan\left(\frac{\varphi}{2}\right), \quad (2.6)$$

donde $h\nu$, $h\nu'$ y m_0 son la energía del fotón incidente, la energía del fotón dispersado y la masa en reposo del electrón, respectivamente.

La sección eficaz Compton (Fig. 2.4) o de Klein-Nishina (K-N) así como su correspondiente sección eficaz de transferencia de energía solo depende de $h\nu$, es decir, son independientes de Z , por lo que, en la región donde el efecto Compton es dominante, la probabilidad de interacción es casi constante como función de la energía.

El producto de Z y la sección eficaz de K-N da como resultado la sección eficaz por átomo. Para obtener el coeficiente másico de atenuación, se toma en cuenta la densidad electrónica $N_A Z/A$, por lo tanto, el coeficiente másico de atenuación Compton puede ser expresado como:

$$\frac{\sigma}{\rho} = \frac{N_A Z}{A} e\sigma. \quad (2.7)$$

Después de la interacción Compton, los fotones dispersados tienen la posibilidad de salir en todas direcciones, teniendo una tendencia de ir hacia adelante cuando la energía del fotón incidente aumenta (Fig. 2.5). Por otro lado, a medida que la energía del fotón incidente aumenta, el ángulo de dispersión del electrón se vuelve

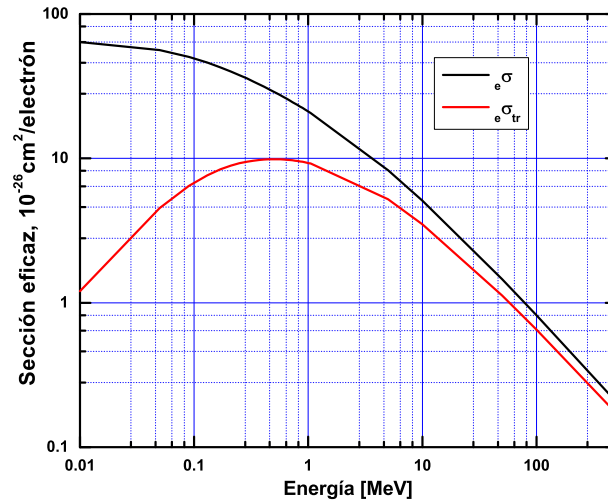


Figura 2.4: Sección eficaz por electrón $e\sigma$ y la sección eficaz de transferencia de energía por electrón $e\sigma_{tr}$ [1].

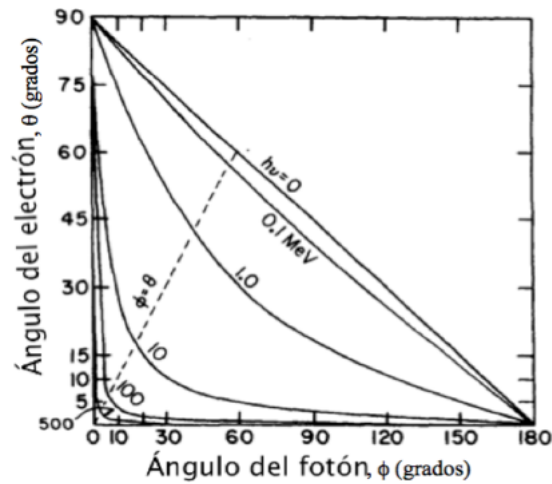


Figura 2.5: Ángulo θ de dispersión del fotón Compton en unidades de ángulo sólido. Las curvas muestran diferentes energías iniciales del fotón [1].

más pequeño.

2.1.1.3. Producción de pares

La producción de pares es el proceso físico que consiste en la transformación de la energía de un fotón en un par electrón-positrón (Fig. 2.6). Este proceso se lleva a cabo mediante la interacción del fotón y un campo de fuerza coloumbiana cerca del núcleo atómico. Esta interacción puede suceder si el fotón tiene una energía mayor que dos veces la masa en reposo del electrón, es decir, mayor que 1.022 MeV. El par electrón-positrón sale del átomo con una energía cinética promedio igual a [1]:

$$T = \frac{h\nu - 1.022}{2} [MeV]. \quad (2.8)$$

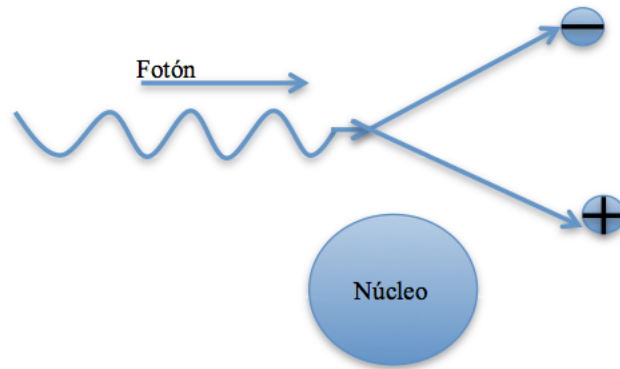


Figura 2.6: Producción de pares.

La sección eficaz total de la producción de pares está descrita mediante la siguiente ecuación:

$${}_a\kappa = \sigma_0 Z^2 \bar{P}, \quad (2.9)$$

donde $\sigma_0 = 5.80 \times 10^{-28} \frac{cm^2}{\text{electrón}}$, y \bar{P} es un parámetro que es función de la energía con la que sale el positrón. Para obtener el coeficiente másico de atenuación de la producción de pares se utiliza la misma técnica que en la ec. (2.7), y se obtiene que [1]:

$$\frac{\kappa}{\rho} = {}_a\kappa \frac{N_A}{A}. \quad (2.10)$$

2.1.1.4. Atenuación de los fotones en la materia

Considerando un haz de partículas sin carga, en un caso ideal donde las partículas que interactúan con el medio son absorbidas y no hay producción de radiación dispersa, la atenuación de estas partículas sin carga pueden ser modeladas por una ley exponencial simple y está dada como [1]:

$$I = I_0 e^{-\mu x}, \quad (2.11)$$

donde I_0 es el número de partículas incidentes, I es el número de partículas que atraviesan el medio sin interactuar, x el espesor y μ el coeficiente de atenuación .

El coeficiente de atenuación μ proporciona la probabilidad de interacción por unidad de longitud del medio y cuando es dividido por la densidad se denomina coeficiente másico de atenuación μ/ρ .

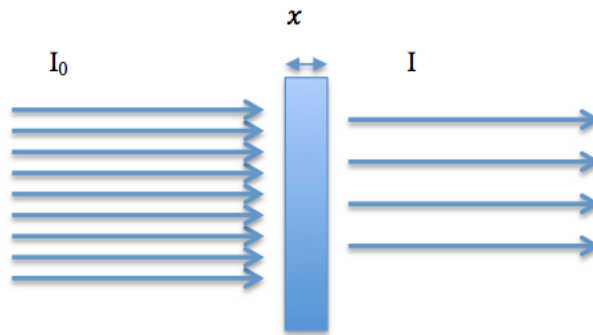


Figura 2.7: Atenuación de un haz de fotones en un medio de espesor x .

El coeficiente másico de atenuación para fotones se compone de la suma de los coeficientes de los diferentes procesos de interacción (Fig. 2.8), es decir:

$$\frac{\mu}{\rho} = \frac{\tau}{\rho} + \frac{\sigma}{\rho} + \frac{\kappa}{\rho} \quad (2.12)$$

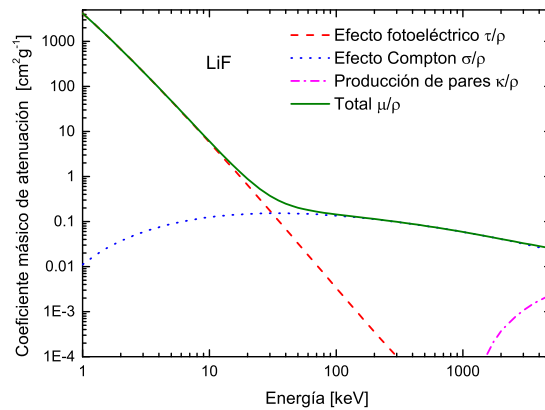


Figura 2.8: Coeficiente másico de atenuación en el LiF como función de la energía del fotón. Se indica la contribución de cada uno de los tres efectos principales [16].

2.1.2. Interacción de los electrones con la materia

El electrón se considera una partícula cargada ligera y su interacción con el medio depende de su energía cinética y de las propiedades físicas del medio. La fuerza coulombiana es la responsable principal del comportamiento del electrón en el medio. Cuando el electrón interactúa con el medio pierde energía gradualmente a lo largo de su trayectoria debido a las diferentes colisiones con los electrones o los núcleos atómicos. Estos tipos de colisiones pueden ser elásticas, inelásticas o radiativas, y se clasifican de acuerdo al tamaño relativo del parámetro de impacto b vs el radio atómico a [1] (Fig. 2.9).

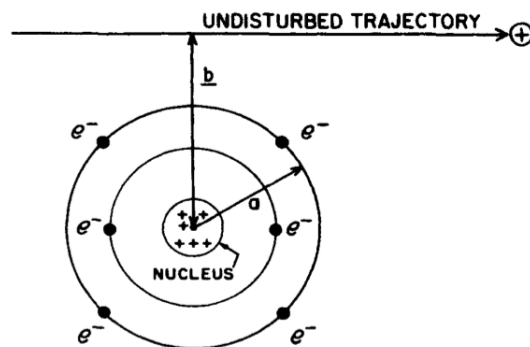


Figura 2.9: Colisión suave de una partícula cargada con un átomo [1].

- Colisiones suaves ($b \gg a$): Estas colisiones son aquellas donde la trayectoria de la partícula cargada pasa relativamente lejos del átomo. Este tipo de colisiones puede ocasionar excitaciones de los niveles más altos de energía y la transferencia de una pequeña cantidad de energía.
- Colisiones fuertes ($b \sim a$): Este tipo de colisiones ocurre cuando el parámetro de impacto es cercano al tamaño del radio atómico del medio. El electrón puede interactuar directamente con los electrones del átomo, produciendo ionización y como consecuencia rayos-X característicos o electrones Auger.
- Interacciones de fuerza coulombiana con el campo nuclear externo ($b < a$): Este tipo de colisiones se refiere a la interacción del electrón cerca del núcleo, es elástica en la mayoría de los casos y es responsable de que el electrón tenga una trayectoria tortuosa. La otra manera de colisionar es mediante procesos inelásticos, es decir, el electrón se desvía de su trayectoria perdiendo energía mediante la emisión de un fotón llamado radiación de frenado (bremsstrahlung).

2.1.2.1. Poder de frenado

El poder de frenado es la tasa de pérdida de energía cinética T de una partícula cargada por unidad de longitud x en un medio dado. Depende del tipo de partícula cargada, la energía cinética y el número atómico del medio y tiene unidad de $MeVcm^{-1}$. Cuando se divide el poder de frenado por la densidad se obtiene el poder másico de frenado, el cual tiene unidades de $MeVcm^2g^{-1}$. El poder de frenado consta de dos términos, el primero toma en cuenta las pérdidas por colisiones (suaves y fuertes) y el segundo las pérdidas radiativas, es decir:

$$\left(\frac{dT}{\rho dx}\right) = \left(\frac{dT}{\rho dx}\right)_c + \left(\frac{dT}{\rho dx}\right)_r. \quad (2.13)$$

El poder másico de frenado de colisiones para electrones es descrito por la ecuación de Bethe basado en las secciones eficaces de Møller y está definida por [1]:

$$\left(\frac{dT}{\rho dx}\right)_c = k \left[\ln \left(\frac{\tau^2 (\tau + 2)}{2 \left(\frac{I}{m_0 c^2} \right)^2} \right) + F^- - \delta - \frac{2C}{Z} \right], \quad (2.14)$$

donde:

$$k = 0.1535 \frac{Z}{A\beta^2},$$

$$\beta = \frac{v}{c}$$

δ es la corrección por capas,

$\frac{2C}{Z}$ es la corrección por polarización,

y

$$F^- = 1 - \beta^2 + \frac{\frac{\tau^2}{8} - 2(\tau + 1)\ln 2}{(\tau + 1)^2}. \quad (2.15)$$

El poder másico de frenado radiativo tiene mayor importancia para partículas ligeras, tales como electrones y positrones, debido a que la sección eficaz σ_0 es inversamente proporcional al cuadrado de la masa de la partícula. El poder másico de frenado radiativo está dado por [1]:

$$\left(\frac{dT}{\rho dx} \right)_r = \sigma_0 \frac{N_A Z^2}{A} (T + m_0 c^2) \overline{B}_r, \quad (2.16)$$

donde $\sigma_0 = \frac{1}{137} \left(\frac{e^2}{m_0 c^2} \right)^2 = 5.80 \times 10^{-28} \frac{cm^2}{\text{átomo}}$, T es la energía cinética del electrón expresada en MeV y \overline{B}_r es una función de Z y T .

En la figura 2.10 se puede observar el comportamiento del poder másico de frenado de colisión y radiativo como función de la energía. En la región de bajas energías el poder másico de frenado de colisiones es más importante, mientras que para altas energías la componente radiativa llega a ser más significativa. Esto es debido a que la contribución radiativa es proporcional a T y Z , mientras que la componente colisional por arriba de $3 MeV$ se mantiene aproximadamente constante.

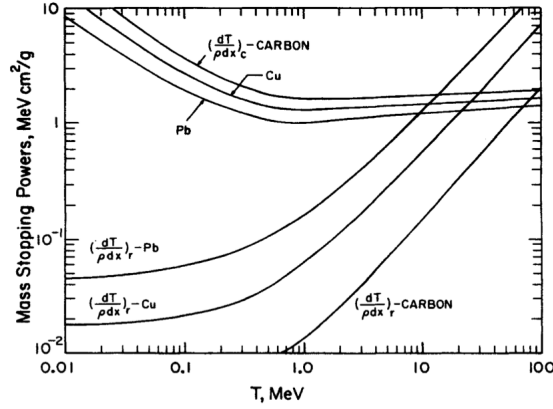


Figura 2.10: Poder másico de frenado de colisiones y radiativo como función de la energía del electrón. Se indican los poderes de frenado en cobre, plomo y carbón. Se observa que para bajas energías, la contribución del poder de frenado de colisiones predomina, mientras que para altas energías la radiativa es más significativa [1].

2.1.2.2. Poder másico de frenado restringido y transferencia lineal de energía

El poder de frenado restringido $\left(\frac{dT}{\rho dx}\right)_{\Delta}$ es la fracción del poder másico de colisiones que toma en cuenta todas las colisiones suaves y aquellas colisiones fuertes que dan como resultado electrones, también llamados rayos δ , que tienen una energía menor que Δ . La energía Δ es también llamada energía de corte. El poder másico de frenado restringido está relacionado con la transferencia lineal de energía o LET (por su siglas en inglés), esta última tiene unidades de $keV/\mu m$ y es calculada como [1]:

$$L_{\Delta} = \frac{\rho}{10} \left[\left(\frac{dT}{\rho dx} \right)_{\Delta} \right]. \quad (2.17)$$

El concepto de LET es de importancia en protección radiológica, radiobiología y microdosimetría. Es un parámetro que determina la densidad de ionización que producen las partículas cargadas a lo largo de su trayectoria. Cuando la energía de corte se incrementa hasta el valor de $\frac{T}{2}$ (máxima energía que transfiere un electrón en una colisión) entonces:

$$\left(\frac{dT}{\rho dx} \right)_{\Delta} = \left(\frac{dT}{\rho dx} \right)_{c}. \quad (2.18)$$

El poder másico de frenado restringido está dado por la siguiente ecuación [1]:

$$\left(\frac{dT}{\rho dx}\right)_{\Delta} = k \left[\ln \left(\frac{\tau^2(\tau+2)}{2 \left(\frac{I}{m_0 c^2}\right)^2} \right) + G^-(\tau, \eta) - \delta - \frac{2C}{Z} \right], \quad (2.19)$$

donde $\tau = T/m_0 c^2$, $\eta = \Delta/T$ y la función G^- en la ecuación 2.19 está determinada de la siguiente manera:

$$G^-(\tau, \eta) = -1 - \beta^2 + \ln [4(1-\eta)\eta] + (1-\eta)^{-1} + (1-\beta^2) \left[\frac{\tau^2 \eta^2}{2} + (2\tau+1) \ln(1-\eta) \right]. \quad (2.20)$$

Como se puede observar en la figura 2.11, el valor del poder másico de frenado de colisiones restringido es siempre menor que el poder de frenado de colisiones.

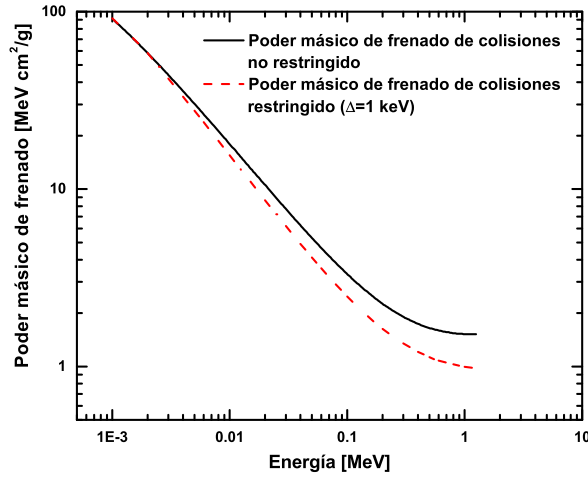


Figura 2.11: Poder másico de frenado de colisiones total y restringido en LiF.

2.1.2.3. Alcance R_{CSDA}

En la aproximación de frenado continuo el alcance es denominado R_{CSDA} y es calculado como [1]:

$$R_{CSDA} = \int_0^{T_0} \left(\frac{dT}{\rho dx} \right)^{-1} dT, \quad (2.21)$$

donde T_0 es la energía inicial de la partícula, $\frac{dT}{\rho dx}$ es el poder másico de frenado y las unidades del alcance están dadas en cm^2/g . Este alcance representa la longitud de trayectoria que viaja el electrón hasta que se detiene, considerando que la tasa de pérdida de energía a lo largo de su trayectoria es igual a la tasa promedio de pérdida de energía definida por el poder de frenado.

2.1.3. Rayos-X

En la figura 2.12 se ilustra un recipiente de vidrio que se encuentra conectado en sus extremos por electrodos y su interior está a un alto vacío. El cátodo (electrodo negativo) es un filamento que produce electrones (emisión termoiónica) y el ánodo (electrodo positivo) es un metal de alto número atómico. Cuando existe una diferencia de potencial entre los dos electrodos, los electrones producidos en el cátodo son acelerados hacia el ánodo. Los electrones al interactuar con el ánodo producen un espectro de rayos-X, el cual tiene dos componentes:

- Radiación de frenado o Bremsstrahlung: Se produce cuando el electrón incidente pasa cerca de un núcleo atómico del metal y su trayectoria es desviada por acción de la fuerza coulombiana. En este proceso el electrón pierde energía como radiación de frenado. En el espectro esta radiación es visualizada como la parte continua y la energía de los fotones producidos tiene valores comprendidos entre cero y la energía cinética del electrón.
- Rayos-X característicos: Se producen cuando electrones proveniente del cátodo interactúan con electrones de las capas del átomo (K, L o M) y logran eyectarlos, dejando al átomo ionizado. La capa con la vacancia se vuelve a llenar por un electrón de una capa de mayor nivel de energía y como resultado se emite un fotón catacterístico.

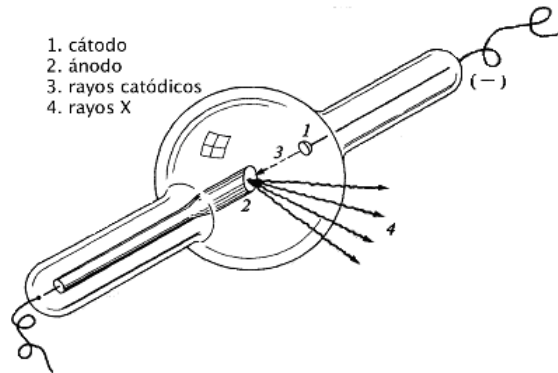


Figura 2.12: Tubo de rayos-X.

En general, las propiedades de atenuación de un haz de rayos-X son determinadas por el voltaje de operación del tubo de rayos-X y la filtración del haz. La calidad de un haz de rayos-X es usualmente descrita por la capa hemirreductora (HVL) y se define como la cantidad de material atenuador (espesor) requerida para disminuir la exposición¹ inicial de un haz de fotones a la mitad. Comúnmente, se usan hojas de aluminio como material atenuador para haces de baja energía y cobre para los de energía media. El haz de fotones emitidos por el tubo de rayos-X es poli-energético, lo que implica la generación de un espectro (Fig. 2.13). Usualmente se identifica un haz de rayos-X mediante el voltaje de operación del tubo y su energía efectiva, la cual se define como la energía de un haz monoenergético que tiene la misma HVL que el haz en cuestión. Cuando se cuenta con el espectro de fotones del haz de rayos-X, además de la energía efectiva, se puede calcular una energía promedio, la cual está dada como:

$$\overline{E}_\gamma = \frac{\int_0^{E_{max}} \phi(E) E dE}{\int_0^{E_{max}} \phi(E) dE}, \quad (2.22)$$

donde E es la energía del fotón y ϕ es la fluencia de fotones por unidad de energía, respectivamente.

¹Es el valor absoluto de la carga dQ de iones del mismo signo que son generados en aire por fotones por unidad de masa dm [1].

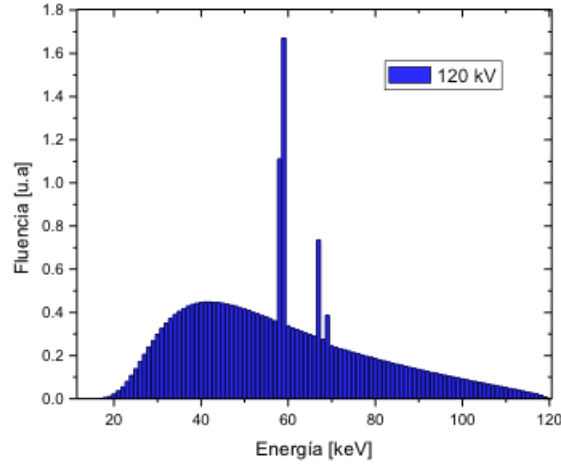


Figura 2.13: Espectro de rayos-X de 120 kV. Se indican las líneas catacterísticas del tungsteno.

2.1.4. Protocolo de dosimetría de rayos-X de bajas energías TG-61

Actualmente, existe una propuesta para evaluar la dosis absorbida en agua utilizando cámaras de ionización para rayos-X de bajas energías en el intervalo de 40 kV-300 kV [15] [17]. Se proponen dos métodos: a) Cálculo de dosis en agua en la superficie de un maniquí en el rango de energías entre 40 kV y 300 kV y b) Cálculo de dosis en agua a 2 cm de profundidad en el rango de energías entre 100 kV y 300 kV. La ecuación que describe la dosis en la superficie de un maniquí de agua está dado por [15]:

$$D_{w,z=0} = MN_K B_w P_{stem,air} \left[\left(\frac{\mu_{en}}{\rho} \right)_{air}^w \right]_{air}, \quad (2.23)$$

y la ecuación del cálculo de dosis a 2 cm de profundidad es la siguiente [15]:

$$D_{w,z=2cm} = MN_K P_{Q,cham} P_{sheath} \left[\left(\frac{\mu_{en}}{\rho} \right)_{air}^w \right]_{water}, \quad (2.24)$$

donde:

M es la carga colectada en una cámara de ionización corregida por presión, temperatura, recombinación, polarización y electrómetro.

N_K es el factor de calibración en términos de kerma en aire para una cierta calidad

de haz.

B_w es el factor de retrodispersión por efecto del maniquí.

$P_{stem,air}$ es el factor que toma en cuenta la dispersión que produce el vástago de la cámara de ionización.

$\left[\left(\frac{\mu_{en}}{\rho}\right)_{air}^w\right]_{air}$ es el cociente del coeficiente másico de absorción de energía entre el agua y el aire promediado sobre el espectro de fotones incidentes.

$\left[\left(\frac{\mu_{en}}{\rho}\right)_{air}^w\right]_{water}$ es el cociente del coeficiente másico de absorción de energía entre el agua y el aire promediado sobre el espectro de fotones en el punto de referencia en agua, en ausencia de la cámara.

P_{sheath} es la corrección debido a la foto-absorción y dispersión del accesorio que cubre del agua a la cámara de ionización.

$P_{Q,cham}$ este factor corrige el efecto de desplazamiento del agua por la cámara de ionización.

Este formalismo de dosimetría de rayos-X de baja energía requiere conocer de manera precisa el espectro de fotones para poder tener un valor exacto del cociente del coeficiente másico de absorción de energía entre el agua y el aire [15], es decir:

$$\left[\left(\frac{\mu_{en}}{\rho}\right)_{air}^w\right]_{air} = \frac{\int_0^{E_{max}} \left(\frac{\mu_{en}}{\rho}(E)\right)_w E \Phi_E^{free-air}(E) dE}{\int_0^{E_{max}} \left(\frac{\mu_{en}}{\rho}(E)\right)_{air} E \Phi_E^{free-air}(E) dE}, \quad (2.25)$$

donde $\Phi_E^{free-air}$ es el espectro de fluencia de fotones en aire. La incertidumbre combinada que se alcanza con este formalismo es alrededor de 4.7%. Sin embargo, hay otras consideraciones que deben tomarse en cuenta, como la contaminación de electrones debido al aire y al accesorio con el que se aplican los rayos-X, el incremento de dosis en la interface de dos materiales, la dosimetría relativa y la dosis en cualquier otro medio diferente al agua.

2.2. Dosimetría termoluminiscente

La termoluminiscencia (TL) es la emisión de luz térmicamente estimulada de un material aislante o semiconductor. Los materiales son previamente expuestos a la radiación ionizante y como consecuencia, electrones de la banda de valencia migran a la banda de conducción $b \rightarrow e$ (ver figura 2.14) dejando en el proceso portadores de carga positiva (hueco). El par electrón-hueco puede estar moviéndose en el material y caer en una trampa correspondiente a un nivel de energía metaestable (m o m^*).

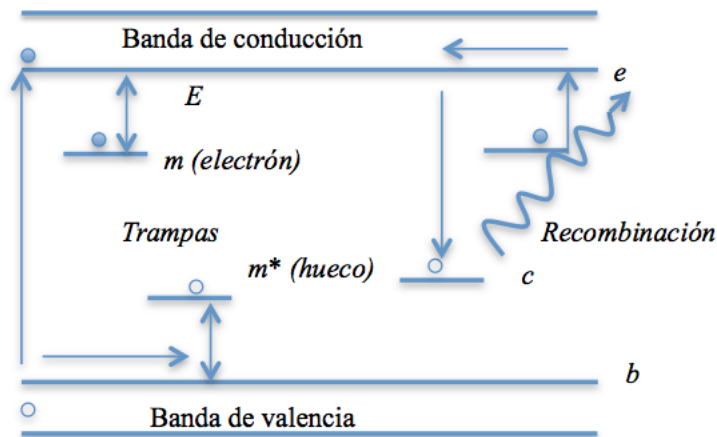


Figura 2.14: Esquema de los niveles de energía de un material termoluminiscente. El estado b y e corresponden a la banda de valencia y conducción, respectivamente. m y m^* corresponden a las trampas electrón-hueco que son niveles de energía metaestables.

El tiempo que puede permanecer el electrón en una trampa a una temperatura T está determinado mediante la siguiente ecuación [3]:

$$\tau = S^{-1} \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \quad (2.26)$$

donde S^{-1} , E y k son una constante, la energía o profundidad de la trampa y la constante de Boltzmann, respectivamente. Randall & Wilkins propusieron que una vez que el electrón ha sido liberado, es decir, pasa del estado $m \rightarrow e$, la probabilidad que regrese al estado metaestable es menor que la probabilidad de recombinación en el estado c . En el momento que el electrón se recombina en el estado c se emite un fotón. La intensidad de fotones emitidos es proporcional a la tasa de recombinación, es decir, a la tasa de liberación de electrones de las trampas,

por lo tanto, la intensidad de los fotones emitidos es proporcional a la cantidad de energía depositada por la radiación. La intensidad está dada por:

$$I(t) = I_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (2.27)$$

donde I_0 es la intensidad al tiempo inicial $t = 0$. A esta función se le conoce como decaimiento de primer orden. Debido a que un electrón puede permanecer en una trampa durante un tiempo relativamente largo, es posible disminuir el tiempo de escape mediante el incremento de la temperatura (Ec. 2.26). La curva de intensidad *vs* la temperatura es comúnmente llamada curva de brillo y está compuesta por varios picos, correspondientes a cada una de las energías de las trampas. En la figura 2.15 se muestra una curva de brillo originada por la exposición de un dosímetro TLD-100 a un haz de rayos-X de 250 kV, en la cual se observa la región dosimétrica compuesta de los picos 1–5 y los picos de alta temperatura 6–9.

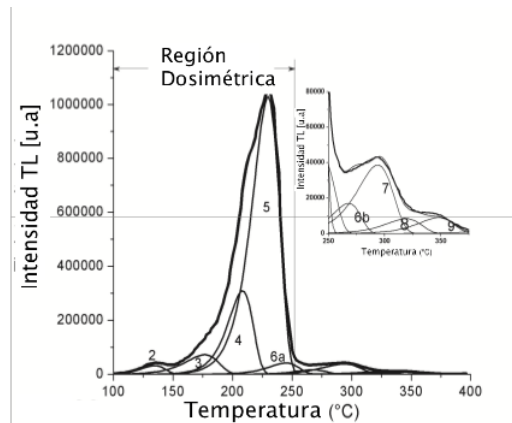


Figura 2.15: Curva de brillo del dosímetro TLD-100 expuesto a un haz de rayos-X de 250 kV. Se muestra la región dosimétrica (picos 1–5) y en la sub-figura la región de alta temperatura (picos 6–9) [19].

Uno de los materiales termoluminiscentes más utilizados en el área clínica es el LiF:Mg,Ti o TLD-100. Este dosímetro tiene las siguientes características: es casi tejido equivalente, tiene un tamaño pequeño y un amplio rango de dosis donde su respuesta es lineal. La respuesta del dosímetro TLD-100 es aproximadamente independiente de la energía por arriba de 100 keV, mientras que para bajas energías su respuesta depende de la calidad del haz (LET).

2.3. Simulación Monte Carlo

La simulación Monte Carlo (MC) es un método numérico estadístico que utiliza el muestreo de variables aleatorias para aproximar la solución de un problema matemático [20]. En el caso del transporte de radiación se simulan trazas o historias de partículas con base en un modelo físico de interacción. Este modelo está determinado por las secciones eficaces, las cuales proporcionan las funciones de distribución de probabilidad (*pdf*) de una variable aleatoria dada, como por ejemplo: el tipo de interacción, la pérdida de energía o la distancia a la que ocurrirá la siguiente interacción. El valor de una cantidad de interés, tal como la dosis, el kerma, la fluencia de electrones, entre otras, se determina calculando el promedio sobre todas las partículas simuladas y, debido al tratamiento estadístico, se reporta con su incertidumbre, la cual decrece como $N^{-1/2}$, donde N es el número de historias [21]. En las simulaciones MC existen dos tipos de transporte:

- *Analógico o detallado*: Se simula la partícula transportada colisión a colisión. Este método es utilizado en el transporte de partículas sin carga, como son los fotones y neutrones.
- *Condensado*: Debido a la gran cantidad de interacciones que experimentan las partículas cargadas cuando atraviesan un medio, en este tipo de transporte la trayectoria de una partícula cargada es dividida en eventos discretos o *pasos*, donde cada paso agrupa un conjunto de interacciones elásticas. La dispersión de la partícula al final del paso es descrita mediante teorías de dispersión múltiple, mientras que su pérdida de energía, por el poder de frenado restringido.

2.3.1. Números aleatorios

Los números aleatorios son los datos de entrada para el muestreo estadístico en las simulaciones Monte Carlo. Estos números son generados utilizando el siguiente algoritmo matemático [21]:

$$x_{i+1} = (Ax_i + B) \text{ modulo } M \quad (2.28)$$

donde M es el valor respecto del cual se calculan los residuos, A y B son constantes y

x_i es el valor inicial (semilla). El periodo de estos valores debe ser lo suficientemente grande para que en la simulación MC no existan repeticiones.

2.3.2. Teoría del muestreo

La descripción de los procesos físicos en una simulación Monte Carlo se obtiene mediante funciones de densidad de probabilidad. Una función de densidad de probabilidad $p(x)$ (Fig. 2.16) describe la probabilidad relativa de obtener un valor de una cierta variable estocástica x . Las propiedades de una pdf son las siguientes [22]:

- $p(x) \geq 0$
- $p(x)$ es integrable y puede normalizarse de la siguiente manera:

$$\int_a^b p(x)dx = 1$$

- $-\infty < a < b < +\infty$, donde a y b son números reales.

Para obtener una variable estocástica, se pueden utilizar tres tipos de muestreo: el directo, el de rechazo o el mixto.

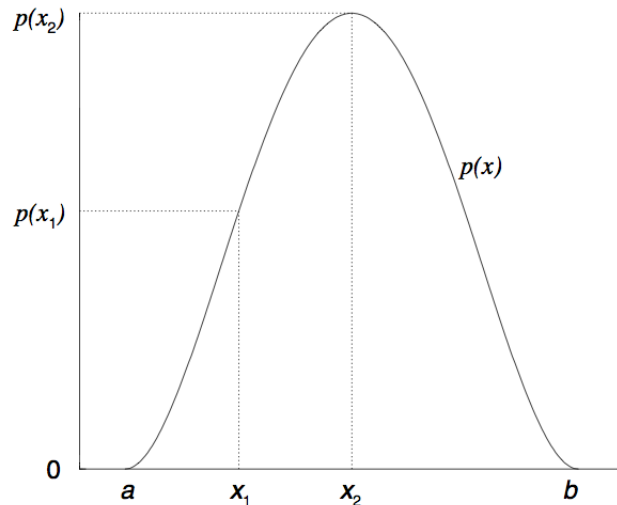


Figura 2.16: Función de densidad de probabilidad [22].

2.3.2.1. Método directo

En el método de muestreo directo, la variable estocástica es obtenida de la inversa de una distribución de probabilidad acumulada c^{-1} (Fig. 2.17) a partir de un número aleatorio. La función de distribución acumulada se define como la probabilidad de que una variable aleatoria x' tome valores menores que o iguales a x , y está definida como [22]:

$$c(x) = \int_a^x p(x')dx'. \quad (2.29)$$

La función $c(x)$ crece monótonicamente y su rango está entre $[0, 1]$. El valor de la variable de muestreo x se obtiene evaluando un número aleatorio r en $x = c^{-1}(r)$. Cabe mencionar que este método es factible cuando la inversa de la función de distribución acumulada es fácil de obtener.

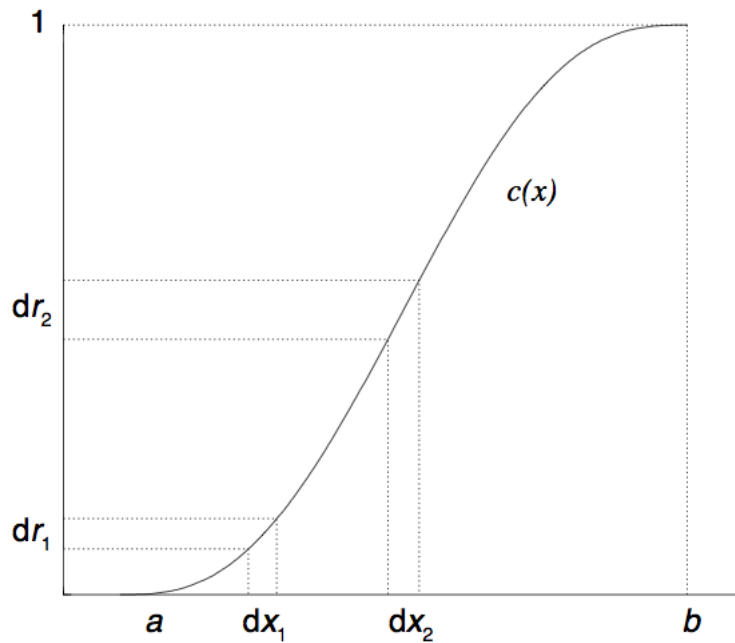


Figura 2.17: Función de distribución de probabilidad acumulada [22].

2.3.2.2. Método de rechazo

Cuando la inversa de una *pdf* es difícil de obtener, se puede optar por el método de rechazo. El procedimiento a seguir es el siguiente [22]:

1. Calcular una nueva función de densidad de probabilidad, $f(x) = p(x)/p(x_{max})$, donde $p(x_{max})$ es el valor máximo de la función $p(x)$.
2. Elegir un número aleatorio r_1 , en el intervalo $[0, 1]$. Usar este valor para obtener el valor de x en la ecuación $x = a + (b - a)r_1$, este valor se encuentra contenido en el intervalo $[a, b]$ donde la *pdf* está definida.
3. Elegir un segundo número aleatorio r_2 , si $r_2 < p(x)/p(x_{max})$ entonces x es aceptada, de lo contrario se regresa al paso 2.

2.3.2.3. Método mixto

Este método consiste en factorizar a la *pdf* como el producto de dos funciones, con la finalidad de que una de ellas tenga una función inversa de fácil evaluación ($f(x)$) y pueda ser analizada con el método directo, mientras que la otra función ($g(x)$), la cual tiene una matemática más compleja, pueda ser tratada por el método de rechazo. La *pdf* puede ser descrita como [22]:

$$p(x) = f(x)g(x). \quad (2.30)$$

En este método se sigue el siguiente procedimiento:

1. Calcular $f(x)$ obteniendo $f'(x)$ tal que $\int_a^b f'(x)dx = 1$.
2. Normalizar $g(x)$ tal que $g'(x) \leq 1$ para x en el intervalo $[a, b]$.
3. Utilizar el método directo y obtener x de $f'(x)$.
4. Utilizar el valor de x del paso anterior y aplicar el método de rechazo, es decir, eligiendo un número aleatorio r en el intervalo de $[0, 1]$, si $g'(x) \leq 1$ se acepta x , de lo contrario se regresa al paso 3.

2.3.3. Transporte de fotones

El transporte de fotones comienza con la elección de la fuente, la cual simulará la emisión de los fotones en una geometría previamente diseñada. La distancia que viajará el fotón antes de una interacción será elegida de una distribución acumulada de probabilidad calculada de la función de distribución exponencial. La distancia entre una interacción y otra es comúnmente llamada longitud de *paso* s y está determinada por [21]:

$$s = -\lambda \ln(1 - \xi), \quad (2.31)$$

donde λ es el camino libre medio del fotón para un cierta energía y ξ es un número aleatorio entre 0 y 1. El tipo de interacción (fotoeléctrico, Compton o producción de pares) se obtiene eligiendo nuevamente un número aleatorio, el cual es evaluado en la función acumulada relativa de los diferentes procesos que pueden ocurrir.

2.3.4. Transporte de electrones

En simulación MC, el transporte de electrones comúnmente es realizado con la técnica de historias condensadas. Esta teoría fue introducida por Berger en 1963 [23], en la cual señala dos clases de transporte :

- *Clase I:* Utiliza un conjunto predeterminado de longitudes de *pasos* o fracciones de pérdida de energía promedio.
- *Clase II:* Es un procedimiento mixto. Agrupa un conjunto de interacciones en un solo *paso*, pero en ocasiones se producen electrones secundarios o rayos-X de frenado que son tratados de manera independiente.

A pesar de que la técnica de historias condensadas es una buena aproximación para el transporte de electrones, es necesario agregar algoritmos que corrigen los problemas del cruce de fronteras, la distancia real que viaja el electrón en un paso, el efecto del espín, relajaciones atómicas, etcétera [24].

2.3.5. Reducción de varianza

La eficiencia en las simulaciones MC está definida como [21]:

$$\epsilon = \frac{1}{T\sigma^2}, \quad (2.32)$$

donde σ es la desviación estándar de una cantidad de interés y T es el tiempo de cálculo. Como $\sigma^2 \propto 1/N$ y $T \propto N$, la eficiencia es independiente del número de historias. El objetivo de los métodos de reducción de varianza es aumentar la eficiencia, es decir, disminuir el tiempo de cálculo para obtener una misma incertidumbre. A continuación se mencionan algunos de los algoritmos utilizados en la reducción de varianza:

- *Rechazo en función del rango del electrón:* Este algoritmo termina la historia si la distancia a la frontera más cercana es mayor que el alcance del electrón.
- *Fotón forzado:* Este algoritmo hace que una mayor cantidad de fotones interactúen en una geometría dada.
- *Transformada exponencial:* Este algoritmo incrementa o disminuye el camino libre medio de un fotón y es utilizado en problemas con geometrías delgadas o profundas.
- *División de partículas:* Este algoritmo divide una partícula en N partículas idénticas y a cada partícula se le asigna un peso estadístico de $1/N$.

Capítulo 3

Métodos

3.1. Código Monte Carlo

EGSnrc (electron gamma shower) es un código Monte Carlo orientado al transporte de electrones y fotones en el rango de energía de 1 keV hasta unos cientos de GeV [24]. Dentro de este sistema se encuentran códigos de usuario como FLURZnrc, DOSRZnrc, DOSXYZnrc y BEAMnrc distribuidos bajo licencia del National Research Council of Canada. Los paquetes utilizados en este trabajo son el FLURZnrc y el DOSRZnrc, en los cuales solo se permite una geometría cilíndrica.

El paquete FLURZnrc calcula la fluencia primaria y/o secundaria de partículas por unidad de energía en regiones de interés. Las partículas pueden ser electrones, fotones o positrones. El paquete DOSRZnrc calcula la dosis por unidad de fluencia incidente en ciertas regiones de interés. Se tiene la posibilidad de obtener el kerma y al igual que en FLURZnrc se pueden establecer los parámetros de transporte, la geometría, el número de historias, la fuente y opciones de reducción de varianza.

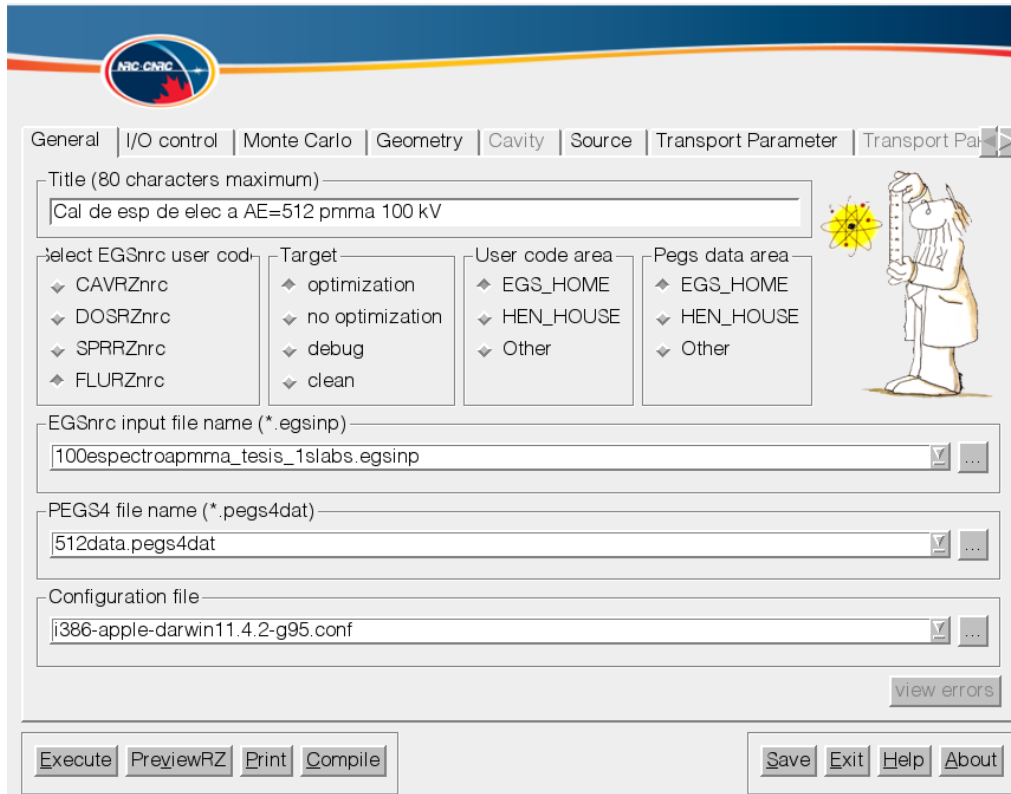


Figura 3.1: Interfaz gráfica de los códigos de usuario FLURZnrc, DOSRZnrc, SPRRZnrc y CAVRZnrc.

El código Monte Carlo EGSnrc es de clase II (ver 2.3.4) y en la simulación del transporte de electrones, los electrones primarios son puestos en movimiento por los fotones, mientras que los electrones secundarios son puestos en movimiento por los electrones primarios, es decir, el espectro de fluencia total de electrones se define como:

$$\phi_T(E) = \phi_P(E) + \phi_S(E), \quad (3.1)$$

donde $\phi_P(E)$ y $\phi_S(E)$ es la fluencia primaria y secundaria de electrones, respectivamente. En la figura 3.2 se muestra el comportamiento de las componentes primaria y secundaria del espectro de fluencia total de electrones en LiF para un haz de 20 kV y ^{60}Co .

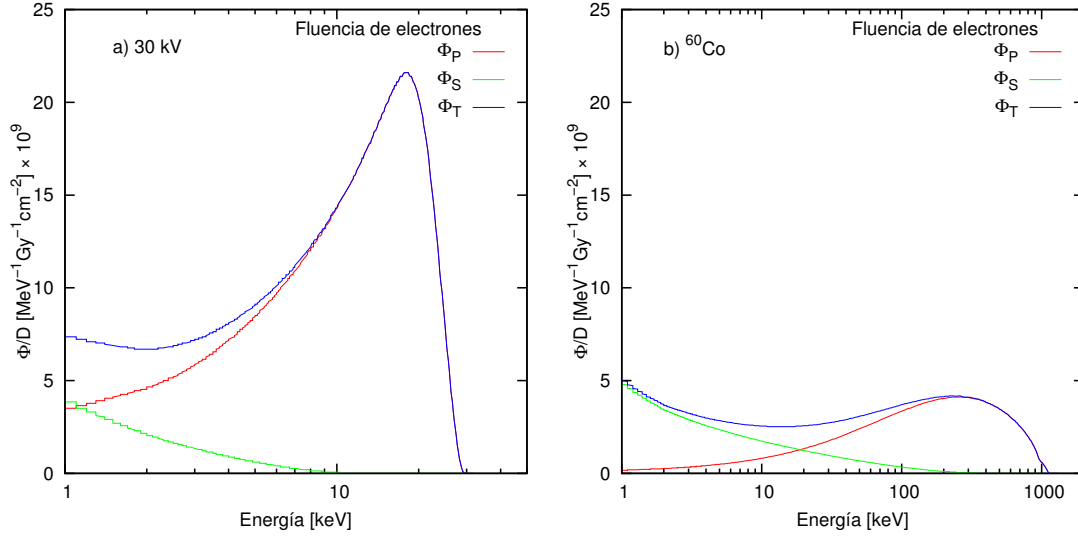


Figura 3.2: (a) Fluencia primaria, secundaria y total de electrones generados en LiF por un haz de 20 kV y (b) un haz de rayos gamma de ^{60}Co . LiF rodeado de PMMA.

Del archivo de salida que proporciona el código se obtiene la energía promedio de los electrones en las regiones de interés. Esta energía se calcula de la siguiente manera:

$$\overline{E_e} = \frac{\int_{\Delta}^{E_{max}} E \phi_T(E) dE}{\int_{\Delta}^{E_{max}} \phi_T(E) dE}. \quad (3.2)$$

3.2. Geometría a estudiar

Los materiales utilizados en este trabajo fueron el PMMA, aire, agua sólida, poliestireno, aire y LiF. En la tabla 3.1 se presenta la composición, la fracción en masa, la densidad y el número atómico efectivo de cada compuesto y/o mezcla antes mencionados. El número atómico de un medio es importante cuando se trata la interacción de la radiación con la materia. Cuando se tienen compuestos o mezclas se puede definir un número atómico efectivo, el cual está dado como [1]:

$$Z_{efectiva} = \sqrt[n]{a_1 Z_1^m + a_2 Z_2^m + \dots}, \quad (3.3)$$

donde $a_n = \frac{f_n Z_n / A_n}{\sum_i f_i Z_i / A_i}$ es la fracción de electrones de un átomo con número atómico Z_n , f_n es la fracción en masa de cada elemento y m es aproximadamente 3.5 cuando se esta considerando el efecto fotoeléctrico.

		Z	A	Aire	PMMA	Poliestireno	WT1	LiF
Composición y fracciones de masa	H	1	1.008		0.081	0.077	0.081	
	C	6	12.011	0.134E-3	0.600	0.923	0.672	
	N	7	14.007	0.755			0.024	
	O	8	15.999	0.232	0.320		0.199	
	F	9	19.998					0.732
	Cl	17	35.453				0.001	
	Ca	20	40.078				0.023	
	Li	3	6.941					0.268
	Ar	18	39.948	0.013				
Densidad [g/cm^3]				0.0012	1.19	1.06	1.02	2.635
$Z_{efectiva}$				7.8	6.5	5.7	7.4	8.2

Tabla 3.1: Características del aire, PMMA, poliestireno, agua sólida (WT1) y LiF. Composición, fracciones de masa de los elementos que constituyen al material, densidad y número atómico efectivo [25].

La geometría que se diseño en este trabajo esta basada en las dimensiones del dosímetro termoluminiscente TLD-100, las dimensiones del chip son de $3.1 \times 3.1 \times 0.89 \text{ mm}^3$. El radio equivalente que se utilizó en la simulación es de 1.6 mm [26] y el grosor de 0.89 mm. Como se muestra en la figura 3.3, el cilindro de LiF fue colocado en el centro de otro cilindro de material dispersor (aire, agua sólida, PMMA o poliestireno) que tiene dimensiones de 25 mm de radio y 4.09 mm de grosor.

La fuente elegida en la simulación fue una fuente puntual, el punto focal se localiza a 60 cm de la superficie del maniquí previamente diseñado, con un tamaño de campo en la superficie del maniquí de 1.27 cm de radio. Los datos de la fuente son espectros de rayos-X de la serie NS-ISO medidos experimentalmente [27]. En la figura 3.4 se muestran los diferentes espectros de rayos-X en el rango de energía de 20 kV a 300 kV. También se utilizaron espectros de fotones de ^{137}Cs y ^{60}Co que vienen dentro de la distribución de código EGSnrc.

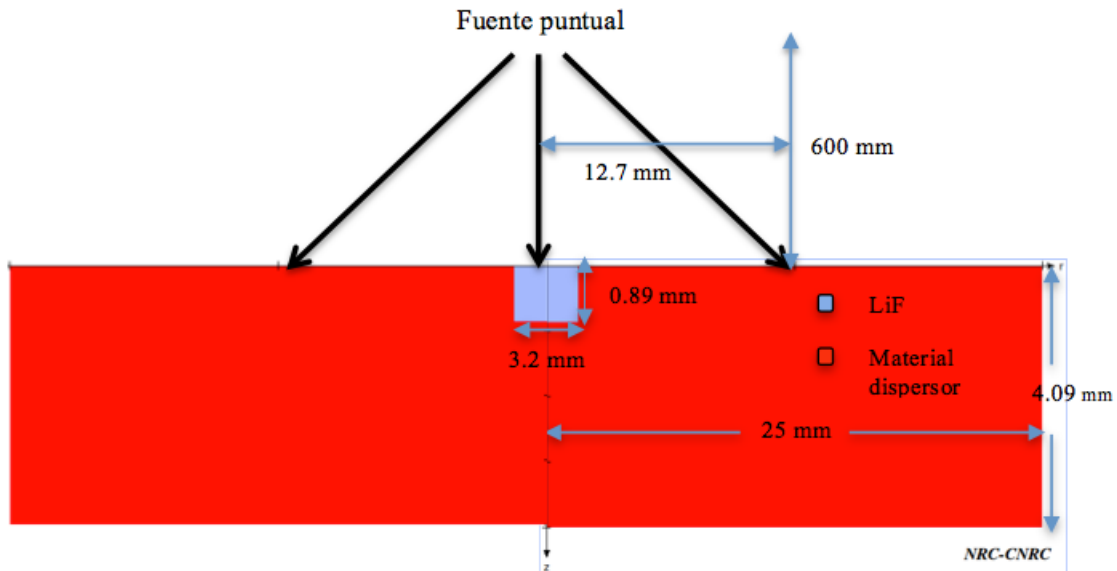


Figura 3.3: Geometría de simulación.

Con propósito de estudiar el comportamiento del espectro de electrones como función de la profundidad, en algunos cálculos, el espesor del LiF fue dividido en 10 capas iguales. En la simulación del cálculo de dosis y fluencia utilizando el haz de ^{137}Cs y ^{60}Co , se agregó una capa de 4.2 mm de PMMA por encima del LiF para obtener equilibrio de partícula cargada.

En la tabla 3.2 se muestra el voltaje de operación del tubo, filtración agregada, filtración inherente, primera y segunda capa hemirreductora, energía promedio y la anchura a media altura (FWHM) de los diferentes espectros utilizados.

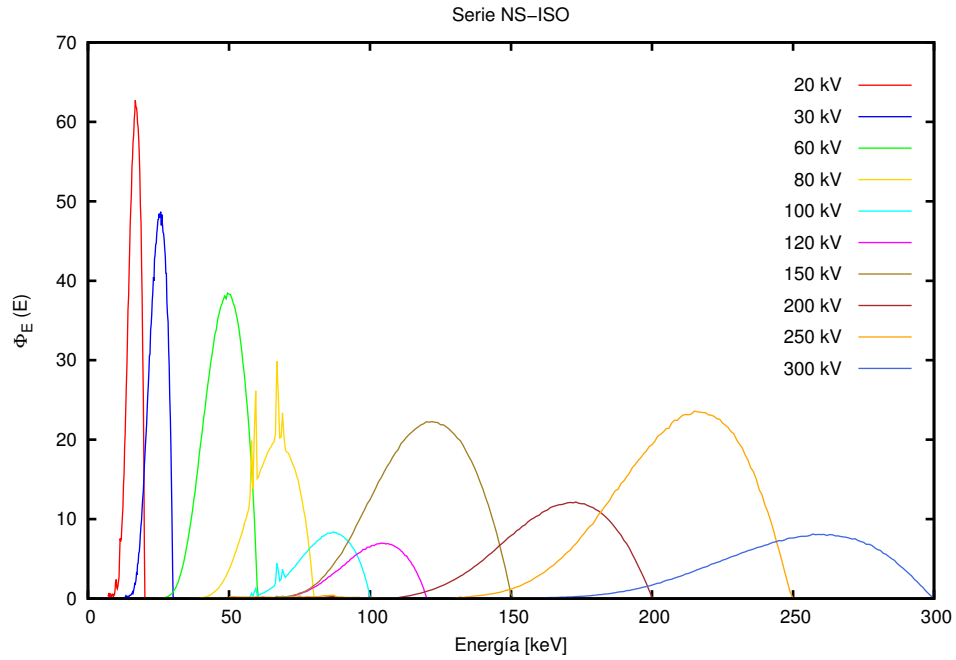


Figura 3.4: Espectro de rayos-X de la serie NS del ISO en el rango de energías de 20–300 kV [27].

Serie	Código	Voltaje [keV]	Filtración		Capa					Energía promedio [keV]	FWHM [keV]
			inherente [mm]	agregada [mm]	Hemirreductora		mm Al, mm Cu*				
			Be	Al	Cu	Sn	Pb	Primera	Segunda		
ISO	NS20	20	1.0	1.0				0.32	0.37	15.7	5.2
ISO	NS30	30	1.0	4.0				1.15	1.30	24	7.5
ISO	NS60	60	3.6	4.0	0.6			0.24*	0.26*	47.3	17.3
ISO	NS80	80	3.6	4.0	2.0			0.58*	0.62*	64.6	20.9
ISO	NS100	100	3.6	4.0	5.0			1.11*	1.17*	82.7	23.4
ISO	NS120	120		4.0	5.0	1.0		1.68*	1.74*	100	
ISO	NS150	150	3.6			2.5		2.36*	2.47*	117.2	44.6
ISO	NS200	200	3.6		2.0	3.0	1.0	3.99*	4.05*	164.4	48.5
ISO	NS250	250	3.6			2.0	3.0	5.19*	5.23*	208.4	57.7
ISO	NS300	300	3.6			3.0	5.0	6.12*	6.15*	250.5	68.4

Tabla 3.2: Calidades de haz de la serie NS del ISO en el rango de voltaje de 20 – 300 kV [27].

3.3. Detalle y optimización de los cálculos

En esta sección se describen brevemente y determinan los parámetros de transporte que se utilizarán en los cálculos. La selección de los parámetros están en función de la física del transporte de fotones y electrones a bajas energías.

3.3.1. Estepe

El estepe es la fracción máxima de energía que pierde un electrón en un *paso*. Este parámetro está relacionado con la longitud entre una interacción y otra, es decir, cuando disminuye el estepe, la distancia entre dos interacciones se vuelve más pequeña y por lo tanto la simulación de la traza del electrón es más confiable. En la figura 3.5 se evaluó el efecto del estepe de 0.25 % y 1 %. En la figura 3.5a se presenta el espectro de fluencia total de electrones en las capas 1 y 10 generados en LiF por un haz de rayos-X de 30 kV y en la figura 3.5b generados por un haz de 120 kV. En términos del estepe no se encontraron cambios significativos entre los dos valores evaluados, por lo que el valor elegido para los cálculos en el rango de baja energía fue del 1 %.

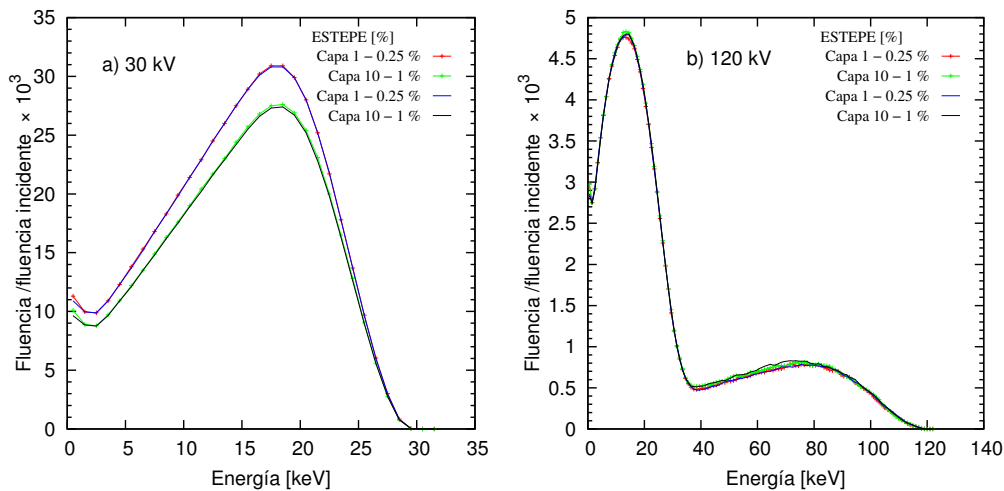


Figura 3.5: Espectro de fluencia total de electrones por unidad de fluencia incidente en la capa 1 y 10 del LiF. En la figura (a) se presentan los espectros generados en LiF por un haz de 30 kV con diferente estepe para la capa 1 y 10 y en (b) generados con un haz de 120 kV. La fluencia incidente es el número de fotones que atraviesan el campo de radiación por unidad de área en la superficie del maniquí.

3.3.2. Energía de corte

La energía de corte es la energía cinética mínima que el electrón debe tener para su transporte en el medio. En la figura 3.6 se evalúa el efecto de la energía de corte de 1 keV y 10 keV en los espectros de electrones generados (totales) en LiF por los haces de 30 kV y 200 kV.

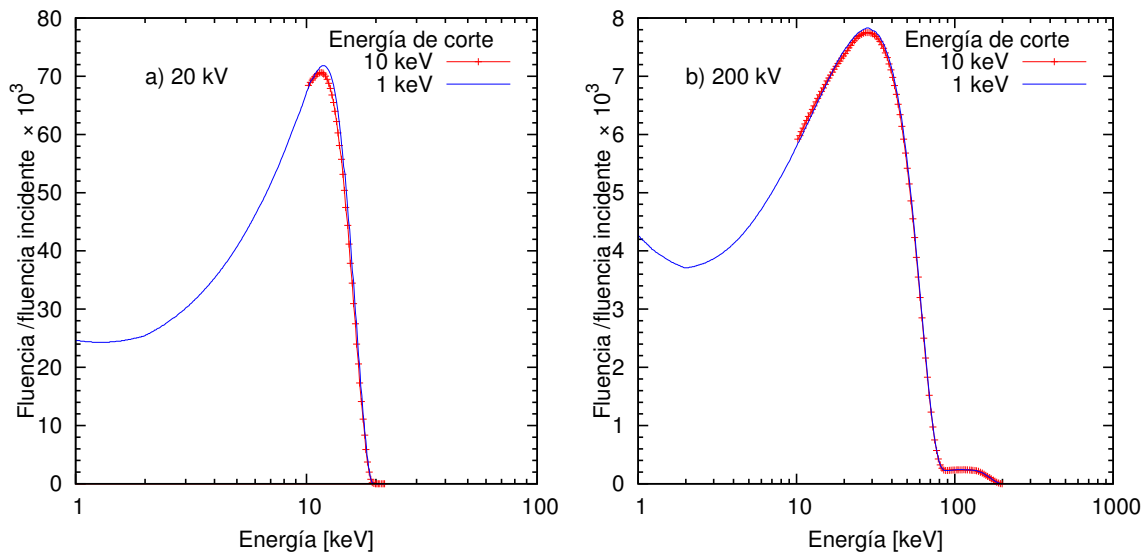


Figura 3.6: Evaluación del efecto de la variación de la energía de corte. En la figura (a) se presentan los espectros de electrones (totales) generados en LiF por un haz de 30 kV con diferentes energías de corte (1 keV y 10 keV) y en (b) por un haz de 200 kV.

En este trabajo se estableció la energía de corte de 1 keV. Esta energía se eligió debido a que es la energía de corte mínima que permite el código y con la que se puede obtener mayor información de los espectros de electrones.

3.3.3. Secciones eficaces

Las secciones eficaces para fotones que contiene el código son las siguientes:

- EPDL (Evaluated Photon Data Library).
- SI (Storm & Israel).

- Pegs4.
- XCOM (NIST).

En la figura 3.7 se presentan los espectros de electrones (totales) generados por los haces de 30 kV y 120 kV evaluando el efecto de la variación de las secciones eficaces. En la evaluación del haz de 30 kV, se encontró una diferencia de hasta el 6 % entre XCOM–EPDL y SI–PEGS4, mientras que para el haz de 120 kV no se obtuvieron diferencias significativas. Se eligió XCOM debido a que contiene valores actualizados de las secciones eficaces para la región de baja energía, donde el efecto fotoeléctrico es de mayor importancia.

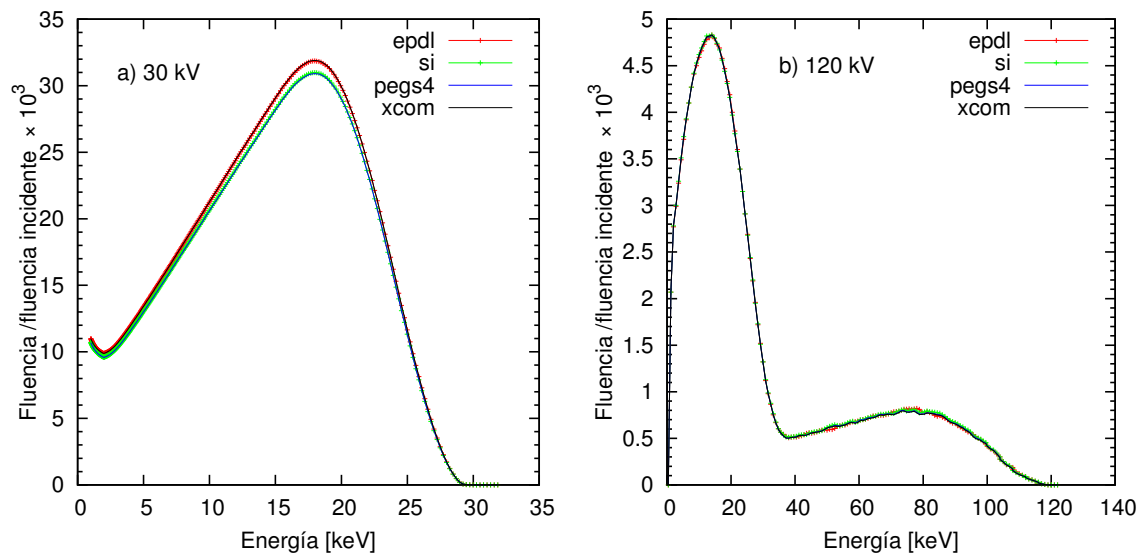


Figura 3.7: Evaluación del efecto de la variación de las secciones eficaces. En la figura (a) se presentan los espectros de electrones generados en LiF por un haz de 30 kV evaluando las diferentes secciones eficaces que contiene el código y en (b) se hace la misma evaluación con un haz de 120 kV.

3.3.4. Otros parámetros de transporte

El resto de las opciones que mejoran el transporte de electrones y fotones fueron activados (ver apéndice A). El número de historias se estableció entre 1.0×10^9 – 1.2×10^9 , y en algunos casos se utilizó el fotón forzado para mejorar la estadística.

3.4. Simulaciones realizadas

Después de haber evaluado el efecto de los diversos parámetros de transporte, se eligieron los óptimos para realizar los cálculos de dosis y fluencia de electrones en los paquetes DOSRZnrc y FLURZnrc.

3.4.1. Cálculo de dosis y espectros de fluencia de electrones

Se calcularon los espectros de fluencia de electrones (totales y secundarios) por unidad de fluencia incidente en LiF rodeado de diferentes materiales que tienen interés clínico (aire, agua sólida, PMMA y poliestireno) [25]. En estos cálculos se evaluaron 10 haces de fotones correspondientes a rayos-X de la serie NS-ISO en el rango de voltajes de 20 kV a 300 kV y se incluyeron los haces de ^{137}Cs y ^{60}Co . En agua líquida se calcularon los espectros de fluencia total de electrones para todos los haces mencionados anteriormente. En este último caso todas las regiones de la geometría fueron cambiadas por agua líquida. El archivo de salida del código FLURZnrc, además de proporcionar los espectros de fluencia de electrones, muestra la energía promedio de los electrones (totales y secundarios) en todas las regiones de la geometría utilizada.

La dosis por unidad de fluencia incidente fue calculada en la región del LiF y agua líquida variando los diferentes materiales dispersores para todos los haces utilizados en este trabajo.

3.4.2. Cálculo de la LET

De acuerdo con el ICRU (1970) [2], la LET promedio puede ser calculada como:

$$L_{\Delta,T} = \frac{\int_0^{E_{max}} L_{\Delta}(E)\phi_T(E)dE}{\int_0^{E_{max}} \phi_T(E)dE}, \quad (3.4)$$

donde E , L_{Δ} y ϕ son la energía cinética del electrón, el poder de frenado de colisiones restringido y la fluencia de electrones. En el código FLURZnrc se estableció la energía de corte mínima permitida (1 keV), y debido a la falta espectral por debajo de esta

energía se decidió corregir la ecuación 3.4 de acuerdo con [28, 29]:

$$L_{\Delta,T} = \frac{\int_{\Delta}^{E_{max}} L_{\Delta}(E)\phi_T(E)dE + TE}{\int_{\Delta}^{E_{max}} \phi_T(E)dE + \frac{TE}{S(\Delta)}}, \quad (3.5)$$

donde, $TE = \phi_T(E)S(\Delta)\Delta$ y $S(\Delta)$ es el poder de frenado de colisiones evaluado en Δ .

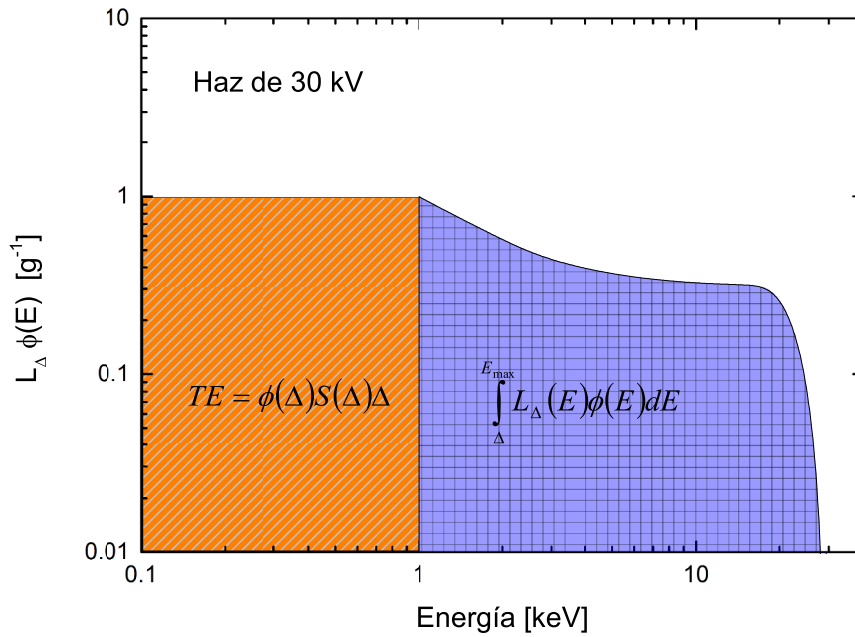


Figura 3.8: Corrección por la falta de información en el espectro por debajo de 1 keV. El área bajo la curva tiene unidades de energía por unidad de masa [keV/g].

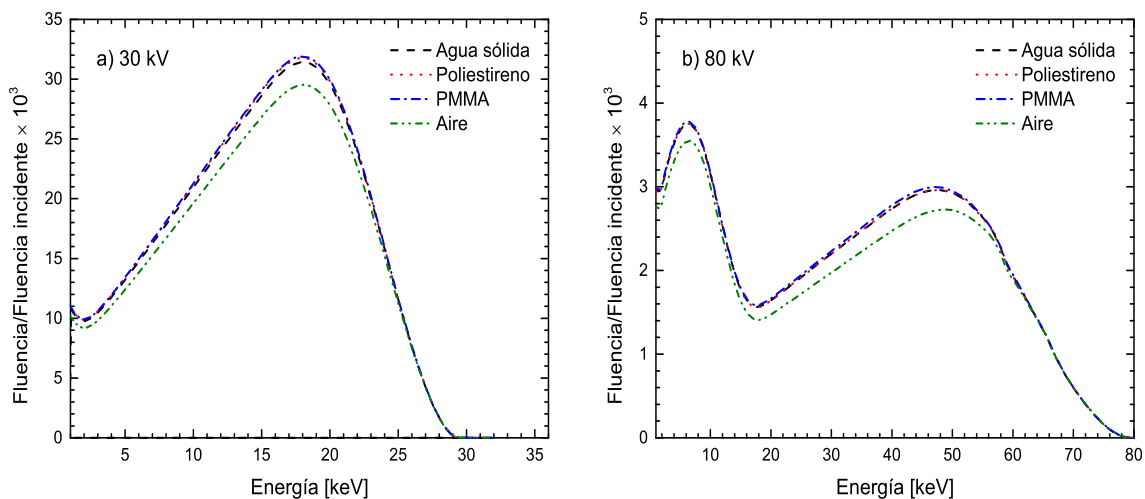
Los valores del poder de frenado de colisiones y restringido evaluados en la energía de corte $\Delta = 1$ keV fueron calculados con las ecuaciones 2.14 y 2.19, respectivamente. La corrección TE de la ecuación 3.5 se puede interpretar como la dosis que depositan localmente los electrones con una energía menor que 1 keV. Esta ecuación es una aproximación ya que todavía no está bien conocido el proceso de interacción de los electrones a energías por debajo de 1 keV [30].

Capítulo 4

Resultados

4.1. Espectro de fluencia total de electrones

En la figura 4.1 se presentan los espectros de electrones (totales) generados en LiF rodeado de diferentes dispersores (agua sólida, poliestireno, PMMA y aire). Los haces utilizados en esta figura fueron los de a) 30 kV, b) 80 kV, c) 150 kV y d) 300 kV. Como se puede observar, aparentemente, hay una dependencia de la fluencia de electrones con el material dispersor. Se observa que, entre los materiales PMMA, poliestireno y agua sólida no existen diferencias significativas en la fluencia de electrones, mientras que, entre el aire y el resto de los materiales esta diferencia llega a ser hasta del 9%.



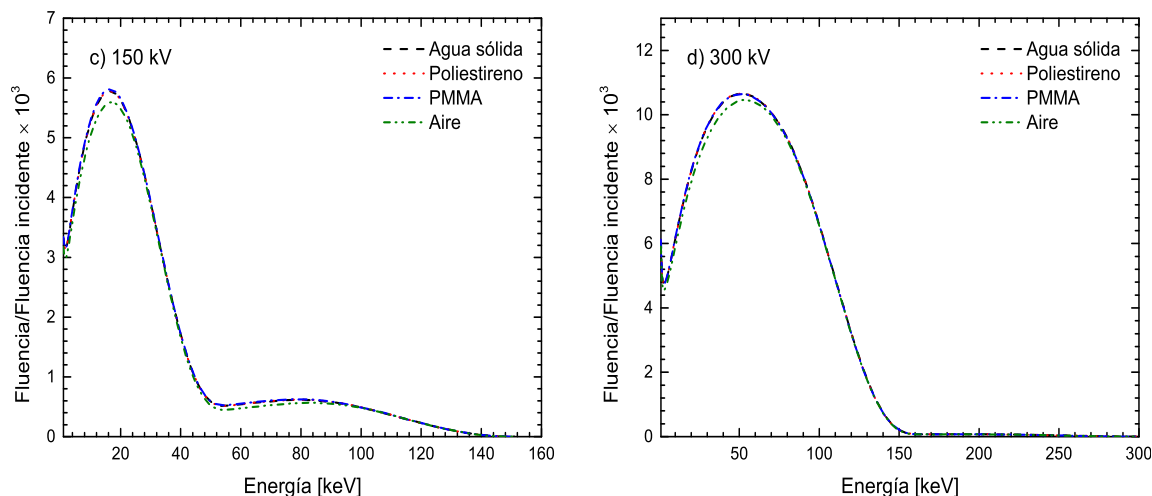


Figura 4.1: Espectros de fluencia total de electrones por unidad de fluencia incidente en LiF rodeado por los diferentes materiales dispersores (agua sólida, poliestireno, PMMA y aire). Los haces de rayos-X utilizados en esta figura son: (a) 30 kV, (b) 80 kV, (c) 150 kV y (d) 300 kV.

Por simplicidad se normalizaron los espectros por la dosis absorbidas en LiF cuyo resultado es independiente del material dispersor, por lo tanto, a continuación solo se presentan los espectros para PMMA.

En la figura 4.2 se muestran los diferentes espectros de fluencia de electrones (EFTE) normalizados por la dosis en LiF para los diferentes haces de fotones, 20–300 kV, ^{137}Cs y ^{60}Co . Para una mejor visualización, se presenta, en una escala adecuada, un conjunto de espectros de electrones: b) 20–80 kV, c) 100–200 kV y d) 250 kV, 300 kV, ^{137}Cs y ^{60}Co . Los espectros de fluencia (total) de electrones en LiF para los haces de 20 kV y 30 kV se caracterizan por tener un solo pico, el cual es atribuido a los electrones que provienen en su mayoría del efecto fotoeléctrico. Los haces entre 60 kV y 200 kV presentan dos picos, el primer pico es conformado por electrones que en su mayoría provienen del efecto Compton, mientras que el segundo por los electrones del efecto fotoeléctrico. Por último, los espectros de electrones de los haces de rayos-X por encima de 200 kV, ^{137}Cs y ^{60}Co presentan un solo pico, el cual es atribuido en su mayoría a electrones del efecto Compton.

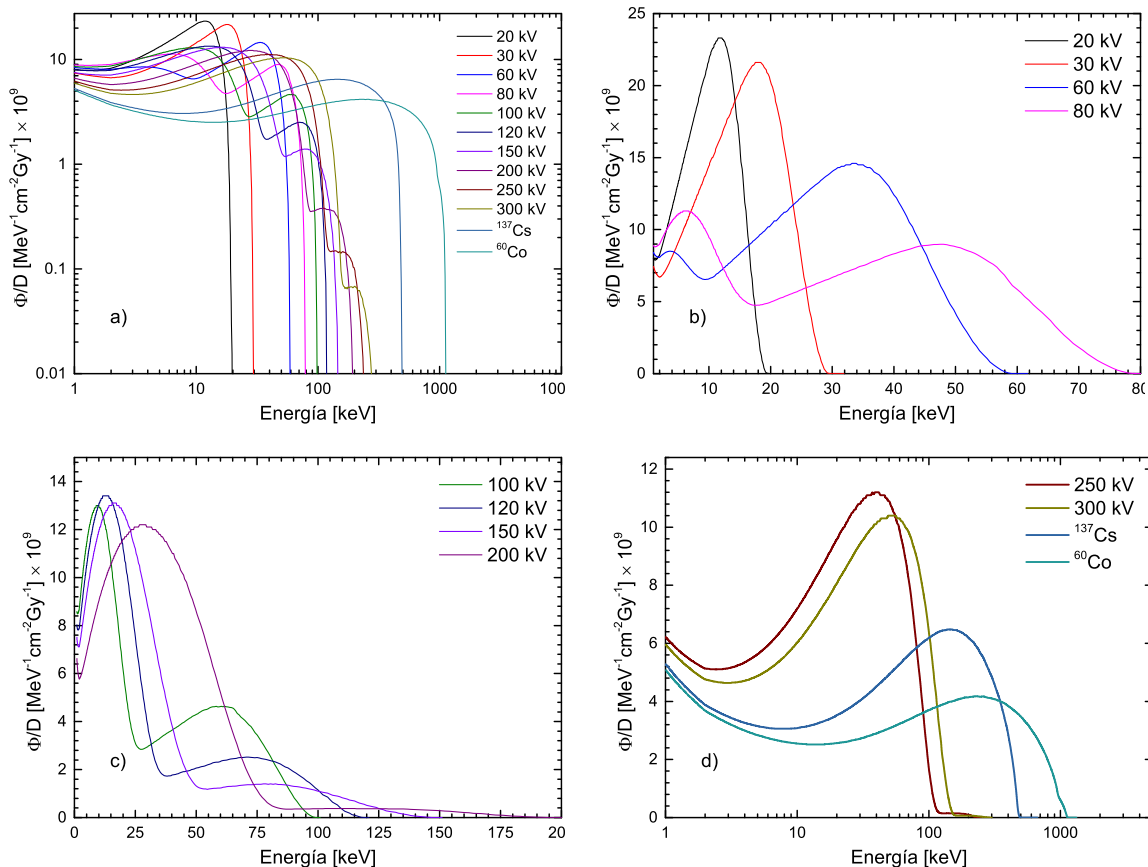


Figura 4.2: Espectro de fluencia total de electrones normalizados por la dosis en LiF rodeado de PMMA para los haces de 20–300 kV, (a) todos los haces de fotones utilizados en escala log-log, (b) 20–80 kV, (c) 100–200 kV y (d) 250 kV, 300 kV, ¹³⁷Cs y ⁶⁰Co (semi-log).

En la tabla 4.1 se presentan los valores de la energía promedio de los electrones Compton como función de la energía promedio del haz de fotones, y se compara con el valor de energía correspondiente al punto máximo donde se encuentra el pico Compton (Fig. 4.3) en el espectro de fluencia de electrones primarios (EFEP). La diferencia entre la energía Compton promedio (teórica) y la energía obtenida en los EFEP se incrementa al aumentar la energía del haz. Esta discrepancia puede ser asociada al incremento de la fluencia de electrones en la región de baja energía debido a la dispersión. Este incremento de la fluencia de electrones en la región de baja energía se muestra en la figura 4.3, en la cual se ilustra un espectro de fluencia de electrones primarios generados en LiF (en aire y rodeado de PMMA) por un haz de fotones monoenergéticos de 100 keV.

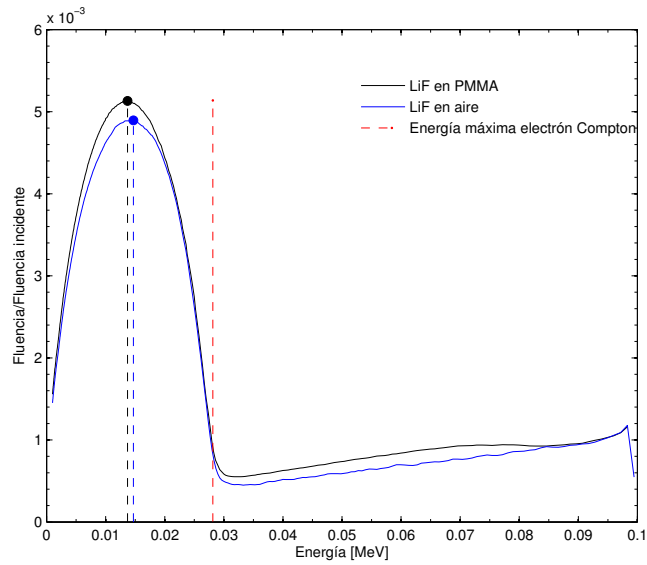


Figura 4.3: Espectro de fluencia de electrones primarios por unidad de fluencia incidente en LiF rodeado de PMMA (línea azul) y de aire (línea negra) para un haz monoenergético de fotones de 100 keV. La línea roja representa la energía máxima que puede alcanzar un electrón que proviene del efecto Compton.

Código	\overline{E}_γ [keV]	Energía promedio de electrones Compton	
		Klein-Nishina	Espectro de electrones (Primarios)
NS-20	15.7	0.45	—
NS -30	24	1.02	—
NS -60	47.3	3.65	4.4
NS -80	64.6	6.41	6.6
NS -100	82.7	9.93	9.8
NS -120	100	13.80	13.8
NS -150	117.2	18.07	16.7
NS -200	164.4	31.62	28.5
NS -250	208.4	46.17	40.9
NS -300	250.5	61.48	54.8
^{137}Cs	608.2	224.68	147
^{60}Co	1,044.7	466.03	257

Tabla 4.1: Energía promedio del electrón Compton.

4.2. Espectro de fluencia de electrones secundarios

En la figura 4.4 se muestran los espectros de fluencia de electrones secundarios (EFES) normalizados por la dosis en LiF para todos los haces de fotones utilizados en este trabajo. En general para los haces de ortovoltaje, sus respectivos EFES tienen un incremento cuando la energía del haz de fotones aumenta.

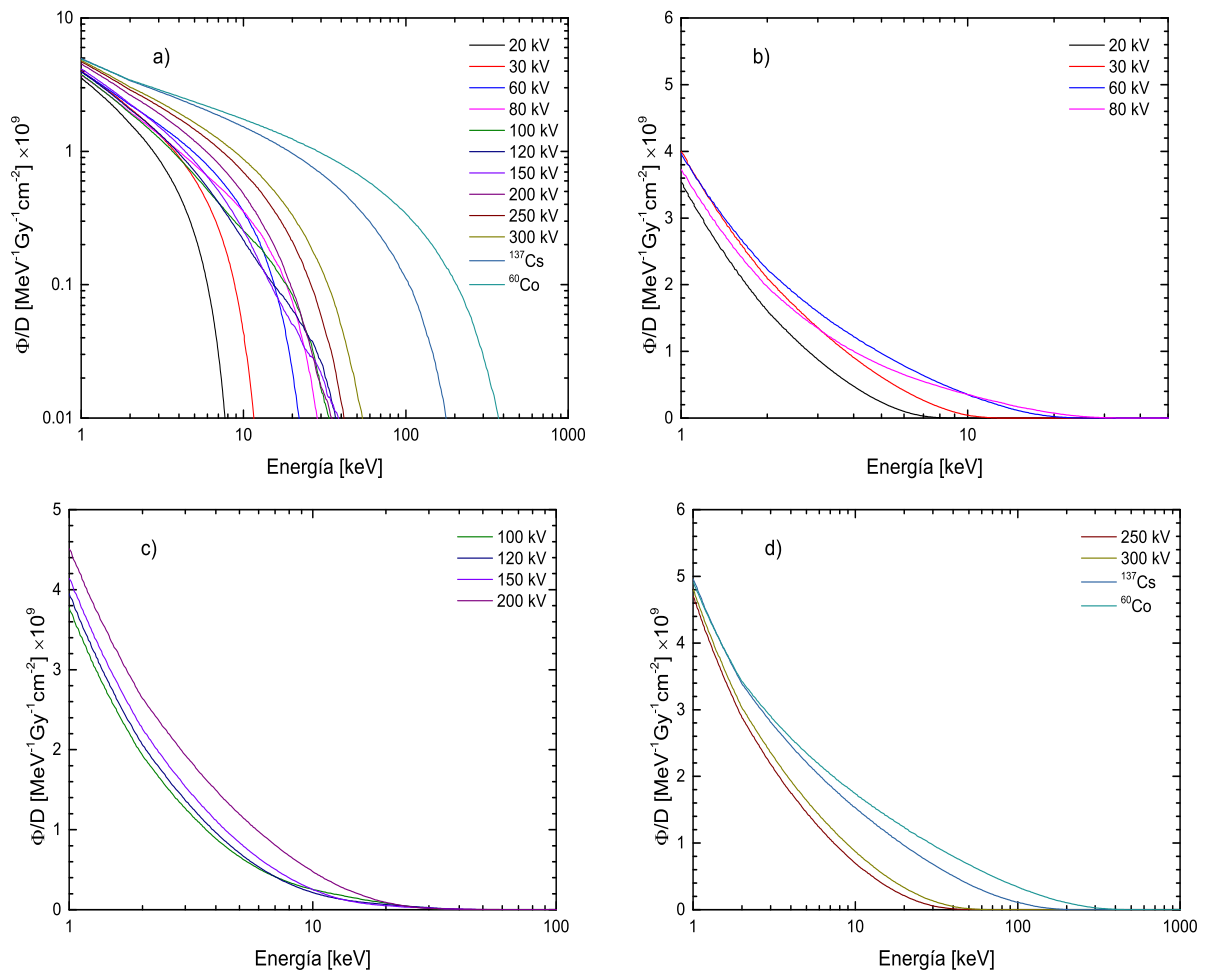


Figura 4.4: Espectro de fluencia de electrones secundarios normalizados por la dosis en LiF rodeado de PMMA, (a) todos los haces de fotones utilizados en escala log-log, (b) 20–80 kV, (c) 100–200 kV y (d) 250 kV, 300 kV, ^{137}Cs y ^{60}Co .

En la figura 4.5 se presenta el cociente entre la fluencia secundaria y la fluencia total de electrones. Esta gráfica puede interpretarse como la fracción de electrones secundarios que son producidos en LiF con respecto de la fluencia total.

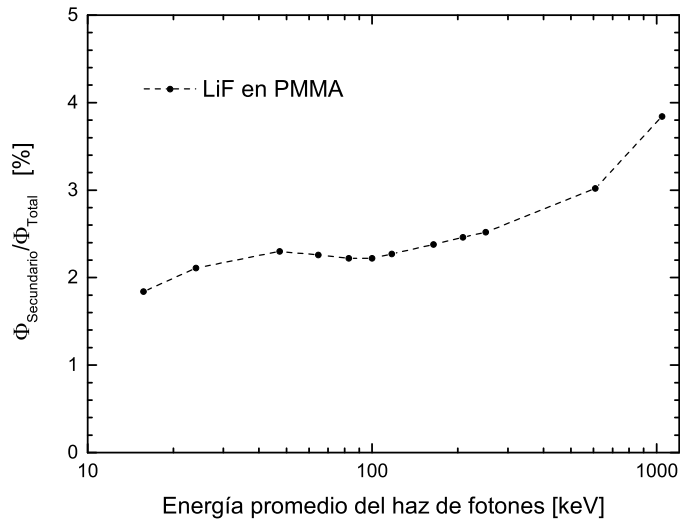


Figura 4.5: Cociente del área bajo la curva de la fluencia secundaria y la fluencia total de electrones como función de la energía promedio del haz de fotones.

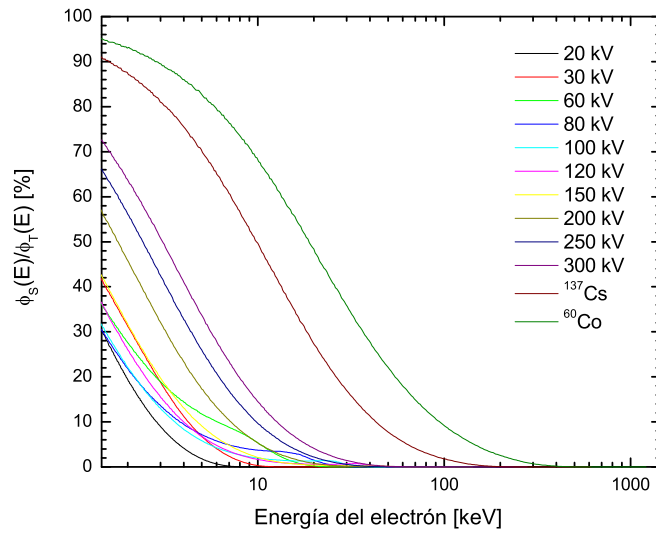


Figura 4.6: Cociente entre la fluencia secundaria y la fluencia total de electrones como función de la energía del electrón.

En la figura 4.6 se muestra el porcentaje de electrones secundarios generados con respecto al total como función de la energía del electrón, como se puede observar, en el intervalo de energía donde los electrones secundarios son generados, la fluencia de electrones secundarios aumenta cuando disminuye la energía del electrón.

4.3. Alcance y energía promedio del electrón

En la tabla 4.2 y la figura 4.7 se presenta el alcance (R_{CSDA}) del electrón como función de su energía cinética en el LiF, aire, PMMA, poliestireno y agua sólida. Se observa que, entre los materiales PMMA, poliestireno y agua sólida existen diferencias en el alcance de hasta el 15 % y entre el aire y el resto de los materiales, el alcance es 3 ordenes de magnitud más grande. Estas diferencias se deben a la variación en sus números atómicos efectivos y sus densidades, de acuerdo con los datos disponibles en la tabla 3.1.

Energía [keV]	Alcance [μm]				
	Aire	PMMA	Poliestireno	Agua sólida	LiF
10	2.39E+3	2.17E+0	2.40E+0	2.50E+0	1.21E+0
15	4.89E+3	4.44E+0	4.92E+0	5.12E+0	2.46E+0
25	1.20E+4	1.10E+1	1.22E+1	1.27E+1	6.05E+0
50	4.08E+4	3.73E+1	4.15E+1	4.31E+1	2.04E+1
100	1.35E+5	1.24E+2	1.38E+2	1.43E+2	6.74E+1
150	2.65E+5	2.43E+2	2.71E+2	2.82E+2	1.33E+2
200	4.22E+5	3.87E+2	4.32E+2	4.49E+2	2.11E+2
300	7.91E+5	7.27E+2	8.11E+2	8.42E+2	3.95E+2
1000	4.08E+6	3.78E+3	4.23E+3	4.39E+3	2.05E+3
1250	5.32E+6	4.96E+3	5.55E+3	5.75E+3	2.69E+3

Tabla 4.2: Alcance de los electrones en función de su energía cinética en aire, PMMA, agua sólida, poliestireno y LiF [16].

En la tabla 4.3 se presenta el alcance de los electrones en LiF como función de la energía promedio de los electrones generados por los haces de fotones. De la tabla

4.3 se obtiene que el alcance promedio de los electrones en LiF para el haz de 300 kV representa el 3% del espesor del LiF, mientras que para ^{137}Cs y ^{60}Co el 24% y 74%, respectivamente. En las tablas 4.4 y 4.5 y en la figura 4.8 se muestra la energía promedio del electrón de los EFTE y EFES en función de la energía promedio del haz de fotones para los diferentes materiales que rodean al LiF.

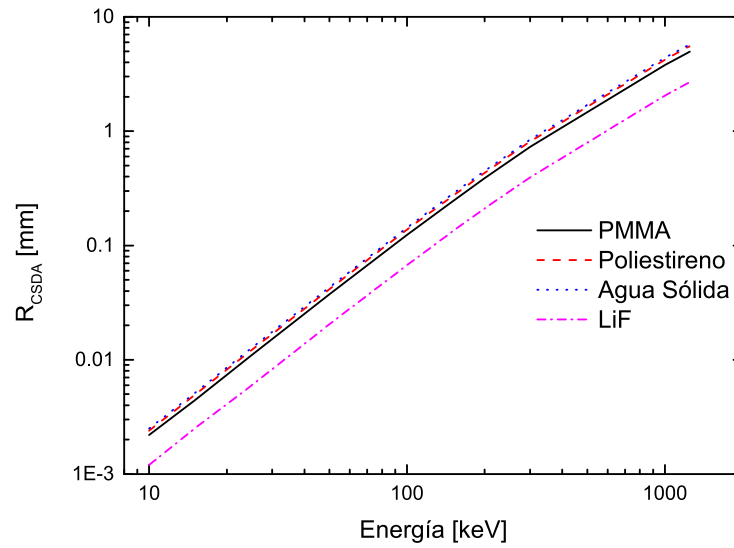


Figura 4.7: Alcance (R_{CSDA}) en PMMA, poliestireno, agua sólida y LiF del electrón como función de la energía [16].

	\overline{E}_e	Alcance en LiF
Código	[keV]	[μm]
NS-20	9.8	1.12
NS -30	14.9	2.44
NS -60	27.5	7.18
NS -80	33.3	10.09
NS -100	34.1	10.46
NS -120	32.3	9.58
NS -150	31.6	9.20
NS -200	37.2	12.20
NS -250	48.4	19.29
NS -300	61.7	29.39
^{137}Cs	206.3	221.39
^{60}Co	425.1	666.68

Tabla 4.3: Energía promedio \overline{E}_e y alcance promedio en LiF para los haces de rayos-X de la serie NS-ISO.

Energía promedio del electrón en LiF (EFTE)					
[keV]					
Código	\overline{E}_γ	Aire	Agua sólida	PMMA	Poliestireno
NS-20	15.7	9.85	9.84	9.84	9.84
NS -30	24	14.91	14.87	14.86	14.85
NS -60	47.3	27.66	27.49	27.43	27.47
NS -80	64.6	33.56	33.35	33.35	33.30
NS -100	82.7	34.08	34.17	34.04	33.96
NS -120	100	32.16	32.30	32.36	32.34
NS -150	117.2	31.33	31.53	31.63	31.62
NS -200	164.4	37.36	37.09	37.19	37.16
NS -250	208.4	48.75	48.42	48.39	48.31
NS -300	250.5	62.21	61.87	61.67	61.85
^{137}Cs	608.2	208.30	206.20	206.30	206.70
^{60}Co	1,044.7	433.20	424.70	425.10	425.70

Tabla 4.4: Energía promedio de los electrones en el EFTE. Se presentan los datos del LiF rodeado por aire, agua sólida, PMMA y poliestireno para diferentes haces de rayos-X. Las incertidumbres en los valores están dentro del 0.2%.

Energía promedio del electrón secundario en LiF (EFES)					
[keV]					
Código	\overline{E}_γ	Aire	Agua sólida	PMMA	Poliestireno
NS-20	15.7	2.38	2.38	2.39	2.39
NS -30	24	3.14	3.13	3.13	3.14
NS -60	47.3	5.05	5.04	5.03	5.03
NS -80	64.6	6.10	6.15	6.06	6.06
NS -100	82.7	6.35	6.31	6.30	6.33
NS -120	100	6.02	5.98	6.10	5.93
NS -150	117.2	5.82	5.83	5.83	5.84
NS -200	164.4	6.49	6.51	6.45	6.44
NS -250	208.4	8.08	7.97	8.00	8.04
NS -300	250.5	9.92	9.99	9.96	9.90
^{137}Cs	608.2	32.07	31.88	31.93	31.80
^{60}Co	1,044.7	67.58	67.04	67.70	67.08

Tabla 4.5: Energía promedio de los electrones secundarios en el EFES. Se presentan los datos del LiF rodeado por aire, agua sólida, PMMA y poliestireno para diferentes haces de rayos-X. Las incertidumbres en los valores están dentro del 0.5%.

En la figura 4.8 se puede observar similitud en las formas de las curvas de la energía promedio de los electrones primarios y secundarios generados en LiF. En general se tiene que la energía promedio de los electrones en el LiF aumenta cuando se incrementa la energía promedio del haz de fotones, teniendo un mínimo local en el intervalo de energía de 40 – 120 keV. En esta figura se presentan los datos reportados por Davis et al [7] para PMMA.

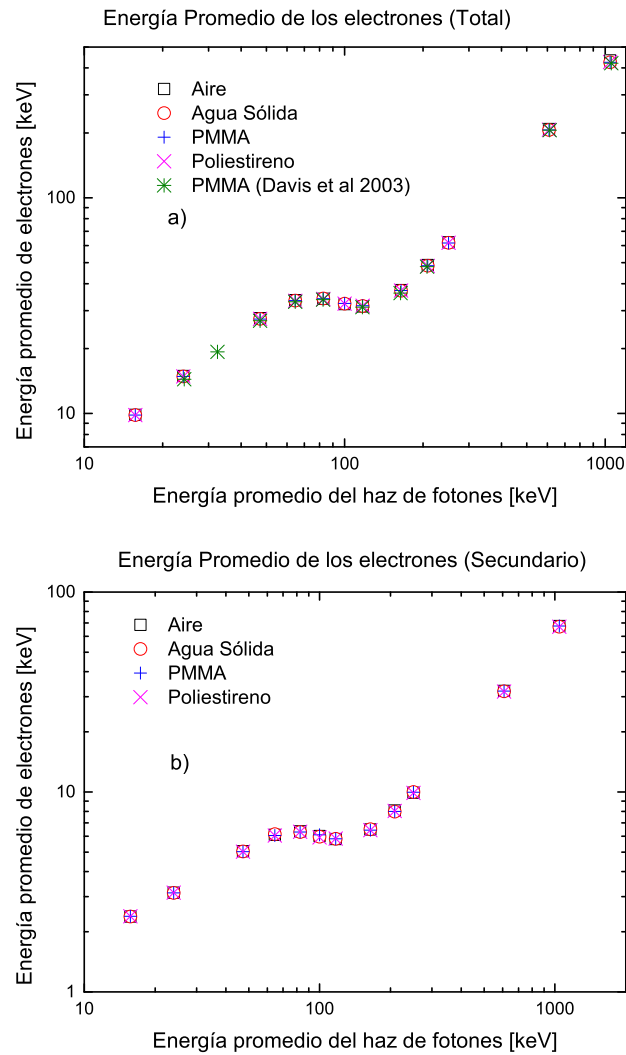


Figura 4.8: Energía promedio de los electrones en función de la energía promedio del haz de fotones. (a) Espectros de fluencia total y (b) al espectro de electrones secundarios. Estos cálculos fueron realizados para los diferentes materiales que rodean al LiF (aire, agua sólida, PMMA y poliestireno). Se muestran los resultados de Davis et al [7].

4.4. LET en LiF

En las tablas 4.6 y 4.7 se presentan los cálculos de LET promedio en LiF obtenidos del espectro de fluencia total de electrones y de la fluencia de electrones secundarios, respectivamente. Los valores de LET corresponden al cálculo de $L_{\Delta,T}$ (Ec. 3.5) con una energía de corte de $\Delta = 1$ keV.

La corrección de la LET por la falta espectral se puede visualizar en la figura 4.9. En la figura 4.9a se presentan los valores de la LET calculada del espectro de fluencia total de electrones con y sin corrección. Además se muestran los datos reportados por Davis et al [7], encontrando coincidencias con la LET no corregida. En la figura 4.9b se muestra la LET promedio con y sin corrección para los electrones secundarios. Como se puede observar, se reproduce la misma forma de la curva y las diferencias observadas entre la LET con y sin corrección para la fluencia total de electrones es menor que la de los electrones secundarios.

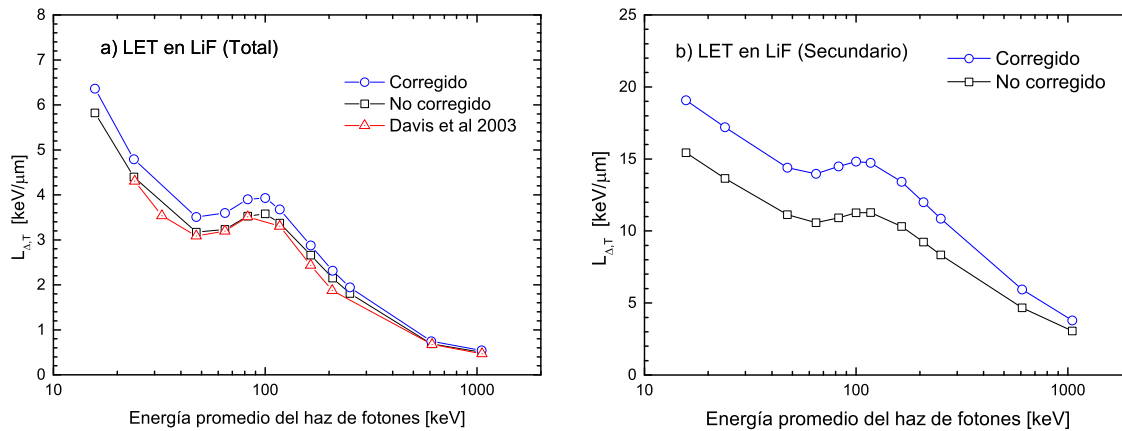


Figura 4.9: Corrección de la LET promedio en LiF (secundarios y totales) rodeado de PMMA como función de la energía promedio de haz. Los círculos muestran la LET corregida y los cuadros representan la LET no corregida. Se muestran los resultados de Davis et al [7].

En la figura 4.10a se presenta la LET promedio en LiF de la fluencia total de electrones como función de la energía promedio del haz de fotones, en la cual se evalúa el efecto de la variación de los distintos materiales dispersores. La curva tiene un comportamiento decreciente en el intervalo de 10 keV a 40 keV, seguido de un máximo local entre 40 keV y 120 keV, mientras que para energías más altas vuelve a ser decreciente. En la figura 4.10b se presenta la curva de LET en LiF de la fluencia de electrones secundarios como función de la energía promedio del haz de fotones, se observa una estructura similar a la obtenida por la fluencia total de electrones. Aparentemente, el cálculo de la LET no muestra una dependencia con el material dispersor, tanto en la fluencia total de electrones como en la fluencia de los electrones secundarios.

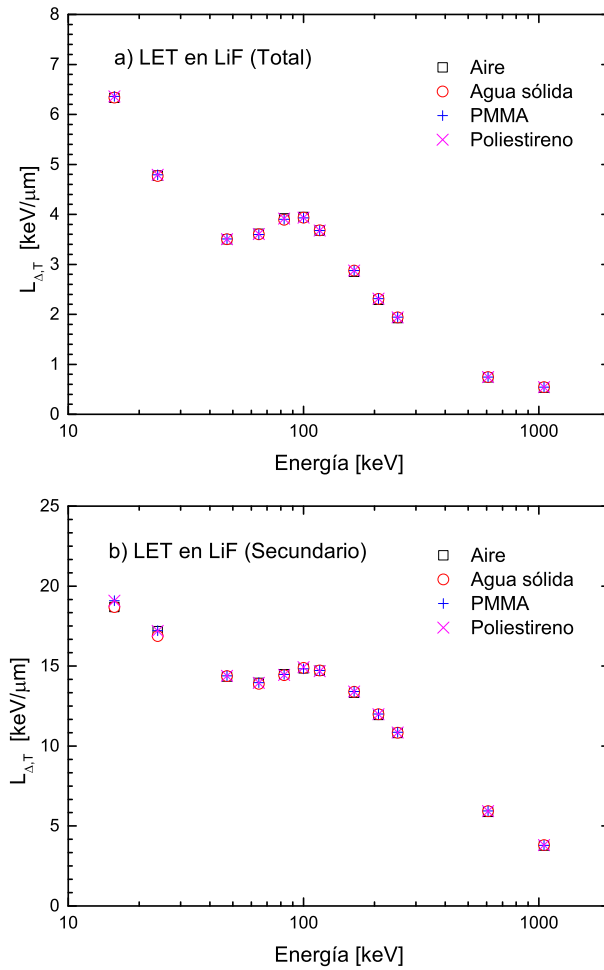


Figura 4.10: Evaluación del efecto del material dispersor (aire, agua sólida, PMMA y poliestireno) en la LET promedio (LiF). En la figura se presenta la LET como función de la energía promedio del haz de fotones para: (a) la fluencia total de electrones y (b) la fluencia de electrones secundarios.

LET promedio en LiF (Espectro de fluencia total de electrones)					
[keV/ μm]					
Código	\overline{E}_γ	Aire	Agua sólida	PMMA	Poliestireno
NS-20	15.7	6.33	6.34	6.36	6.36
NS -30	24	4.78	4.77	4.79	4.79
NS -60	47.3	3.50	3.50	3.51	3.50
NS -80	64.6	3.61	3.60	3.60	3.61
NS -100	82.7	3.92	3.89	3.90	3.92
NS -120	100	3.95	3.94	3.93	3.93
NS -150	117.2	3.68	3.68	3.68	3.68
NS -200	164.4	2.85	2.88	2.87	2.87
NS -250	208.4	2.29	2.31	2.31	2.31
NS -300	250.5	1.92	1.94	1.94	1.94
^{137}Cs	608.2	0.74	0.75	0.75	0.74
^{60}Co	1,044.7	0.53	0.54	0.54	0.54

Tabla 4.6: LET promedio calculada de la fluencia total de electrones en LiF rodeado por aire, agua sólida, PMMA y poliestireno, generados por los diferentes haces de fotones. Las incertidumbres en los valores están dentro del 0.1 % - 0.5 % y corresponden a $k=1$.

LET promedio en LiF (Espectro de fluencia de electrones secundarios)					
[keV/ μm]					
Código	\overline{E}_γ	Aire	Agua sólida	PMMA	Poliestireno
NS-20	15.7	18.70	18.70	19.08	19.09
NS -30	24	17.19	16.87	17.21	17.20
NS -60	47.3	14.35	14.38	14.40	14.39
NS -80	64.6	13.95	13.89	13.97	13.94
NS -100	82.7	14.49	14.43	14.48	14.45
NS -120	100	14.85	14.88	14.82	14.93
NS -150	117.2	14.72	14.72	14.72	14.68
NS -200	164.4	13.34	13.39	13.41	13.41
NS -250	208.4	11.94	11.99	12.00	11.98
NS -300	250.5	10.82	10.82	10.86	10.85
^{137}Cs	608.2	5.89	5.93	5.94	5.93
^{60}Co	1,044.7	3.78	3.80	3.79	3.80

Tabla 4.7: LET promedio calculada de la fluencia de electrones secundarios en LiF rodeado por aire, agua sólida, PMMA y poliestireno, generados por diferentes haces de fotones. Las incertidumbres en los valores están dentro del 0.1 % - 0.6 % y corresponden a $k=1$.

4.5. LET en agua

El agua es el principal compuesto que constituye a los seres vivos, por lo tanto, para propósitos de análisis de daño biológico las magnitudes dosimétricas se reportan en agua. El primer parámetro que describe el nivel de daño biológico es la energía transferida por unidad de masa o dosis, pero en algunos casos la calidad o la distribución espacial de la energía transferida juega un papel importante. En este trabajo se analiza la calidad de la radiación en términos de la LET. A continuación se muestran los resultados con una configuración constituida únicamente por agua, es decir, en la geometría de la simulación se establece que el dosímetro y el material dispersor son agua líquida. En la tabla 4.8 y figura 4.11 se reporta la LET promedio (totales y secundarios) en agua como función de la energía promedio del haz de fotones. La LET promedio (totales y secundarios) en LiF es hasta 2 veces mayor que en agua en todo el rango de energía evaluado. En la figura 4.11 se presentan los datos reportados por Kliauga et al [31], encontrando buen acuerdo con los datos calculados en este trabajo para energías menores que 20 keV y mayores que 150 keV.

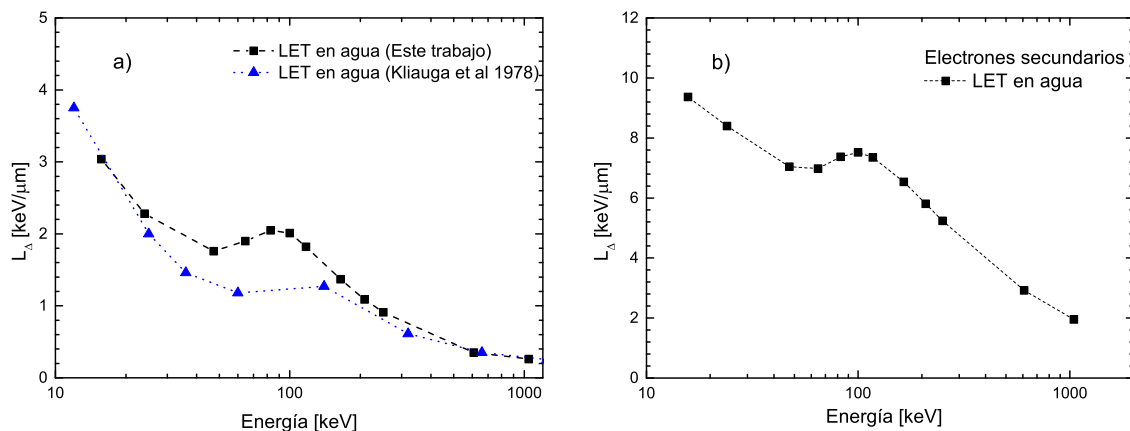


Figura 4.11: (a) LET promedio en agua obtenida del EFTE y (b) del EFES. Se muestran los datos de Kliauga et al [31].

Código	\overline{E}_γ	LET promedio [keV/ μm]			
		Total		Secundario	
		Agua líquida	LiF	Agua líquida	LiF
NS-20	15.7	3.04	6.37	9.37	19.12
NS -30	24	2.28	4.80	8.40	17.24
NS -60	47.3	1.76	3.51	7.04	14.40
NS -80	64.6	1.90	3.61	6.98	13.98
NS -100	82.7	2.05	3.90	7.37	14.49
NS -120	100	2.01	3.94	7.52	14.90
NS -150	117.2	1.82	3.69	7.35	14.76
NS -200	164.4	1.37	2.88	6.54	13.42
NS -250	208.4	1.09	2.32	5.81	12.03
NS -300	250.5	0.91	1.95	5.24	10.87
^{137}Cs	608.2	0.35	0.75	2.92	6.16
^{60}Co	1,044.7	0.26	0.54	1.95	4.15

Tabla 4.8: LET promedio en agua y LiF del espectro de fluencia de electrones (totales y secundarios).

En la figura 4.12 se presenta la fluencia de electrones en agua reportados por el ICRU-16 [2] y Kirkby et al [29]. Se observa un comportamiento similar para los haces de ^{137}Cs y ^{60}Co y los calculados en este trabajo.

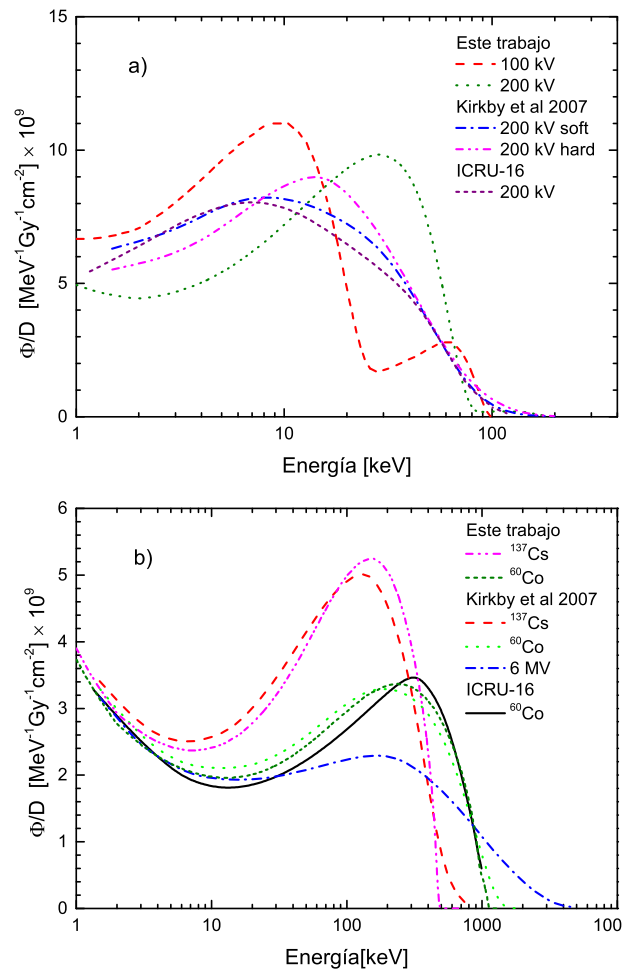


Figura 4.12: (a) Espectro de fluencia de electrones en agua líquida para haces de 100 kV y 200 kV, (b) espectros de fluencia de electrones para energías mayores a 200 kV. Se agregan los datos de Kirkby et al [29] y del ICRU-16 [2]

Capítulo 5

Discusiones

5.1. Espectro de fluencia de electrones

En este trabajo se realizaron cálculos de espectros de fluencia de electrones (totales y secundarios) por unidad de fluencia incidente generados por fotones en LiF rodeado de diferentes materiales. Estos espectros de electrones fueron normalizados por la dosis absorbida por unidad de fluencia incidente en LiF. Los resultados muestran que para un dado haz de rayos-X, la diferencia entre rodear LiF con PMMA, poliestireno o agua sólida puede estar entre 0.02 % hasta 2 % en la fluencia total dependiendo de la energía del electrón generado, siendo mayor cuando la energía del electrón aumenta. Comparando los materiales dispersores con respecto del aire, la diferencia máxima en la fluencia es del 8 %. Esta diferencia se debe posiblemente a los procesos de retrodispersión de los electrones secundarios en el material dispersor, los cuales aumentan cuando el número atómico del material incrementa. Considerando los electrones secundarios, la variación máxima en la fluencia es del 10 % con respecto del aire. La similitud de las diferencias en la fluencia de los espectros de electrones (totales y secundarios) muestra que en el espectro de electrones secundarios se ve reflejada la contribución en dispersión que provocan los diferentes materiales.

Con respecto de la forma del espectro, en la fluencia total se ve el reflejo de los electrones generados por el efecto fotoeléctrico y Compton. En la figura 4.2b se muestran los EFTE en LiF para los haces de rayos-X de 20-80 kV, se puede observar que el efecto fotoeléctrico predomina para los haces de 20-60 kV, y que el pico de los

electrones Compton comienza a visualizarse a partir del haz de 60 kV. En la figura 4.2c se muestran los EFTE en LiF para los haces de rayos-X de 100-200 kV. En esta región el efecto Compton llega a ser la interacción más probable y se observa que el pico debido a las interacciones fotoeléctricas decrece cuando se aumenta la energía del haz. En la figura 4.2d el haz de 250 kV muestra un incremento del 4-18 % en la fluencia de electrones en el rango de energía de 1-50 keV con respecto del haz de 300 kV. La fluencia de electrones en el EFTE del haz de 300 kV con respecto a ^{137}Cs se llega a duplicar en el intervalo de energía de 1-100 keV, mientras que con relación al ^{60}Co , la fluencia de electrones llega a ser 3 veces mayor en el mismo intervalo de energía. La diferencia más notable se encuentra entre el haz de 20 kV y ^{60}Co con un incremento inicial del 60 % en la fluencia de electrones y llega a ser hasta 10 veces mayor en el intervalo de energía de 1-10 keV. Con relación a los espectros de electrones secundarios (Fig. 4.4), la forma de la curva de fluencia vs la energía del electrón no muestra una tendencia que refleje los procesos de interacción del fotón incidente. En general se tiene que la fluencia de electrones incrementa cuando aumenta la energía del haz. Este comportamiento se explica debido a que al aumentar la energía del haz aumenta con ello la energía del electrón (primario) generado. El aumento en la energía del electrón primario le da la posibilidad de tener un mayor alcance en el LiF así como poder generar en su camino varios electrones secundarios de menor energía. Estos producen un espectro de electrones secundarios más amplio en energía como en intensidad. Otra característica que se observa en los espectros fluencia de electrones secundarios es la convergencia que tienen en la proximidad de la energía de corte (1 keV), con una tendencia a crecer cuando la energía disminuye. La fluencia de electrones secundarios originado por un haz de 300 kV llega a ser hasta 7 veces mayor que la fluencia originada por el haz de 20 kV en el intervalo de energía de 1-20 keV. Las diferencias en la fluencia entre el haz de 300 kV y ^{137}Cs en los EFES, es 3 % menor alrededor de 1 keV y llega a ser 4 veces menor en la proximidad de los 20 keV. Con respecto a ^{60}Co , las diferencias van desde el 3 % y llegan a ser 5 veces menor en la proximidad de los 20 keV.

En la figura 4.5 se presenta el cociente del área bajo la curva de la fluencia (número de electrones) secundaria y total de electrones. Se observa que los electrones secundarios generados en LiF representan el 2-4 % del total, dependiendo de la energía del haz de fotones, siendo mayor cuando la energía del haz aumenta. Se

observa de la figura 4.6 que para todos los haces de fotones estudiados, a la energía de 1 keV la contribución de los electrones secundarios es del orden de 30 % al 95 % dependiendo de la energía del haz de fotones, siendo mayor cuando la energía del haz de fotones aumenta. Este comportamiento puede ser atribuido al largo alcance de los electrones primarios cuando la energía del fotón es alta, los cuales generan mayor número de interacciones y consecuentemente mayor número de electrones secundarios. Los resultados de la figura 4.6 reflejan la importancia de los electrones secundarios en la interacción de fotones con la materia.

5.2. Alcance y energía promedio del electrón

En los resultados, se mostró que la energía promedio del electrón en el espectro total y secundario de electrones aumenta cuando la energía del haz incrementa, teniendo un mínimo local en el intervalo de energía de 40-120 keV. Este comportamiento se explica debido a que el efecto fotoeléctrico predomina para fotones con energías por debajo de 50 keV (Fig. 2.8), en donde la mayor parte de la energía del fotón es transferida al electrón. Cuando la energía del fotón aumenta por encima de 120 keV la interacción más probable es el efecto Compton, en donde solo una fracción de la energía del fotón es transferida (1 –18 keV, Tabla 4.1). La energía del electrón Compton es menor que la energía del foto-electrón anteriormente mencionada, por lo que se produce un mínimo local. De manera cualitativa, de los espectros de fotones con una energía promedio en el intervalo de energía donde se origina el mínimo local, se observa que el efecto fotoeléctrico contribuye en el espectro con un pico en la zona de alta energía (ver Fig. 4.2). Al aumentar la energía del haz de fotones tal pico decrece en intensidad, por lo tanto, la energía promedio de los electrones en el espectro disminuye. Por otra parte, la energía promedio del electrón Compton aumenta cuando la energía del haz de fotones se incrementa, y esta falta de electrones en la región de alta energía llega a compensarse, produciendo así un mínimo local.

Como se mencionó anteriormente, el pico producido por el efecto Compton comienza a visualizarse en los espectros de electrones (totales) alrededor del haz de 60 kV. Las diferencias entre la energía del pico y el valor teórico calculado (Klein-

Nishina) son mayores cuando la energía del haz de fotones aumenta, esto se debe a que los fotones dispersados contribuyen en el aumento de la fluencia de electrones en la región de baja energía (EFTE). En la figura 4.8 se comparan los datos obtenidos en este trabajo con los reportados por Davis et al [7] y se encuentran diferencias de hasta el 3 % en todo el rango de energía estudiado. Estas diferencias son atribuidas a la ligera variación de la geometría utilizada. Davis utiliza LiF con un espesor de 0.38 mm y en este trabajo de 0.89 mm.

5.3. LET en LiF

En el cálculo de la transferencia lineal de energía se utilizó el poder de frenado de colisiones restringido con una energía de corte de 1 keV para todos los espectros de fotones utilizados en este trabajo. La LET en LiF se evaluó de dos maneras: a) estableciendo la región de LiF con 10 capas de 0.089 mm y b) con una capa de 0.89 mm. En el método a) se obtuvo el promedio de la LET en las 10 capas mientras que en b) se obtuvo directamente la LET del espectro de electrones en el LiF. De los dos métodos analizados no se encontraron diferencias significativas (0.1 %).

Comparando las figuras 4.10 a y b se observa que la LET disminuye hacia un mínimo local alrededor de 40 keV, después incrementa y alcanza un máximo alrededor de 100 keV y finalmente disminuye cuando la energía del haz de fotones incrementa. Esto es debido a la alta contribución de la fluencia de electrones secundarios en la fluencia total cuando la energía del electrón disminuye (ver Fig 4.6). También se puede observar de la figura 4.10b que los electrones secundarios tienen una LET promedio de 3 a 6 veces mayor que la calculada con la fluencia total.

En la figura 4.9 se presenta la LET promedio corregida (círculos) y no corregida (cuadros) para la fluencia total y secundaria de electrones. Comparando la LET (sin corrección) de EFTE con los datos reportado por Davis et. al. [7] (triángulos) se encuentra que existe una diferencia menor que el 3 % para rayos X con energía menor que 117 keV, una discrepancia máxima del 13 % para el haz de rayo-X con una energía de 208 keV, y diferencias de 0.1 % y 7 % para los haces de ^{137}Cs y ^{60}Co , respectivamente. Estas discrepancias son atribuidas posiblemente a las diferencias

en la geometría de simulación. Davis et al [7] ha reportado que el poder de frenado de colisiones restringido predice bien la respuesta TL del LiF para fotones de bajas energías. Sin embargo no presentan una descripción detallada del cálculo del poder de frenado de colisiones restringido. Independientemente, Olko [10] ha calculado la energía lineal $\overline{y_F}$ (análogo de la LET en microdosimetría) como función de la energía del haz de fotones de bajas energías y encuentra una buena correlación con la respuesta del LiF. En el presente trabajo se encuentra que el máximo local de la LET está alrededor de $4 \text{ keV}/\mu\text{m}$ para fotones con una energía promedio de 100 keV , mientras que Olko [10] reporta un valor de $\overline{y_F}$ de $3.34 \text{ keV}/\mu\text{m}$ a una energía de 80 keV . Estas discrepancias pueden ser atribuidas a que en la simulación microdosimétrica de Olko se utiliza un código MC (TRION), la cual hace los cálculos en agua y los valores obtenidos son escalados por un factor de densidad a LiF.

Por otro lado, debido a la corrección, la LET promedio en LiF se incrementa en un 7–11 % para la fluencia total de electrones y en un 23–28 % para la fluencia de electrones secundarios en todo el rango de energía estudiado. Es importante señalar que existen trabajos donde se calcula el poder de frenado para electrones en agua mediante funciones dieléctricas por debajo de 1 keV . Dichos resultados muestran un incremento en el poder de frenado de 2 a 3 veces mayor que el obtenido a 1 keV [30]. Estos resultados sugieren que la falta de información espectral por debajo de 1 keV tiene una gran importancia en el análisis de la LET de los electrones generados por fotones.

5.4. LET en agua

Debido a que el agua es el medio con mayor importancia biológica se realizaron los cálculos con una geometría compuesta únicamente por agua líquida, conservando igual los parámetros de simulación como los establecidos para el cálculo de LET en LiF. Los cálculos realizados de LET en agua para los haces de ^{137}Cs y ^{60}Co muestran buen acuerdo con los reportados en la literatura. En este trabajo se encontró que para el haz de ^{60}Co se tiene una LET promedio en agua de $0.26 \text{ keV}/\mu\text{m}$, el ICRU 16 [2] reporta una LET de $0.23 \text{ keV}/\mu\text{m}$, mientras que Kirkby et. al. [29] de $0.25 \text{ keV}/\mu\text{m}$ y Kliauga et al [31] de $0.256 \text{ keV}/\mu\text{m}$. La LET promedio para el haz de

^{137}Cs calculada en este trabajo resultó ser de $0.35 \text{ keV}/\mu\text{m}$, el reportado por Kirkby de $0.36 \text{ keV}/\mu\text{m}$ y el de Kliauga et al [31] de $0.35 \text{ keV}/\mu\text{m}$. Kliauga, además de los haces mencionados anteriormente, reporta valores de LET para fotones monoenergéticos en el intervalo de energía de 12–320 keV (Ver Fig. 4.11). Estos valores están en buen acuerdo con los valores de LET calculados en este trabajo para haces fotones con energías menores que 25 keV y mayores que 140 keV. Las diferencias encontradas en el intervalo de 25 –140 keV pueden ser atribuidas a los parámetros utilizados en el tratamiento microdosimétrico de los cálculos. En la figura 4.11a se ilustran los espectros de electrones generados en agua líquida para un haz de 200 kV. Se indican los calculados en este trabajo y los reportados por Kirkby y el ICRU-16. Se observan grandes diferencias en el espectro de fluencia total de electrones y esto es atribuido a las diferencias en las energías efectivas (HVL) del haz de fotones en cuestión. En este trabajo, el haz de 200 kV tiene una HVL de 3.99 mmCu, Kirkby reporta HVLs de 0.273 mmCu (Hard) y 0.141 mmCu (Soft), mientras que el ICRU-16, 1 mmCu.

Capítulo 6

Conclusiones

Se calcularon mediante simulaciones Monte Carlo (EGSnrc) los espectros totales y secundarios de electrones en LiF y agua líquida generados por rayos-X de la serie NS-ISO [27]. En ambos casos están relacionados los espectros de electrones con su correspondiente LET y en el caso del LiF se evaluó el efecto de diferentes materiales dispersores (aire, PMMA, poliestireno y agua sólida).

No se encontraron cambios significativos de la LET y la energía promedio de los electrones en LiF (0.1 %) para los diferentes materiales dispersores (aire, PMMA, poliestireno y agua sólida). Se observa un máximo local en la LET en el intervalo de energía de 40–120 keV, esto debido a la transición del efecto fotoeléctrico y el Compton como interacción predominante.

La LET promedio (fluencia total) que produce un haz de 20 kV es hasta 10 veces mayor que la del ^{60}Co , mientras que, comparado con un haz de 200 kV la LET del haz de 20 kV es aproximadamente el doble. Esto podría apoyar los resultados reportados que indican que los rayos-X en mamografía podrían ser 3-4 veces más eficaces biológicamente que los rayos-X de energía intermedia, y hasta 8 veces mayor que los rayos gamma de ^{60}Co [13]. La corrección de la LET debido a la falta información espectral por debajo de 1 keV es del orden de 7–11 % y 23–28 % para la fluencia total y secundaria respectivamente.

Los resultados de este trabajo revelan que los electrones secundarios tienen una contribución muy importante en la fluencia total de electrones y consecuentemente la LET promedio de ellos se ve reflejada en la LET de la fluencia total como función de la energía del fotón.

Los valores de LET promedio en agua tanto para la fluencia total como secundaria de electrones para los haces investigados en este trabajo son menores que $10 \text{ keV}/\mu\text{m}$. Estos resultados apoyan la consideración del ICRP-106 [11] en su factor de ponderación por radiación.

Para una evaluación más exacta de la LET, y para tener una mejor interpretación de la respuesta TL del LiF: Mg, Ti expuesto a rayos-X de bajas energías bajo la influencia de diferentes materiales dispersores, se recomienda extender el estudio del poder de frenado, así como el espectro de electrones que producen estos haces, hacia valores debajo de 1 keV .

Capítulo 7

Apéndices

7.1. Apéndice A

7.1.1. Códigos de usuario EGSnrc

El código puede utilizarse de manera interactiva, el entorno visual se divide en las siguientes secciones:

- **General:** En esta sección se elige el código de usuario a utilizar (FLURZnrc, DOSRZnrc, SPRZnrc y CAVRZnrc), el área donde se busca el archivo que contiene las secciones eficaces (*.pegs4) y el nombre del archivo de entrada (*.egsinp) que contendrá toda la información de la simulación.
- **I/O control:** Esta sección permite guardar los números aleatorios. Cuando se utiliza DOSRZnrc se puede elegir la forma en la cual se despliegan los datos en el archivo (*.egslst) y en FLURZnrc se elige la resolución en energía del espectro de electrones en unidades de MeV (SLOTE). En este mismo paquete se puede elegir el tipo de espectro (primario o secundario) y la región de interés que se desea en el archivo de salida (*.spectra).
- **Monte Carlo:** En esta sección se establece el número de historias, el número máximo de horas permitidas, la precisión buscada y en el caso del cálculo de dosis se puede incluir el cálculo del kerma.
- **Geometry:** En esta sección se diseña la geometría y se puede optar por realizarla mediante planos o por regiones. Los materiales disponibles se encuentran

en el archivo peps4.

- Source: En esta sección se elige la fuente, la cual puede ser de electrones, positrones o fotones. Se establece la energía incidente del haz (monoenergético o espectro). Se establece el número de fuente, opción que permite elegir entre una fuente puntual, una fuente de haz paralelo, etc.
- Transport parameter: En esta sección se establecen los parámetros de transporte de electrones y fotones y los utilizados en este trabajo son los siguientes:
 - Pair angular sampling: Simple
 - Brems angular sampling: KM (Koch-Motz)
 - Brems cross sections: BH (Bethe-Heitler)
 - Electron-step algorithm: PRESTA-II
 - Electron impact ionization: off
 - Boundary crossing algorithm: EXACT
 - Global ECUT: 0.512 MeV
 - Global PCUT: 0.001 MeV
 - STEPE: 0.01
 - Spin effects: ON
 - Photon cross section library: XCOM
 - Bound Compton: ON
 - Rayleigh scattering: ON
 - PE angular sampling: ON
 - Atomic relaxation: ON
- Variance reduction: En esta sección se puede elegir un método que permita el incremento de la precisión en los cálculos.
- Plot control: En esta sección se eligen las opciones del espectro de fluencia, tales como: tipo de partícula, las regiones, fluencia primaria o total y el tipo de gráfica (puntos o histograma).

7.2. Apéndice B

7.2.1. Instalación del código Monte Carlo

7.2.1.1. Instalación en Mac-OSX

Para una instalación exitosa en Mac-OS se debe seguir el siguiente procedimiento.

- Instalar el paquete XQUARTZ para Lion o Mountain Lion:
<http://xquartz.macosforge.org/>
- Instalar XCode y COMMAND-LINE TOOLS. Se necesita un ID de Apple y está disponible en: <https://developer.apple.com/downloads/>
- Instalar MACPORTS: <http://www.macports.org/>
- Instalar qt3 bajo macports, introduciendo lo siguiente en la línea de comando:
`port install qt3.`
- Establecer la variable de entorno del qt3. Esto se logra agregando la siguiente línea en el archivo `.profile` que se encuentra en el directorio `$HOME`:
`export QTDIR=/opt/local/lib/qt3`
- Instalar un compilador de C++ y fortran (recomendable una versión menor o igual que el gfortran 4.5.x).
- Solicitar los paquetes del código EGSnrc en la siguiente página (eligiendo la versión de software como command-line installer):
http://www.nrc-cnrc.gc.ca/eng/solutions/advisory/egsnrc/download_egsnrc.html
- Guardar en un carpeta los archivos que se te proporcionan. Ejecutar el archivo `egs.install` desde la terminal. Este script descomprime los archivos y comienza la configuración. Como primer paso el script te solicitará la dirección donde están guardados los archivos. El segundo paso es proporcionar la dirección donde se guardarán todos los códigos de usuario. Se recomienda el directorio `$HOME/HEN_HOUSE`. El tercer paso es proporcionar el compilador de fortran que actualmente tienes instalado y el cual deseas utilizar. El cuarto paso es proporcionar el compilador C++. Al finalizar este proceso se creará un archivo de configuración que podrás encontrar en `$HEN_HOUSE/specs/`, además

se te indicará en la terminal las variables de entorno que deberás agregar en el archivo `.profile`. La información detallada de cómo configurar los códigos de usuario se encuentra en el manual PIRS877 que se encuentra directorio `$HEN_HOUSE/docs`.

- Antes de compilar los códigos del usuario (`finalize_egs_foruser`) se debe tomar en cuenta la siguiente recomendación:
 - Durante la configuración del compilador de fortran, en la opción `flags` se puede agregar `-O3` y `-ffast-math`.
- La compilación de todos los códigos de usuario EGS++ fallan. Esto se repara de la siguiente manera:
 - En el directorio `$HEN_HOUSE/specs` se encuentra el archivo `egspp_$your-machine_$your_fortran_compiler.conf`, este archivo se modifica comentado la línea `shared bundle=-bundle`. Se remueve `-lcrt1.10.5` de la línea que empieza con `fortran_libs=` y se agrega `-lSystem` en la misma línea.
 - Una vez hecho lo anterior ir al directorio `$HEN_HOUSE/egs++` y compilar EGS++. Una vez compilado, agregar la variable de entorno `DYLD_LIBRARY_PATH` que se encontrará en la dirección `$HEN_HOUSE /egs++/dso/tu_configuracion`.

7.2.1.2. Instalación en Linux

- En Linux el código se puede instalar de la misma manera que en Mac-OS. También existe la posibilidad de utilizar un asistente de instalación. Este archivo se puede obtener eligiendo como versión del software la de Linux en la página que a continuación se proporcionará:
http://www.nrc-cnrc.gc.ca/eng/solutions/advisory/egsnrc/download_egsnrc.html
- En este sistema operativo también se debe instalar el qt3 y los compiladores de fortran y C++ antes de empezar el proceso de instalación.

7.3. Apéndice C

7.3.1. Código en Matlab para el cálculo de la LET

Este programa calcula la LET en LiF del espectro de fluencia de electrones en el archivo de salida .spectra que se obtiene del código FLURZnrc.

```

clc
clear all
dir='../Co60PMMA.spectra';%Directorio del archivo
fid = fopen(dir,'rt');
nLines = 0;
while (fgets(fid) = -1),
nLines = nLines+1;
end
fclose(fid);
fid = fopen(dir,'rt');
%Cálculo de delta (efecto por densidad)
a0=-0.1941; a1=0.6341; a2=-0.0196; a3=-0.0027;
%Propiedades del material (LiF)
densidad = 2.635;
za=0.463;
eledens=2.786E+23;
ipotencial=94;
zeff=8.2;
%Energia, Fluencia, Incertidumbre, bloque de datos
j=1;
k=1;
delta=0;
l=1;
for i = 1: (nLines -1)
alex = fgets(fid,1);
if alex = char(64)
if alex = char(38)
dato(j,.,k) = fscanf(fid, '%f%f%f', 3);%Se leen los datos

```

```

if dato(j:j,1:1,k) > 1.0e-3
x(l,k)=dato(j:j,1:1,k);
y(l,k)=dato(j:j,2:2,k); incert(l,k)=dato(j:j,3:3,k);
%Cálculo de los poderes de frenado
tao= x(l,k)/0.511;
beta2 = 1 - ( 1/( tao + 1 ) ) * ( 1/( tao + 1 ) );
konst=0.1535*za/beta2;
c=0.15*za;
num1 = (tao*tao*2/8) - (2*tao + 1)*log(2.0);
den1 = (tao+1)*(tao+1);
fmenos = 1- beta2 + (num1/den1);
num2 = (tao+2)*tao*tao;
den2 = 2*(ipotencial/511000.0)*(ipotencial/511000.0);
if x(l,k) > 3.00e-01
delta = a0 + a1*x(l,k) + a2*x(l,k)*x(l,k) + a3*x(l,k)*x(l,k)*x(l,k);
end
cutoff=0.001; % Energía de corte (delta) [MeV]
eta = cutoff/x(l,k);
gmenos = -1 - beta2 + log(4*(1-eta)*eta) + (1/(1-eta)) + (1-beta2)*((tao*tao)*(eta*eta)/2
+ (2*tao + 1)*log(1-eta));
sp(l,k)= konst*(log(num2/den2) + fmenos - delta - 2*c/zeff);
if x(l,k) > 2*cutoff
sp2(l,k) = konst*(log(num2/den2) + gmenos - delta - 2*c/zeff);
else
sp2(l,k)=sp(l,k);
end
l=l+1;
end
j=j+1;
else
k=k+1;
delta=0;
j=1;
l=1;

```

```

end
end
fgets(fid); % Salto de línea
end
fclose(fid);
%Calcular la LET promedio [MeV cm2/g]
for j=1:k
suma1=0; % Cálculo utilizando el de frenado de colisiones restringido
suma2=0; % Denominador de la integral
suma3=0; % Numerador utilizando solo el poder de frenado de colisiones
suma4=0;
for i=1:(length(x)-1)
suma1 = suma1 + ((x(i+1,j)-x(i,j))*(sp2(i+1,j)+sp2(i,j))*(y(i+1,j)+y(i,j))/4); % SPC
restringido
suma2 = suma2 + (y(i+1,j)+y(i,j))*((x(i+1,j)-x(i,j))/2); % Denominador de la in-
tegral
suma3 = suma3 + ((x(i+1,j)-x(i,j))*(sp(i+1,j)+sp(i,j))*(y(i+1,j)+y(i,j))/4); %SPC
total
suma4 = suma4 + (y(i+1,j)+y(i,j))*((x(i+1,j)-x(i,j))/2 );
end
al(j)=suma2;
Te(j)=suma2;
let1(j)=suma1/suma2; % Restringido sin corregir
let2(j)= (suma1 + x(1,j)*y(1,j)*sp(1,j))/(suma2 + x(1,j)*y(1,j)); % Restringido co-
rregido
let3(j)=suma3/suma2; % Colisiones total sin corregir
let4(j)= (suma3 + x(1,j)*y(1,j)*sp(1,j))/(suma2 + x(1,j)*y(1,j)); % Colisiones total
corregido
end
mostrar1 = [let1(1:k/2)', let2(1:k/2)'];
mostrar2 = [let3(1:k/2)', let4(1:k/2)'];
mostrar3 = [let1((k/2)+1:k)', let2((k/2)+1:k)'];
mostrar4 = [let3((k/2)+1:k)', let4((k/2)+1:k)'];
fprintf('Fluencia Total \n SPr no SPr si \n')

```



```
% Imprimir los resultados
disp(mostrar1)
fprintf(' SP no SP si \n')
disp(mostrar2)
fprintf('Fluencia secundaria \n SPr no SPr si \n')
disp(mostrar3)
fprintf(' SP no SP si \n')
disp(mostrar4)
fid = fopen('dat.txt','w');
% Guardar los datos del espectro en archivo .txt
for i=1:length(x) % El índice 'i' indica el número del espectro
fprintf(fid, '%10.4e %10.4e %11.4e \n', x(i,1), y(i,1), incert(i,1));
end
```

Bibliografía

- [1] F. H. Attix, «Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry». USA: WILEY-VCH, (2004).
- [2] ICRU, «ICRU report 16: Linear Energy Transfer». Washington, DC: International Commission on Radiation Unit and Measurements, (1970).
- [3] S. W. S. McKeever, «Thermoluminescence of Solids», USA: Cambridge University Press, (1983).
- [4] M.P.R. Waligórski, R. Katz, «Supralinearity of peak 5 and peak 6 in TLD-700», Nucl. Instrum. Methods. **172** (1980) 463-470.
- [5] Y. S. Horowitz, «The theoretical and microdosimetric basis of thermoluminescence and applications to dosimetry», Phys. Med. Biol. **26** 765.
- [6] J. Kalef-Ezra, Y.S. Horowitz, «Heavy charged particle thermoluminescence dosimetry: track structure theory and experiments», Int. J. Appl. Radiat. Isot. **33** (1982) 1085-1100.
- [7] S. D. Davis, C. K. Ross, P. N. Mobit, L. Van der Zwan, W. J. Chase and K. R. Shortt, «The response of LiF thermoluminescence Dosimeter to photon beam in the energy range from 30 kV X rays to ^{60}Co gamma rays». Rad. Prot. Dosim. **106** (2003) 33-44.
- [8] A. A. Nunn, S. D. Davis, J. A. Micka and L. A. DeWerd, «LiF:Mg, Ti TLD response as a function of energy for moderately filtered x-ray spectra in the range of 20-250 kVp relative to ^{60}Co ». Med. Phys. **35** (2008) 1859-1869.

- [9] G. Massillon-JL, A. Cabrera-Santiago, R. Minniti, M. O'Brien, C. Soares, «Influence of phantom materials on the energy dependence of LiF:Mg,Ti thermoluminescent dosimeters exposed to 20-300 kV narrow x-ray spectra, ^{137}Cs and ^{60}Co photons», *Phys. Med. Biol.* (2014) en revisión.
- [10] P. Olko, «Microdosimetry, tracks structure and the response of thermoluminescence detectors», *Radiat. Meas.* **41** (2007) S57-S70.
- [11] ICRP, «Las recomendaciones 2007 de la comisión internacional de protección radiológica». ICRP publicación 103. Madrid, España: Senda editorial, (1970).
- [12] D. Frankenberg, K. Kelnhofer, K. Bär and M. Frankenberg-Schwager, «Enhanced neoplastic transformation by mammography X rays relative to 200 kVp X rays: Indication for a strong dependence on photon energy of the RBE_M for various end points». *Radiat. Res.* **112** (2004) 471-481.
- [13] M. A. Hill, «The variation in biological effectiveness of x-rays and gamma rays with energy». *Radiat. Prot. Dosim.* **157** (2002) 99-105.
- [14] UNSCEAR, «Sources and Effects of Ionizing Radiation». UNSCEAR, Report to the General Assembly with Scientific Annexes: United Nations, (2008).
- [15] AAPM, «AAPM protocol for 40-300 kV x-ray beam dosimetry in radiotherapy and radiobiology». *Med. Phys.* **28** (2001) 868.
- [16] National Institute of Standard and Technology, NIST.
<http://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/ESTAR.html>
<http://www.nist.gov/pml/data/xraycoef/>
- [17] R. J. Aukett, J. E. Burns, A. G. Greener, R. M. Harrison, C. Moretti, A. E. Nahum and K. E. Rosser, «The IPEMB code of practice for the determination of absorbed dose for x-rays below 300 kV generating potential (0.035 mm Al – 4 mm Cu HVL; 10-300 kV generating potential)». *Phys. Med. Biol.* **41** (1996) 2605.
- [18] E. B. Podgorsak, «Radiation Oncology Physics». Austria: International Atomic Energy Agency, (1986).

- [19] J. M. Ixquiac-Cabrera, I. Gamboa-deBuen, O. Ávila y M. E. Brandan, «Relative efficiency of TLD-100 exposed to x-rays», Tenth Mexican Symposium on Medical Physics. **141** (2008) 1032.
- [20] Llya M. Sobol «A Primer for the Monte Carlo Method», USA: CRC Press, (1994).
- [21] P. Andreo, «Monte Carlo techniques in medical radiation physics», Phys. Med. Biol. **36** (1991) 861-920.
- [22] A. F. Bielajew, «Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport», The University of Michigan (2001).
- [23] M. J. Berger, «Monte Carlo Calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles», Methods in Comput. Phys., **1** (1963) 135-215.
- [24] D.W.O. Rogers, I. Kawrakow, B.R.B. Walters y E. Mainegra-Hing, «NRCC Report PIRS-702», (2011).
- [25] H. Saitoh, T. Tomaru, T. Fujisaki, S. Abe, A. Myojoyama, K. Fukuda, «A study on properties of water substitute solid phantom using EGS code», Proceedings of the Tenth EGS4 Users Meeting in Japan, KEK Proceedings, **18** (2002) 55 .
- [26] Faiz M. Khan, «The Physics of Radiation Therapy». USA: Williams & Wilkins, (2010).
- [27] U. Ankerhold, «Catalogue of x-ray spectra and their characteristic data-ISO and DIN radiation qualities, therapy and diagnostic radiation qualities, unfiltered X ray spectra», PTB-Bericht Dos-34 (2000).
- [28] A. E. Nahum, «Water/air mass stopping power ratios for megavoltage photon and electron beam», Health Phys. **87** (1978) 166.
- [29] C. Kirkby, C. Field, M. MacKenzie, A. Syme and B. G. Fallone, «A Monte Carlo study of the variation of electron fluence in water from a 6 MV photon beam outside of the field», Phys. Med. Biol. **52** (2007) 3563.
- [30] J. C. Ashley, «Stopping power of liquid water for low-energy electrons», Radiat. Res. **89** (1982) 25.

- [31] P. Kliauga and R. Dvorak, «Microdosimetric measurement of ionization by monoenergetic photons», *Radiat. Res.* **73** (1978) 1-20.