

# Simulació Montecarlo del transport d'electrons i fotons d'alta energia

J. Baró,\* J.M. Fernández-Varea,† R. Mayol,‡ F. Salvat,§ A. Sánchez-Reyes,¶ i J. Sempau||

## Introducció

Poc més d'un segle després del descobriment dels raigs X i de la radioactivitat natural, les radiacions d'alta energia constitueixen la base de diverses tècniques analítiques, mèdiques i industrials. Fonts radioactives (fonamentalment emissors beta i gamma) i acceleradors d'electrons (des dels simples canons dels generadors de raigs X fins als sofisticats acceleradors lineals per a radioteràpia) formen part de l'inventari de molts laboratoris industrials i de recerca, i de pràcticament totes les instal·lacions sanitàries. Cada instal·lació radioactiva disposa també de detectors de diferents tipus, des dels reglamentaris dosímetres personals fins a complexos sistemes d'alta resolució espacial i energètica, passant per cambres d'ionització, detectors d'escintillació, etc. L'establiment i el seguiment de normes de radioprotecció, la quantificació de la dosi administrada a pacients en radioteràpia o en exploracions mèdiques (Andreo, 1991) i l'estudi de la resposta de detectors són exemples de problemes que requereixen un coneixement detallat de les propietats de la interacció de la radiació amb la matèria.

La descripció teòrica del transport (propagació i interacció) de radiació és un dels temes centrals de la física del nostre segle i ho seguirà sent en el futur. En aquest article considerem el transport de fotons, electrons i positrons amb energies compreses entre aproximadament 1 keV i 1 GeV. La interacció amb el medi

provoca canvis en la radiació (dispersió, pèrdua d'energia, generació de radiacions secundàries) i alteracions del medi (ionitzacions, excitacions, ruptures d'enllaços moleculars...). L'estudi microscòpic d'aquestes alteracions requereix una descripció completa de l'estructura del material i queda fora de l'abast d'aquest treball. Dins l'interval d'energies considerat, els càlculs d'electrodinàmica quàntica i física atòmica proporcionen una descripció suficientment acurada de l'efecte de la interacció sobre la radiació, de manera que disposem de la informació necessària per descriure la penetració i diposició d'energia en el si del material. Normalment aquesta informació ve donada en termes de seccions eficaces diferencials per àtom; l'única aproximació que hem d'introduir és la suposició que l'estat d'agregació no altera apreciablement les característiques de la interacció amb els àtoms individuals (és a dir, els efectes d'interferència entre les ones dispersades per diferents àtoms és negligible). Aquesta aproximació està justificada sempre que el material sigui amorf (o policristallí) i la longitud d'ona de la radiació sigui petita en comparació amb les distàncies interatòmiques.

Quan una partícula<sup>1</sup> d'alta energia penetra en un medi material origina una allau de partícules secundàries; el nombre de partícules secundàries augmenta amb el temps i, a la vegada, la seva energia mitjana disminueix fins que, finalment, tota l'energia de la partícula primària es diposita en el material fonamentalment en forma d'excitacions electròniques i ionitzacions. En principi, l'evolució d'aquestes allaus es pot descriure mitjançant la resolució numèrica de l'anomenada equació del transport de Boltzmann. En la pràctica, però, això només és factible amb models físics (seccions eficaces) extremadament simplificats i geometries molt senzilles (medis infinits o làmines fines, idealitzacions massa simplistes per als casos d'interès). A finals dels anys cinquanta, després de prop de tres dècades de treball i contribucions de físics de primera fila com ara Bethe, Bothe, Heitler, Landau i Molière, es disposava només d'informació molt fragmentària.

En realitat, la formulació del problema en termes

<sup>1</sup>Utilitzem el terme *partícula* per referir-nos tant als electrons i positrons com als fotons.

\***Josep Baró** (Barcelona, 1960) és doctor en Física per la Universitat de Barcelona (1993) i és responsable de radioprotecció de la UB.

†**José María Fernández-Varea** (Barcelona, 1963) és doctor en Ciències Físiques per la Universitat de Barcelona (1992) i és professor associat del Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria de la UB.

‡**Ricardo Mayol** (Barcelona, 1958) és doctor en Física per la Universitat de Barcelona (1988) i és professor titular del Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria de la UB.

§**Francesc Salvat** (Reus, 1954) és doctor en Física per la Universitat de Barcelona (1983) i és professor titular del Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria de la UB.

¶**Alberto Sánchez-Reyes** (Madrid, 1960) és doctor en Física per la Universitat de Barcelona (1988) i és especialista del Servei d'Oncologia Radioteràpica a l'Hospital Clínic de Barcelona.

||**Josep Sempau** (Barcelona, 1966) és doctor en Física per la Universitat Politècnica de Catalunya (1996) i és col·laborador de recerca a l'Institut de Tècniques Energètiques de la UPC.

d'una equació del transport oculta les característiques aleatòries de les allaus. És molt més directe i eficient utilitzar tècniques de simulació Montecarlo, que permeten considerar tant models físics com geometries realistes (Jenkins et al., 1988). Un dels avantatges del mètode de Montecarlo és que reproduïx els detalls de les allaus individuals, de manera que hom disposa d'informació més detallada que la que s'obté de la solució de l'equació del transport de Boltzmann. L'inconvenient del mètode és que, igual que en l'experiment que s'intenta simular, els resultats estan afectats per incerteses estadístiques. Per reduir la magnitud de la incertesa, la solució òbvia (n'hi ha que són una mica més eficients) és augmentar el nombre d'allaus simulades, és a dir, el temps de *mesura*. Aquest és l'únic cas que coneixem en el qual l'estricta similitud del càlcul amb l'experiment no és desitjable.

La història de les simulacions Montecarlo del transport de radiació comença abans de la popularització dels ordinadors. El primer càlcul numèric que ens consta el van realitzar Hayward i Hubbell l'any 1954. Amb una calculadora van generar 67 trajectòries de fotons, una feïna en aquell temps, que avui costa només unes centèsimes de segon amb un modest ordinador personal. L'inici de les simulacions de partícules carregades d'alta energia el marca el treball de Berger l'any 1963, que estableix les bases del desenvolupament d'aquest tipus de càlculs fins avui en dia. A mitjan anys vuitanta apareixen els primers programes d'ordinador *generals* que permeten simular allaus d'electrons i fotons en medis de composició arbitrària. Els més coneguts són:

- ETRAN (*Electron TRANsport*) desenvolupat per Berger i Seltzer (National Bureau of Standards),
- EGS4 (*Electron-Gamma Shower 4*) de Nelson, Hirayama i Rogers (Stanford Linear Accelerator Center), i
- ITS (*Integrated Tiger Series*) de Halbleib et al. (Sandia National Laboratories).

A la referència (Jenkins et al., 1988) es dona una descripció detallada d'ETRAN i ITS i es comparen tots tres programes. També es mostren una sèrie d'aplicacions pràctiques, centrades en el camp de la física mèdica de radiacions.

Quasi tots els resultats de simulacions que es presenten en aquest article han estat generats amb el programa PENELOPE (*PENetration and Energy LOss of Positrons and Electrons*), desenvolupat pel nostre grup. PENELOPE té implementat un model físic més acurat que els incorporats als programes esmentats abans i permet simular allaus d'electrons, positrons i fotons amb energies des d'1 keV fins a 1 GeV en medis materials de composició arbitrària. Els programes font, la base de dades i un manual abreujat es poden obtenir a través de la base de dades de la Nuclear Energy Agency.<sup>2</sup> El sis-

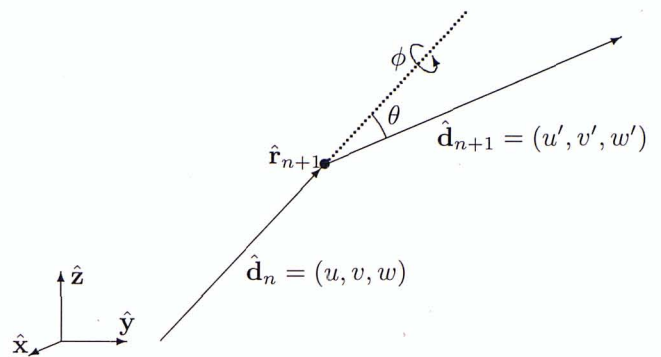


Figura 1: Canvi de direcció de la partícula en una interacció

tema de programes inclou també un paquet de subrutines geomètriques que permet considerar sistemes materials consistents en cossos homogenis limitats per superfícies quàdriques (expressables com a equacions de segon grau en  $x$ ,  $y$  i  $z$ ).

## Algorisme de simulació

A continuació descrivim d'una manera elemental l'estructura de l'algorisme o procediment de simulació, deixant de banda els detalls tècnics relatius al càlcul de les seccions eficaces d'interacció. Per simplicitat, aquí considerem les interaccions de partícules amb un medi homogeni constituït per àtoms d'un únic element, de nombre atòmic  $Z$ . El nombre d'àtoms per unitat de volum és  $\mathcal{N} = N_A \rho / A$ , on  $N_A$  és el nombre d'Avogadro,  $\rho$  la densitat del material i  $A$  el pes atòmic.

Una partícula d'energia  $E$  (energia cinètica en el cas d'electrons i positrons) pot interaccionar amb el material mitjançant diferents processos, que distingirem amb un subíndex A, B... En una interacció de tipus A, la partícula perd una certa quantitat d'energia  $W$ , es desvia cap a la direcció definida pels angles polar  $\theta$  i azimutal  $\phi$  (relatius a la direcció d'incidència, figura 1) i, possiblement, genera partícules secundàries (amb direccions de moviment i energies que poden estar correlacionades amb les variables de la partícula primària). Les interaccions de tipus A amb un àtom aïllat estan caracteritzades per una secció eficaz diferencial  $\sigma_A(E; W, \theta, \phi \dots)$ , que es calcula teòricament o es determina mitjançant mesures experimentals. Per simplificar suposarem que la secció eficaz diferencial depèn únicament de les variables  $W$ ,  $\theta$  i  $\phi$ . La quantitat

$$\mathcal{N} \sigma_A(E; W, \theta, \phi) dW d\Omega \quad (1)$$

representa la probabilitat per unitat de recorregut que la partícula pateixi una interacció de tipus A amb el medi,

<sup>2</sup>OECD Nuclear Energy Agency Data Bank, Le Seine Saint-Germain, 12 Boulevard des Iles, 92130 Issy-les-Moulineaux,

França (E-mail: Nea@db.nea.fr).

en la qual perd una energia entre  $W$  i  $W+dW$  i es desvia cap a una direcció compresa en l'element d'angle sòlid  $d\Omega$  al voltant de la direcció  $(\theta, \phi)$ . La probabilitat per unitat de recorregut que hi hagi una interacció de tipus A, sigui quina sigui la pèrdua d'energia i la desviació, és

$$\frac{1}{\lambda_A} \equiv \mathcal{N}\sigma_A(E) = \mathcal{N} \int_0^E dE \int_{4\pi} d\Omega \sigma_A(E; W, \theta, \phi), \quad (2)$$

on  $\sigma_A(E)$  és la secció eficaç total per a les interaccions de tipus A i  $\lambda_A$  és el corresponent recorregut lliure mitjà o distància mitjana entre interaccions consecutives d'aquest tipus. Les variables  $W$ ,  $\theta$  i  $\phi$  es poden considerar com a variables aleatòries que, en cada interacció de tipus A, prenen valors distribuïts d'acord amb la distribució de probabilitat

$$p_A(E; W, \theta, \phi) \equiv \frac{\sigma_A(E; W, \theta, \phi)}{\sigma_A(E)}. \quad (3)$$

Per a medis isòtrops (i radiació no polaritzada), la secció eficaç diferencial és independent de l'angle azimutal  $\phi$ , de manera que  $p_A$  depèn només de les variables  $W$  i  $\theta$ .

La probabilitat d'interacció, de qualsevol tipus, per unitat de recorregut ve donada per

$$\frac{1}{\lambda_T} = \frac{1}{\lambda_A} + \frac{1}{\lambda_B} + \dots = \mathcal{N} [\sigma_A(E) + \sigma_B(E) + \dots] \equiv \mathcal{N}\sigma_T, \quad (4)$$

on  $\lambda_T$  és el recorregut lliure mitjà de la partícula entre interaccions consecutives. És fàcil demostrar que la probabilitat que la partícula a partir de qualsevol punt de la seva trajectòria avanci una distància  $s$  abans de patir la primera interacció és

$$p(s) = \frac{1}{\lambda_T} \exp(-s/\lambda_T). \quad (5)$$

El tipus d'interacció que té lloc al final del trajecte es pot considerar com una variable aleatòria discreta, sent les probabilitats dels diferents processos

$$p_A = \frac{\sigma_A}{\sigma_T}, \quad p_B = \frac{\sigma_B}{\sigma_T} \quad \dots \quad (6)$$

L'ingredient bàsic de tota simulació Montecarlo és la generació (sorteig) de valors d'una variable aleatòria  $x$  distribuïts d'acord amb una distribució  $p(x)$  donada (Kalos i Whitlock, 1986). El mètode més habitual és partir d'un generador de nombres pseudoaleatoris, que donen valors  $\xi$  aleatoris uniformement distribuïts en l'interval obert  $(0,1)$ , i transformar-los de manera adequada per obtenir valors  $x(\xi)$  distribuïts segons  $p(x)$ . Tots els sistemes operatius proporcionen generadors de nombres pseudoaleatoris. Moltes vegades hom prefereix un generador independent del sistema operatiu de l'ordinador, com per exemple el següent:

$$R_n = 7^5 R_{n-1} \pmod{2^{31} - 1}, \quad \xi_n = R_n / (2^{31} - 1), \quad (7)$$

que genera una successió de valors  $\xi$  uniformement distribuïts en  $(0,1)$  a partir d'una llavor  $R_0$  ( $< 2^{31} - 1$ ). Òbviament, la successió no és estrictament aleatòria, ja que es genera mitjançant un algorisme determinista; però és difícil que les subtils correlacions entre els elements de la successió afectin els resultats de la simulació. Aquest generador té un període de l'ordre de  $10^9$ , de manera que resulta adient per a simulacions *curtes*; en una simulació llarga és possible esgotar el període i repetir la seqüència de nombres aleatoris, fet que s'ha d'evitar. Afortunadament, hom disposa de generadors molt més sofisticats, amb períodes pràcticament inesgotables i amb molt bones propietats aleatòries.

El mètode més simple per generar valors aleatoris  $x \in (a, b)$  distribuïts segons  $p(x)$  és el mètode d'inversió, que consisteix a obtenir  $x$  com a solució de l'equació

$$\int_a^x p(x) dx = \xi \int_a^b p(x) dx. \quad (8)$$

Per exemple, en el cas de la distribució exponencial (5) el mètode d'inversió dona la fórmula de sorteig

$$s = -\lambda_T \ln(1 - \xi) = -\lambda_T \ln \xi, \quad (9)$$

on hem aprofitat que  $1 - \xi$  és també un nombre aleatori en  $(0,1)$ . Aquesta fórmula és exacta, és a dir, si  $\xi$  és estrictament aleatori,  $s$  també ho és i està distribuït segons  $p(s)$ . El mètode es pot aplicar també a distribucions discretes. En el cas de la distribució donada per les expressions (6), el resultat del sorteig és

$$\begin{aligned} &A \quad \text{si } \xi < p_A, \\ &B \quad \text{si } p_A \leq \xi < p_A + p_B, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (10)$$

El mètode d'inversió és útil per sortejar distribucions analítiques senzilles (les que permeten resoldre l'equació (8) analíticament) i distribucions definides de manera numèrica. Existeixen altres tècniques generals de sorteig (Kalos i Whitlock, 1986) que permeten elaborar algorismes exactes per a pràcticament qualsevol distribució.

### Generació d'allaus

L'estat d'una partícula immediatament després d'una col·lisió (o després d'iniciar la seva trajectòria) es caracteritza per la seva energia  $E$  i per coordenades de posició  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  i direcció de moviment  $\hat{\mathbf{d}} = (u, v, w)$  referides al sistema de referència del laboratori ( $\hat{\mathbf{d}}$  és de norma 1). L'estat inicial (i el tipus de partícula) es determina, mitjançant sorteig, d'acord amb les característiques de la font.

Cada trajectòria simulada (o *història*, en la terminologia habitual) consisteix en una successió d'estats  $\mathbf{r}_n, E_n, \hat{\mathbf{d}}_n$ , on  $\mathbf{r}_n$  és la posició de la interacció  $n$ -èsima, i  $E_n$  i  $\hat{\mathbf{d}}_n$  són l'energia i la direcció de moviment *immediatament* després d'aquesta interacció. La generació

de la trajectòria aleatòria es fa de la manera següent. Suposem que ja hem fet part de la feina i la partícula es troba en un estat  $\mathbf{r}_n, E_n, \hat{\mathbf{d}}_n$ .

1. La distància  $s$  (recorregut lliure) fins a la interacció següent es genera amb la fórmula de sorteig (9).

2. La interacció té lloc a la posició

$$\mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_n + s\hat{\mathbf{d}}_n. \quad (11)$$

3. El tipus d'interacció (A, B...) se selecciona a partir de les probabilitats respectives donades per l'equació (6).

4. La pèrdua d'energia  $W$  i l'angle polar  $\theta$  es generen a partir de la distribució de probabilitat corresponent, donada per l'equació (3), mitjançant tècniques de sorteig adients. L'angle azimutal  $\phi$  se sorteja uniformement en l'interval  $(0, 2\pi)$  utilitzant la fórmula  $\phi = 2\pi\xi$ .

5. L'energia de la partícula es redueix,  $E_{n+1} = E_n - W$ , i la direcció del moviment després de la interacció  $\hat{\mathbf{d}}_{n+1} = (u', v', w')$  s'obté realitzant la rotació del vector  $\hat{\mathbf{d}}_n = (u, v, w)$  (figura 1) determinada pels valors dels angles de dispersió  $\theta$  i  $\phi$ . Explícitament,

$$\begin{aligned} u' &= u \cos \theta + \frac{\sin \theta}{\sqrt{1-w^2}} [uw \cos \phi - v \sin \phi], \\ v' &= v \cos \theta + \frac{\sin \theta}{\sqrt{1-w^2}} [vw \cos \phi + u \sin \phi], \\ w' &= w \cos \theta - \sqrt{1-w^2} \sin \theta \cos \phi. \end{aligned} \quad (12)$$

Quan  $w \simeq 1$ , és a dir, quan la direcció inicial és paral·lela a l'eix  $z$ , les expressions anteriors no són vàlides. En aquest cas es pot evitar el problema utilitzant l'aproximació  $\hat{\mathbf{d}}_{n+1} \simeq (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ .

La generació de la trajectòria continua simplement repetint aquests passos. El procés s'acaba quan la partícula abandona el sistema material o bé quan la seva energia es fa més petita que un cert valor  $E_{\text{abs}}$  i es pot considerar (sense que això distorsioni els resultats) que ha estat absorbida en el medi.

La simulació de les interaccions individuals partint de seccions eficaces realistes determina quan es generen partícules secundàries (amb energia més gran que  $E_{\text{abs}}$ ). La generació de l'allau acaba quan es completa la simulació de totes les partícules secundàries generades per una partícula primària.

Evidentment, el mètode és aplicable a geometries complexes amb diferents medis materials; tot el que cal fer és controlar en quin medi es troba la partícula. Quan

la partícula canvia de medi, la trajectòria s'atura immediatament després d'entrar en el nou material i la simulació es desenvolupa com abans, però utilitzant les seccions eficaces del nou medi i començant una altra vegada pel pas 1.

Durant el procés de simulació de les allaus les quantitats d'interès s'emmagatzemen en comptadors a la memòria de l'ordinador. Per exemple, per calcular l'energia mitjana per allau  $Q$  dipositada en un cert volum, l'única cosa que cal fer és comptabilitzar l'energia total dipositada  $q_i$  per totes les partícules de l'allau  $i$ -èsima. El valor resultant després de simular  $N$  allaus és

$$\bar{Q} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i. \quad (13)$$

Cal tenir en compte que el resultat  $\bar{Q}$  està afectat per una incertesa d'origen estadístic. La desviació estàndard de la mostra simulada ve donada per l'expressió

$$\sigma_Q = \sqrt{\frac{1}{N} \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i^2 - \bar{Q}^2 \right]}, \quad (14)$$

que es pot avaluar simplement acumulant la suma de quadrats de les contribucions  $q_i$  de les allaus particulars. Si el nombre  $N$  d'allaus simulades és prou gran, l'interval  $\bar{Q} \pm 2\sigma_Q$  conté el valor real  $Q$  amb una probabilitat del 95,4%. En tota simulació és important avaluar la incertesa estadística de cada quantitat calculada, ja que d'aquesta manera es pot determinar si un resultat és significatiu o no.

## Les interaccions d'electrons i fotons amb matèria

La física de la simulació Montecarlo està continguda en el conjunt de seccions eficaces diferencials dels processos d'interacció que ara esmentarem, i que per a l'interval d'energia que ens ocupa (entre 1 keV i 1 GeV) es coneixen per a tots els elements amb una incertesa de l'ordre d'unes poques unitats per cent. Actualment, la recerca en aquest camp se centra en el desenvolupament de mètodes de càlcul més i més precisos, encaminats a reduir aquesta incertesa.

Les interaccions més importants dels fotons amb la matèria són les següents:

- **Dispersió coherent (difusió de Rayleigh):** l'àtom absorbeix el fotó incident, i reemet en una altra direcció un fotó d'igual energia. No s'altera l'estat intern de l'àtom.
- **Dispersió incoherent (efecte Compton):** el fotó incident és absorbit i s'emet un segon fotó amb menor energia,  $E - W$ , juntament amb un electró atòmic amb energia cinètica  $W - U_i$ , on  $U_i$  representa l'energia d'ionització de la capa de la qual

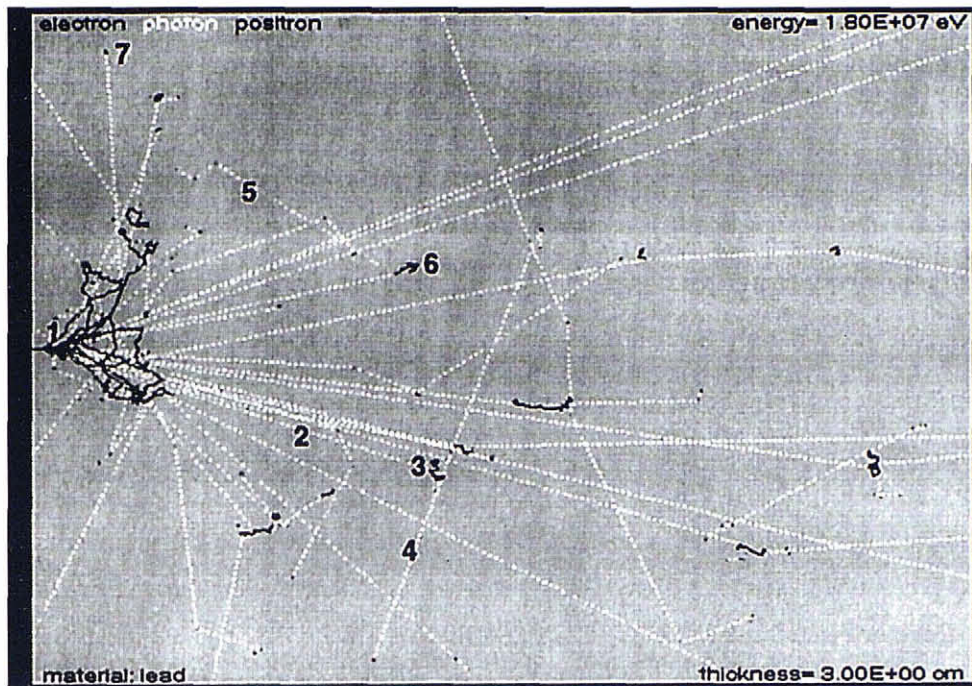


Figura 2: Trajectòries d'electrons, positrons i fotons produïdes per 10 allaus d'electrons de 18 MeV que incideixen perpendicularment sobre 3 cm de plom. Els electrons i positrons es representen mitjançant línies contínues, i els fotons, amb línies trencades. Alguns exemples són: 1) electró primari, 2) fotó de bremsstrahlung, 3) creació d'un parell electró-positró, 4) fotó provinent de l'anihilació d'un positró, 5) fotó que ha patit una dispersió Compton, 6) electró atòmic emès durant una interacció Compton, 7) electró atòmic resultant d'una absorció fotoelèctrica

procedeix l'electró. L'àtom ionitzat es desexcita per emissió de raigs X i/o electrons d'Auger.

- **Absorció fotoelèctrica:** el fotó incident és absorbit i s'emet un electró atòmic amb energia  $E - U_i$ . L'àtom ionitzat es desexcita per emissió de raigs X i/o electrons d'Auger.
- **Creació de parells electró-positró:** un fotó amb energia  $E$  és absorbit i genera un electró i un positró. El procés és possible només per a fotons amb energia més gran que la suma d'energies en repòs de les dues partícules ( $2mc^2 = 1.022$  MeV). La suma de les energies cinètiques de les dues partícules és igual a  $E - 2mc^2$ .

Cadascuna de les interaccions esmentades domina per a un cert interval d'energies. L'efecte fotoelèctric és el dominant per sota d'aproximadament 100 keV. Per a energies intermèdies, de l'ordre del MeV, el procés més probable és la dispersió Compton. Finalment, per damunt de desenes de MeV la interacció predominant és la producció de parells. La dispersió Rayleigh només es presenta a baixa energia i té un paper poc significatiu. Altres possibles interaccions, com per exemple la fotoabsorció nuclear, són poc probables i tenen un efecte menyspreable en el procés de transport dels fotons.

Els electrons i positrons interaccionen amb la matèria mitjançant els següents processos:

- **Dispersió elàstica:** la partícula es desvia en interaccionar electrostàticament amb l'àtom fitó sense canviar la seva energia cinètica. L'àtom tampoc no altera el seu estat intern.
- **Col·lisió inelàstica:** la partícula es desvia i perd una energia  $W$  que es transfereix a l'àtom globalment (excitació) o a un electró atòmic (ionització), que és emès amb energia cinètica  $W - U_i$ . La ionització d'una capa atòmica interna origina l'emissió de raigs X i/o electrons d'Auger. En el cas de materials conductors, l'excitació de plasmons constitueix un procés important de pèrdua d'energia.
- **Emissió de bremsstrahlung:** les partícules carregades, en penetrar els àtoms del material, són accelerades i emeten fotons de bremsstrahlung (radiació de frenada). Amb l'emissió d'un fotó d'energia  $W$ , l'energia de la partícula decreix en la mateixa quantitat,  $E_{n+1} = E_n - W$ .
- **Anihilació del positró:** un positró d'energia  $E$  en un medi material és molt inestable, i és possible la seva anihilació amb un electró per donar normalment dos fotons d'energia total  $E + 2mc^2$ . La

probabilitat d'anihilació és petita per a positrons ràpids i creix en decreixent l'energia. Tot i ser inestables, abans d'anihilar-se els positrons recorren distàncies del mateix ordre que les dels electrons.

Les pèrdues d'energia d'electrons i positrons de baixa energia són degudes principalment a les col·lisions inelàstiques. En augmentar l'energia, augmenta l'efecte de l'emissió de bremsstrahlung, que esdevé el mecanisme dominant de frenada a alta energia. Les probabilitats de les interaccions elàstiques i inelàstiques són similars, de manera que al final d'una trajectòria el nombre de col·lisions d'aquests dos tipus és del mateix ordre de magnitud.

### Simulació detallada, condensada i mixta

La simulació del transport de fotons és relativament senzilla, ja que la mitjana d'interaccions al llarg de cada trajectòria és força petita. De fet, tota l'energia del fotó es transfereix a les partícules secundàries i al medi mitjançant una única interacció fotoelèctrica o de creació de parells, o després d'unes poques col·lisions Compton. Per tant, podem simular una a una totes les interaccions de fotons (simulació *detallada*).

En canvi, la simulació d'electrons i positrons d'alta energia és molt més complicada. La raó principal és que la pèrdua mitjana d'energia en cada col·lisió és d'unes poques desenes d'eV i, per tant, un electró o un positró pateix un gran nombre de col·lisions abans de ser absorbit en el medi. La pràctica habitual és utilitzar l'anomenada simulació *condensada*, que consisteix a utilitzar teories de dispersió múltiple (solucions aproximades de l'equació de Boltzmann) per descriure l'efecte global de pèrdua d'energia i canvi de direcció en les col·lisions al llarg d'un segment de trajectòria de longitud molt més gran que el recorregut lliure mitjà.

Un procediment alternatiu, més acurat, és separar les col·lisions en *toves* (aquelles que només donen lloc a petites pèrdues d'energia i petites deflexions angulars) i *dures*. Escollint adequadament els valors l·lindars  $W_c$  i  $\theta_c$  que separen les col·lisions toves de les dures, la probabilitat d'aquestes últimes es pot fer suficientment petita, cosa que fa viable la seva simulació detallada. L'efecte de les col·lisions toves que tenen lloc entre cada parell d'interaccions dures es pot calcular mitjançant simulació condensada. Aquest tipus d'algorisme mixt és pràcticament exacte i permet reduir considerablement el temps de simulació. El programa PENELOPE utilitza un algorisme mixt dinàmic en el qual els l·lindars  $W_c$  i  $\theta_c$  es determinen automàticament de manera que la simulació sigui tan ràpida com es pugui, tot i mantenint l'exactitud dels resultats.

### Aplicacions i resultats

La visualització de les allaus produïdes per partícules de diferents energies en diferents materials té interès pe-

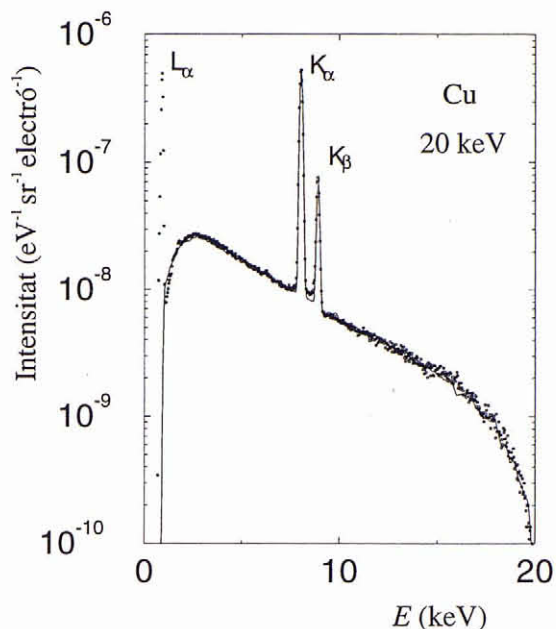


Figura 3: Intensitat de raigs X generada per electrons de 20 keV que incideixen perpendicularment sobre una mostra de coure. Els punts corresponen a valors mesurats amb una microsonda electrònica, i la corba és el resultat d'una simulació. Superposats al fons de fotons de bremsstrahlung apareixen els pics característics de raigs X  $K_\alpha$ ,  $K_\beta$  i  $L_\alpha$  del coure (PENELOPE només simula radiació X provinent d'ionitzacions a la capa K)

dagògic. La figura 2 mostra 10 allaus generades per electrons de 18 MeV que incideixen perpendicularment sobre una làmina de plom de 3 cm de gruix. El que es representa és la projecció de les trajectòries sobre un pla perpendicular a la mostra que conté la direcció d'incidència. Aquestes allaus, igual que la resta dels resultats que mostrarem després, han estat simulades amb PENELOPE. La visualització de trajectòries en diferents casos dona una bona idea de com varien les característiques del transport de radiació amb l'energia i la composició del medi.

La primera aplicació pràctica que considerem fa referència a la microanàlisi electrònica. Aquesta tècnica permet d'analitzar petites regions de material (de l'ordre d'uns pocs micròmetres) detectant la radiació X generada en bombardejar la mostra amb un feix d'electrons focalitzat. L'instrument és essencialment un microscopi electrònic de rastreig dotat d'un detector de fotons amb bona resolució energètica. Les energies dels raigs X detectats indiquen quins són els elements presents a la mostra. Amb la simulació Montecarlo podem determinar quin és el volum analitzat en funció de l'energia dels electrons incidents. A més a més, és possible generar l'espectre d'energia dels fotons detectats. A la figura 3 comparem un espectre mesurat amb el resultat de la simulació per a una mostra de coure bombardejada amb

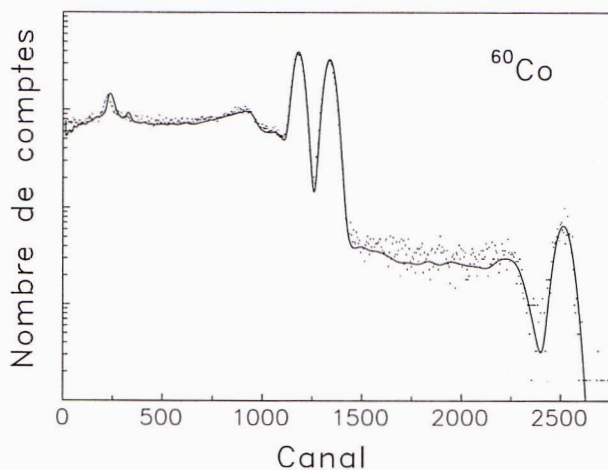


Figura 4: Espectre (en unitats arbitràries) d'una font de  $^{60}\text{Co}$ . El resultat d'una mesura amb un detector d'escintil·lació de NaI(Tl) cilíndric de 3x3 polzades s'indica amb punts. La corba contínua correspon a la simulació del mateix muntatge experimental

electrons de 20 keV que incideixen perpendicularment sobre la superfície. L'acord entre ambdós espectres és molt bo, especialment si tenim en compte que aquests no han estat renormalitzats. La simulació es pot utilitzar també per a l'anàlisi quantitativa de mostres de composició desconeguda: una vegada identificats els elements de la mostra a partir de les línies de l'espectre experimental, les seves concentracions relatives es poden determinar realitzant una sèrie de simulacions variant les concentracions fins a reproduir les intensitats relatives de les línies de l'espectre.

Una de les aplicacions més importants del mètode de Montecarlo és la caracterització de la resposta de detectors de radiació i el càlcul de les seves eficiències. A la figura 4 es mostra l'espectre d'una font de  $^{60}\text{Co}$  mesurat amb un típic detector d'escintil·lació de NaI(Tl) cilíndric de 3x3 polzades. Els nuclis de  $^{60}\text{Co}$  emeten dos fotons en cascada (en direccions molt poc correlacionades) amb energies de 1,17 i 1,33 MeV. Els detalls de l'espectre depenen de l'estructura i geometria del sistema detector (dimensions del cristall de NaI, gruix i composició de la carcassa protectora, geometria del tub fotomultiplicador, etc.) i de la posició i geometria de la font radioactiva. L'espectre simulat es va generar amb la geometria especificada pel fabricant, i està en bon acord amb les dades experimentals. Aquest tipus de simulació s'utilitza per al càlcul d'eficiències absolutes de detectors de diverses formes i dimensions i per optimitzar-ne el seu disseny.

La simulació Montecarlo té una gran utilitat en el camp de la física mèdica de radiacions (Jenkins et al., 1988; Andreo, 1991). El coneixement de la distribució

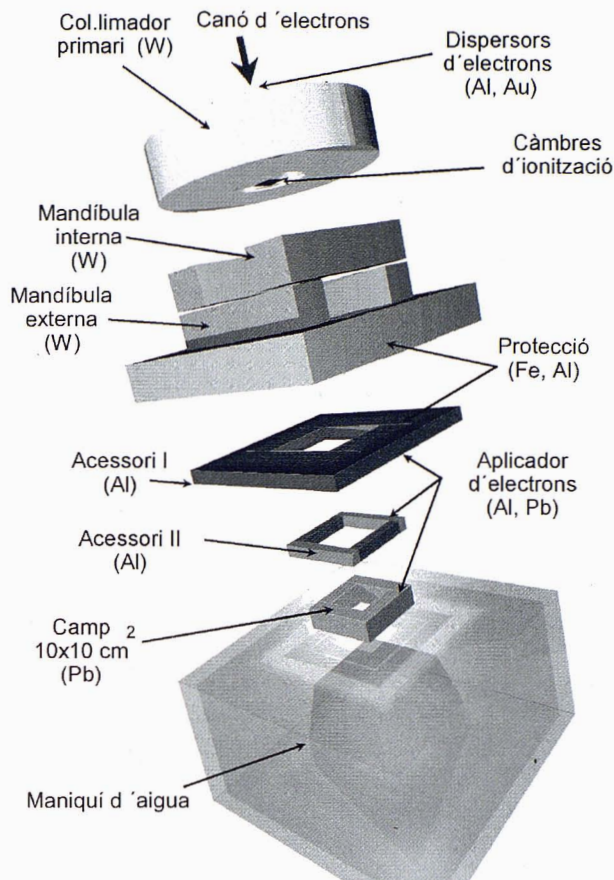


Figura 5: Geometria modular del capçal d'un accelerador lineal Siemens Mevatron KDS

de dosi (energia dipositada per unitat de massa) administrada a un pacient, tant mitjançant fonts radioactives (braquiteràpia) com a partir de generadors de radiacions (fonts de raigs X, acceleradors lineals de fotons i electrons, etc.) és de gran importància terapèutica per predir els efectes tardans de la radiació, així com per millorar els tractaments d'oncologia radioteràpica. Dins d'aquesta línia d'investigació, la simulació més complexa que hem realitzat fins ara és la del capçal d'un accelerador lineal Siemens Mevatron KDS, utilitzat en tractaments de radioteràpia oncològica per a la destrucció de tumors malignes. La geometria es mostra esquemàticament a la figura 5. El capçal consisteix en un canó d'electrons (secció acceleradora), un collimador primari cilíndric de tungstè, cambres d'ionització d'electrons, les mandíbules mòbils interna i externa, una carcassa de protecció d'acer, l'aplicador d'electrons (que delimita un camp quadrat de  $10 \times 10 \text{ cm}^2$ ) i, finalment, el maniquí d'aigua (situat a una distància de 100 cm del focus d'electrons) on es mesuren la dosi i tots els altres paràmetres d'interès. L'energia inicial dels electrons a la sortida de l'etapa d'acceleració es pot seleccionar d'entre una sèrie de valors nominals (6, 8, 10, 12, 15 i 18 MeV), però el valor real pot ser lleugerament diferent

i s'ha de de determinar, empíricament o amb simulació

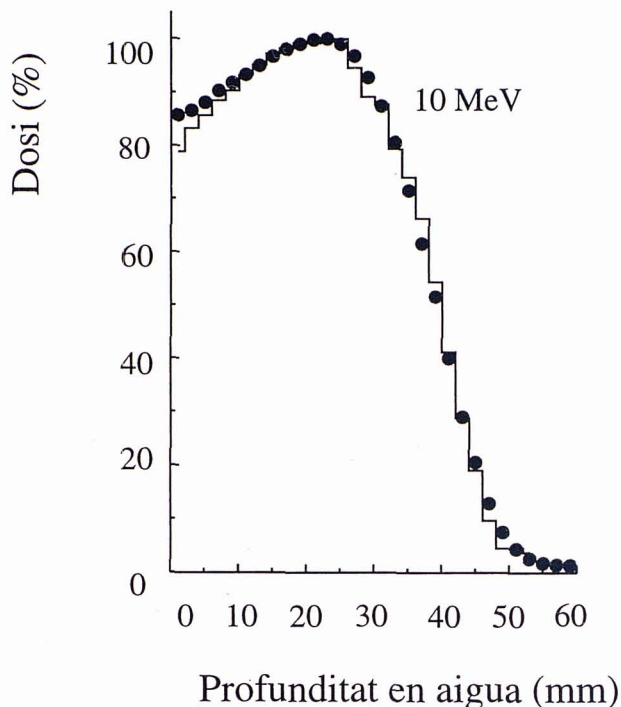


Figura 6: Dosi (normalitzada a 100) a l'eix central dipositada en aigua per a un feix d'electrons amb energia nominal de 10 MeV. El resultat de la simulació es representa en forma d'histograma, mentre que els punts indiquen dades experimentals

Montecarlo, a partir de la dosi a l'eix central definit pel feix incident. Els electrons primaris interaccionen amb les diferents components del capçal, alterant la distribució energètica inicial del feix que, a la vegada, es contamina amb fotons secundaris generats per bremsstrahlung. La determinació de la composició i l'espectre del feix de radiació que acaba incidint sobre el pacient és un dels aspectes essencials en l'avaluació de la distribució espacial de la dosi. Per a una energia nominal d'electrons de 10 MeV, la figura 6 compara la dosi a l'eix central (normalitzada a 100) simulada amb la mesurada experimentalment, i a la figura 7 es mostren les característiques del mateix feix de radiació (electrons i fotons) a la superfície del maniquí d'aigua. La simulació d'aquests resultats va trigar dues setmanes en un ordinador personal amb processador Pentium a 100 MHz.

Finalment, a la figura 8 presentem distribucions radials de dosi, a diferents fondàries, dipositades en aigua per a un feix d'electrons d'1 GeV que incideix perpendicularment sobre la superfície. Es comparen els resultats de PENELOPE amb els d'ETRAN i EGS4 (Jenkins et

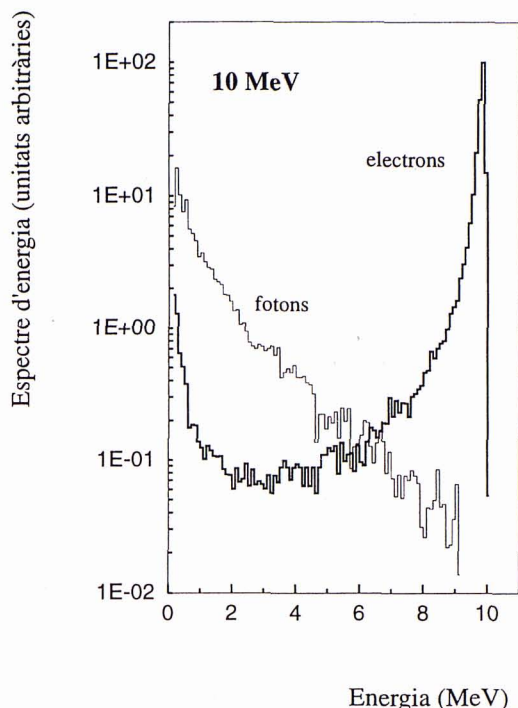


Figura 7: Distribució d'energia (en unitats arbitràries) d'electrons i fotons a la superfície del maniquí d'aigua per a un feix d'electrons amb energia nominal de 10 MeV

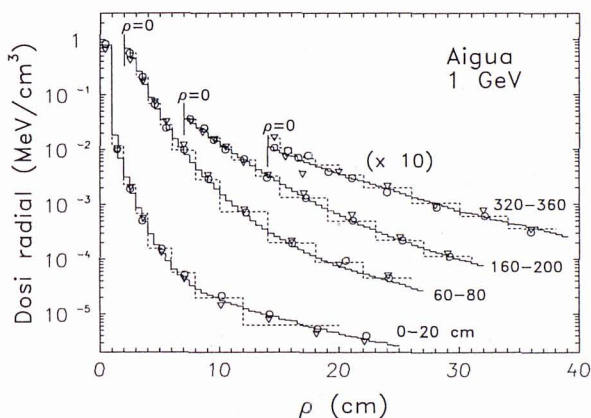


Figura 8: Distribucions radials de dosi per a un feix d'electrons d'1 GeV que incideix perpendicularment en aigua.  $\rho$  és la distància radial al feix. Els histogrames de traça contínua són resultats de PENELOPE. Els valors d'ETRAN i EGS4 (Jenkins et al., 1988) s'indiquen amb triangles i cercles, respectivament. Els histogrames de traça discontinua representen dades de l'experiment de Crannell et al., citat a (Jenkins et al., 1988). Cada corba dona la dosi radial amitjanada sobre l'interval de profunditat indicat. Noteu que l'escala radial de les capes profundes ha estat desplaçada



al., 1988). Tal com es veu, els tres programes donen valors similars i en bon acord amb mesures experimentals, cosa que confirma la validesa de les simulacions a molt alta energia.

## Bibliografia

- ANDREO, P., Monte Carlo techniques in medical radiation physics, *Phys. Med. Biol.*, **36**, 861-920 (1991).  
JENKINS, T. M., NELSON, W. R. i RINDI, A., (editors), *Monte Carlo Transport of Electrons and Photons*, Plenum (Nova York, 1988).  
KALOS, M. H. i WHITLOCK, P. A., *Monte Carlo Methods vol. 1*, Wiley (Nova York, 1986).

## Agraïments

Aquest treball ha estat parcialment finançat per DGICYT (projecte PB92-0801), FISs (projecte 94/0029-01) i CIRIT. Agraïm a X. Llovet que ens hagi proporcionat les dades experimentals i de simulació de la figura 3.

---

# Revista de física

**La Revista de Física**  
és una publicació  
de la Societat Catalana de Física.

El seu antecedent immediat  
són els Treballs de Física,  
sèrie iniciada al 1979,  
primera revista especialitzada en Física  
publicada a Catalunya,

**La Societat Catalana de Física**  
és una filial de l'Institut d'Estudis Catalans  
creada el 1986 a partir de la Secció de Física  
de l'antiga Societat Catalana de Ciències  
la qual, al seu torn, havia estat fundada l'any 1931.

La Societat Catalana de Física és, doncs,  
una entitat jove  
que té les seves arrels en la  
tradició més genuïna  
de la recerca en Física  
a Catalunya.

