

# Capítulo 6 .

## Metodología y Conclusiones.

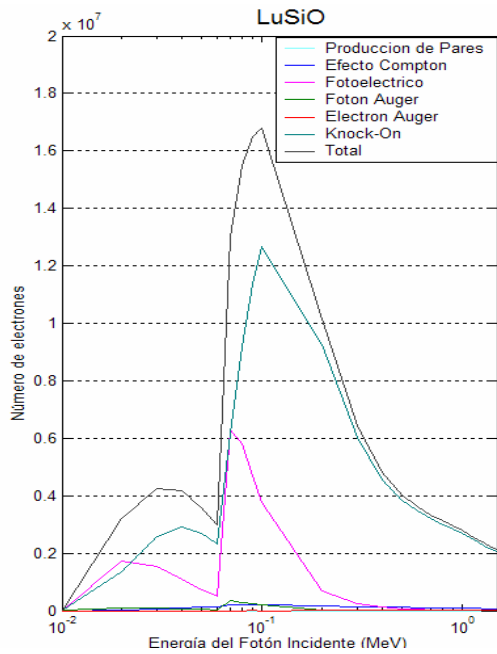
### 6.1 Caracterización de Materiales Detectores.

Se realizaron simulaciones en MCNP de distintos materiales centelladores para estudiar sus características durante la primera etapa de detección de rayos gamma. Se busca comparar los resultados obtenidos con cristales que se utilizan actualmente con los resultados de materiales propuestos. La geometría utilizada consiste en un cascarón esférico hueco de 2 mm de ancho (Radio interno: 7.49 cm) formado por el cristal centellador (se especifica la composición química y la densidad de dicho material). En el centro del cascarón se localiza una fuente puntual isotrópica monoenergética que emite 10 000 000 fotones con energías dentro del rango de 0.01 MeV a 1.5 MeV. La variable de salida que se estudia principalmente es el número total de electrones producidos durante la detección, y la interacción por medio de la cuál son creados. Además se analizaron otras variables que se especificarán más adelante.

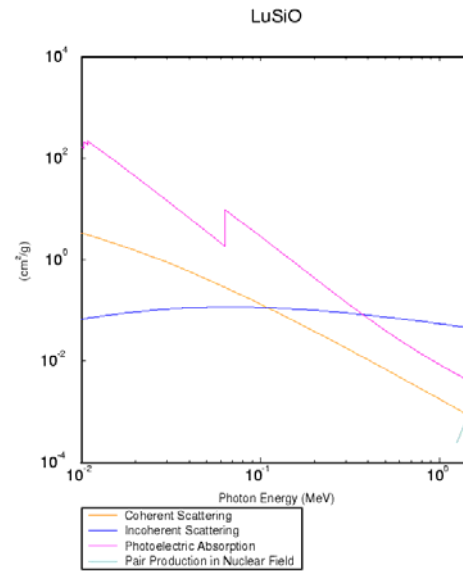
#### 6.1.1. *Análisis de Datos por Tipo de Material.*

En la Figura 6.1.a. se puede observar la producción de electrones del LuSiO para cada tipo de interacción. En la Figura 6.1.b. se grafica la sección eficaz para el mismo material. La discontinuidad de la curva de la sección eficaz del efecto fotoeléctrico se debe a la estructura en capas de los electrones en los átomos. Esta misma discontinuidad se ve reflejada en el número de electrones producidos por el efecto fotoeléctrico. La gráfica de secciones eficaces de la interacción Compton y producción de pares no tiene discontinuidades; lo mismo se puede apreciar en la curva de electrones producidos por

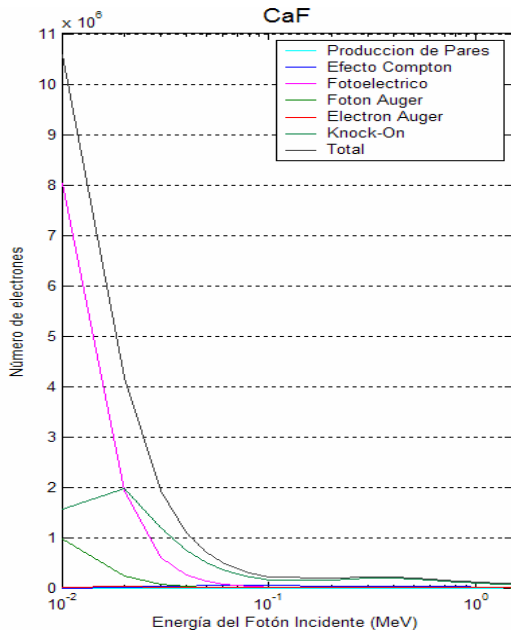
efecto Compton y producción de pares respectivamente. En la Figura 6.1.c. y d se pueden observar la misma relación entre la sección eficaz y la producción de electrones para el CaF.



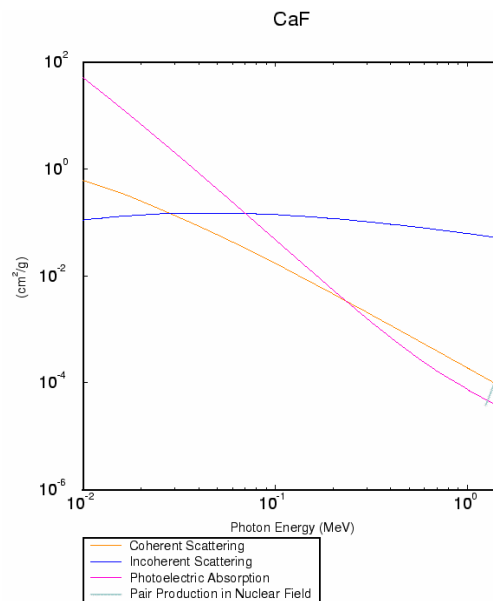
a.



b.



c.



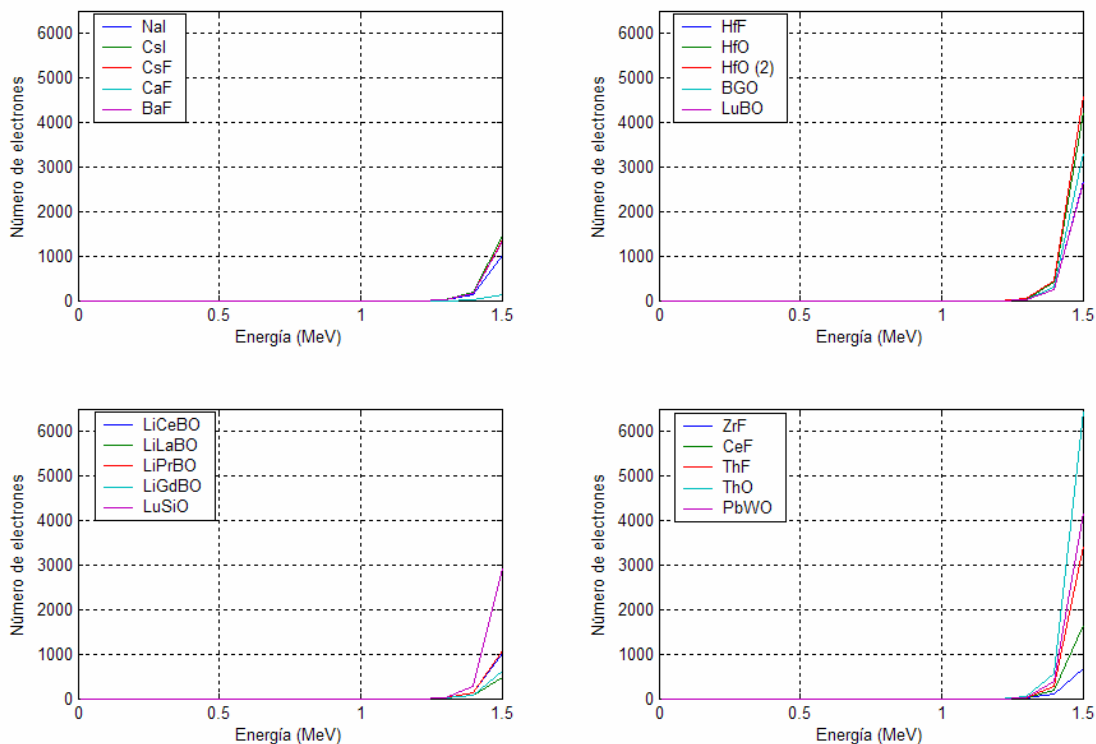
d.

**Figura 6.1.** Comparación de la producción de electrones debido a cada tipo de interacción (a) (c) y la curva de las secciones eficaces (b) (d)[22] para el LuSiO y CaF.

### 6.1.1. Análisis de Datos por Tipo de Interacción.

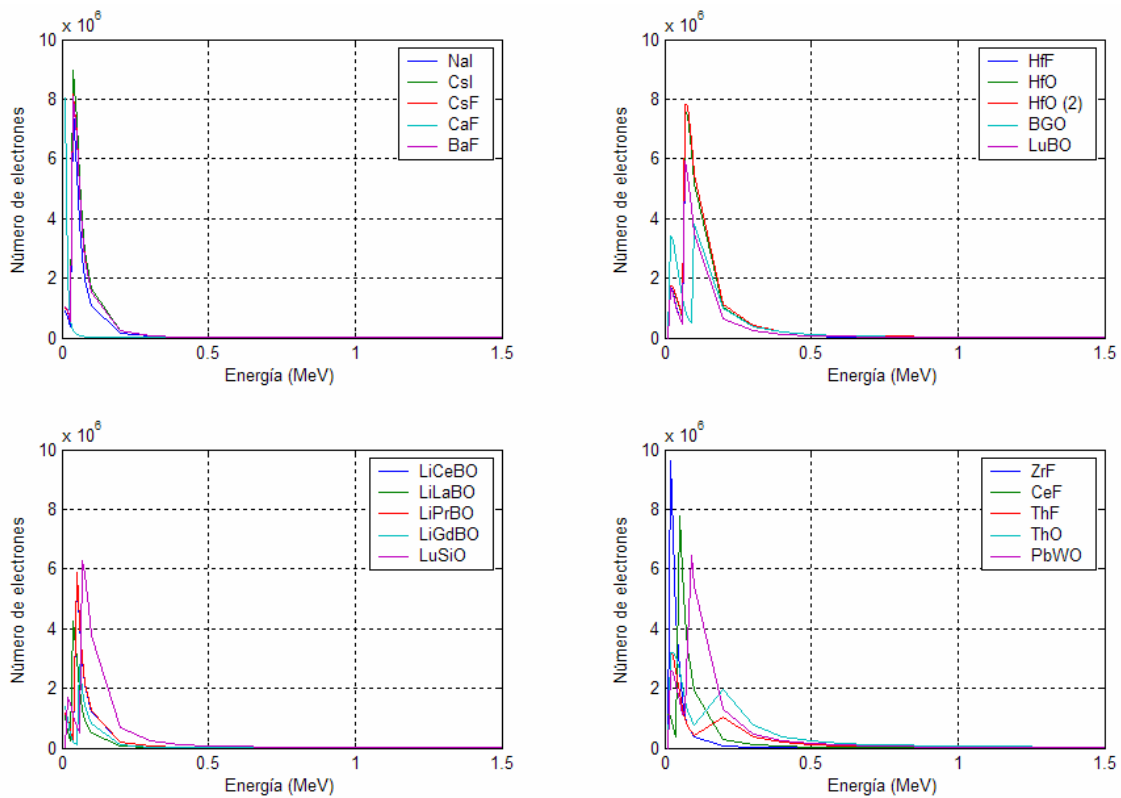
Coincidiendo con la teoría, en la Figura 6.2 se puede observar que no se crean electrones a partir del efecto de producción de pares si la energía del fotón incidente es menor a 1.2 MeV. Se verifica que además de los 1.022 MeV necesarios para que se materialicen las partículas, es necesario una fracción extra de energía para que el electrón y positrón creados posean energía cinética. Para energías mayores a 1.2 MeV la producción de electrones por este efecto no es muy significativa comparada con la producción total de electrones, como se verá más adelante. Además en las gráficas del efecto de producción de pares no se observan discontinuidades como en otras curvas; ya que en esta interacción sólo interviene el núcleo (su campo magnético) y no las capas del átomo.

El cuadrado del número atómico no es el único parámetro que determina la sección eficaz del efecto de producción de pares; por ejemplo, el material PbWO tiene un menor número atómico y sin embargo una mayor producción de pares que el material ThF.



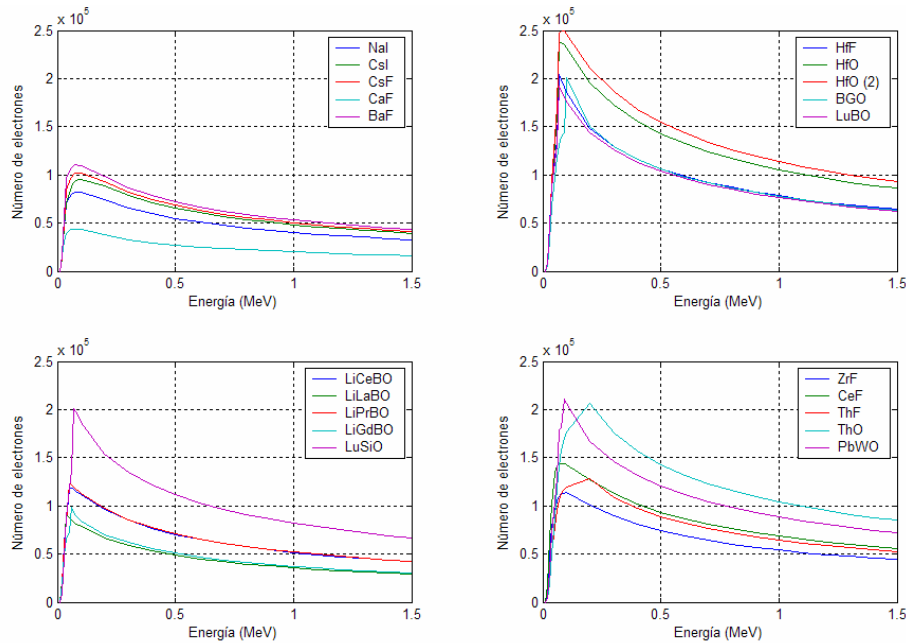
**Figura 6.2.** Producción de Electrones por Efecto de Producción de Pares vs. Energía del Fotón Incidente.

La producción de electrones por medio del efecto fotoeléctrico solamente es relevante a energías menores a 0.25 MeV, como lo indica la Figura 6.3. Las curvas para este tipo de interacción muestran uno o varios máximos alrededor del rango (0.1, 0.2) MeV debido a la estructura de capas del átomo. Para energías mayores, la producción de electrones va disminuyendo y llega a ser casi nula. La mayor probabilidad de efecto fotoeléctrico se presenta en el material ZrF.



**Figura 6.3.** Producción de Electrones por Efecto Fotoeléctrico vs. Energía del Fotón Incidente.

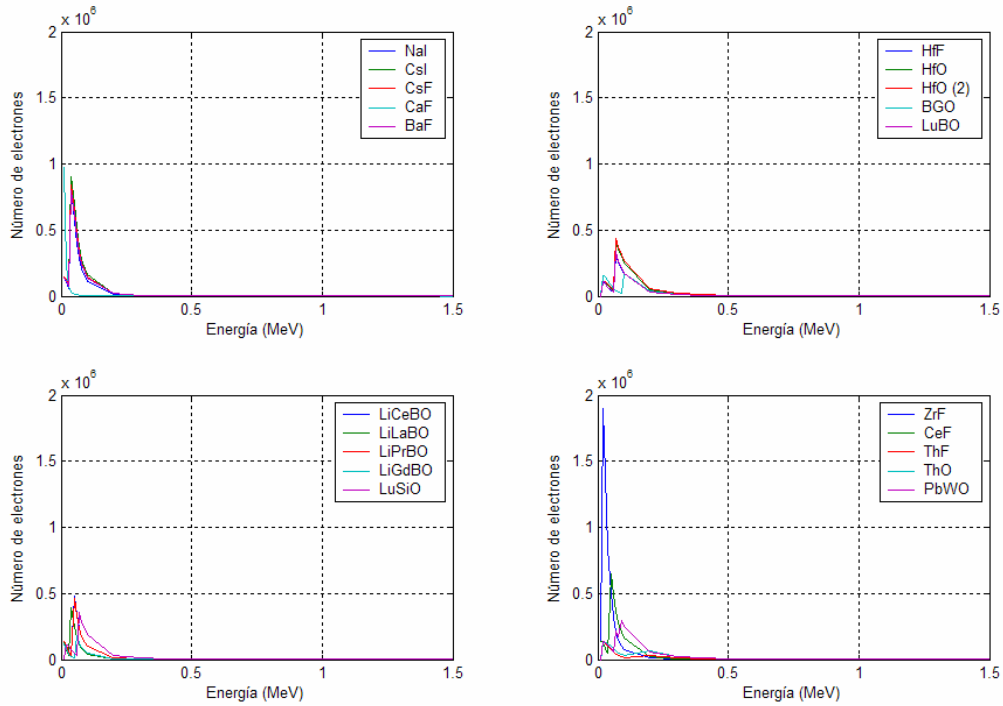
La probabilidad del efecto Compton es mayor para energías menores a 0.25 MeV, como se muestra en la Figura 6.4. Sin embargo, la producción de electrones por medio del efecto Compton es aproximadamente diez veces menor comparada con el número de electrones creados por el efecto fotoeléctrico para ese rango de energía (Ver Figura 6.3). La curva el efecto Compton llega a un máximo y luego desciende suavemente; es decir, el máximo que presenta no es tan sobresaliente como en el efecto fotoeléctrico.



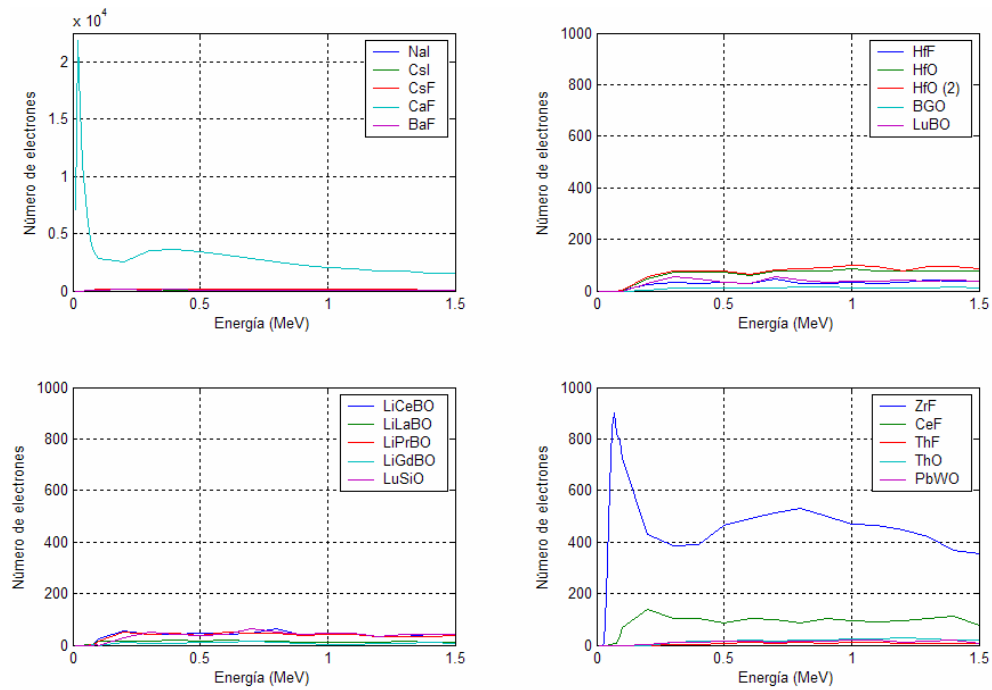
**Figura 6.4.** Producción de Electrones por Efecto Compton vs. Energía del Fotón Incidente.

Los fotones Auger por su naturaleza tienen muy baja energía ( $E < 1$  KeV), por lo que es poco probable que logren desprender a un electrón de su órbita. Sin embargo, se observa en la Figura 6.5, que para materiales como lo es el ZrF, existe una producción de electrones importante debido a los fotones Auger. Los fotones gamma incidentes de mayor energía tienen más probabilidad de realizar otros efectos antes de sufrir una interacción por fotones Auger.

La producción de electrones por medio de electrón Auger es muy pequeña, para la mayoría de los cristales no supera los 100 electrones, excepto para el CaF y el ZrF. El primer máximo que se observa en la curva de estos dos materiales coincide con el máximo de la curva del efecto fotoeléctrico (Ver Figura 6.3); esto sugiere que después de un efecto fotoeléctrico es muy probable que le suceda un electrón Auger. Para energías mayores se puede observar que la producción de electrones para el CaF y el ZrF disminuye y nuevamente vuelve a aumentar, exhibiendo un máximo local menos pronunciado. Este segundo máximo posiblemente se debe a la suma de probabilidades de otros efectos (Compton y Knock-on) que pueden ionizar al átomo previo a la emisión de un electrón Auger. Sin embargo la creación de electrones Auger en cualquier otro compuesto es casi uniforme para todo el rango estudiado.



**Figura 6.5.** Producción de Electrones a partir de Fotones Auger como función de la Energía del Fotón Incidente.

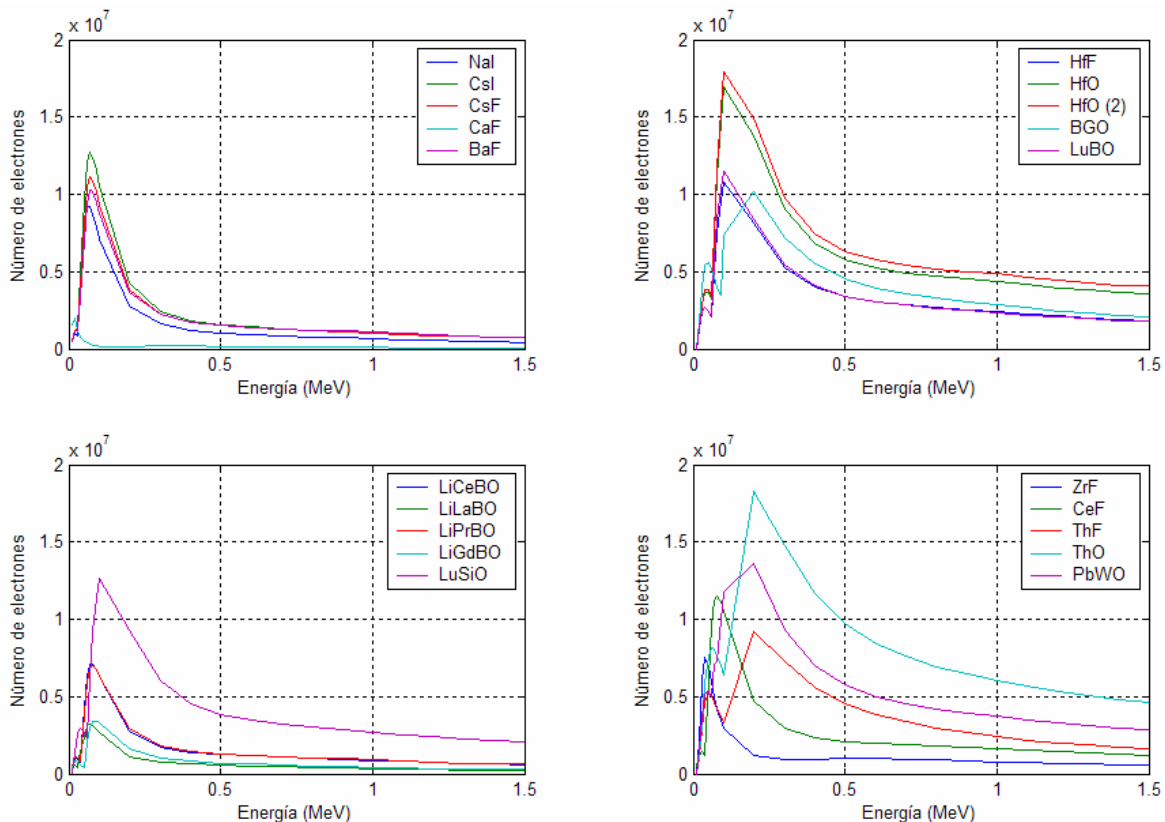


\*\*La escala de la primera gráfica es diferente a las demás para tener mejor visualización.

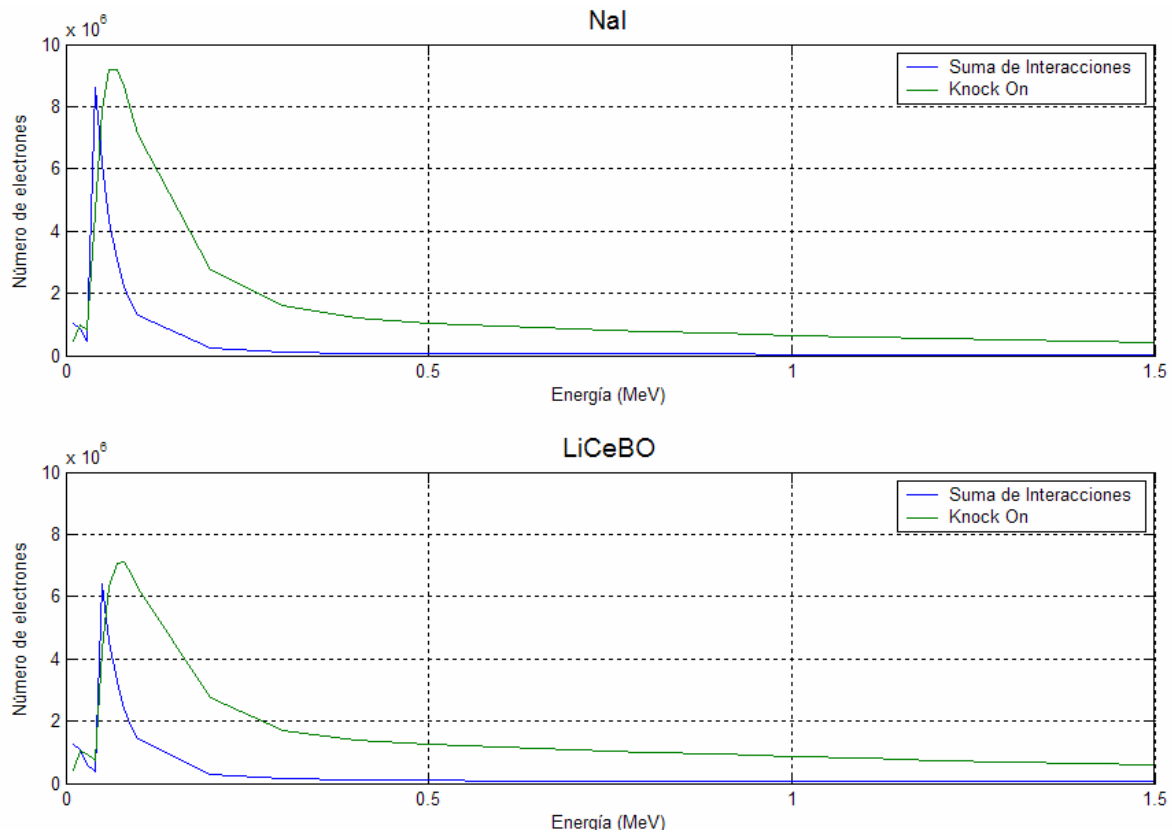
**Figura 6.6.** Producción de Electrones a partir de Electrones Auger vs. Energía del Fotón Incidente.

Se distingue en la Figura 6.7 que el mayor número de electrones producidos se deben al efecto de Knock-on. Las gráficas presentan un máximo significativo y algunos elementos tienen también varios máximos locales para energías menores a 0.5 MeV, de manera muy similar a las curvas del efecto fotoeléctrico.

Los electrones Knock-on se podrían considerar como un efecto secundario desencadenado por todos los electrones liberados por interacciones anteriores. Podemos observar en la Figura 6.8 que la curva de la producción de electrones Knock-on del NaI y el LiCeBO, tiene una forma similar a la curva de la suma de todas las demás interacciones, incluso presenta la misma discontinuidad que presenta la gráfica del efecto fotoeléctrico.



**Figura 6.7.** Producción de Electrones por Knock-on como función de la Energía del Fotón Incidente.

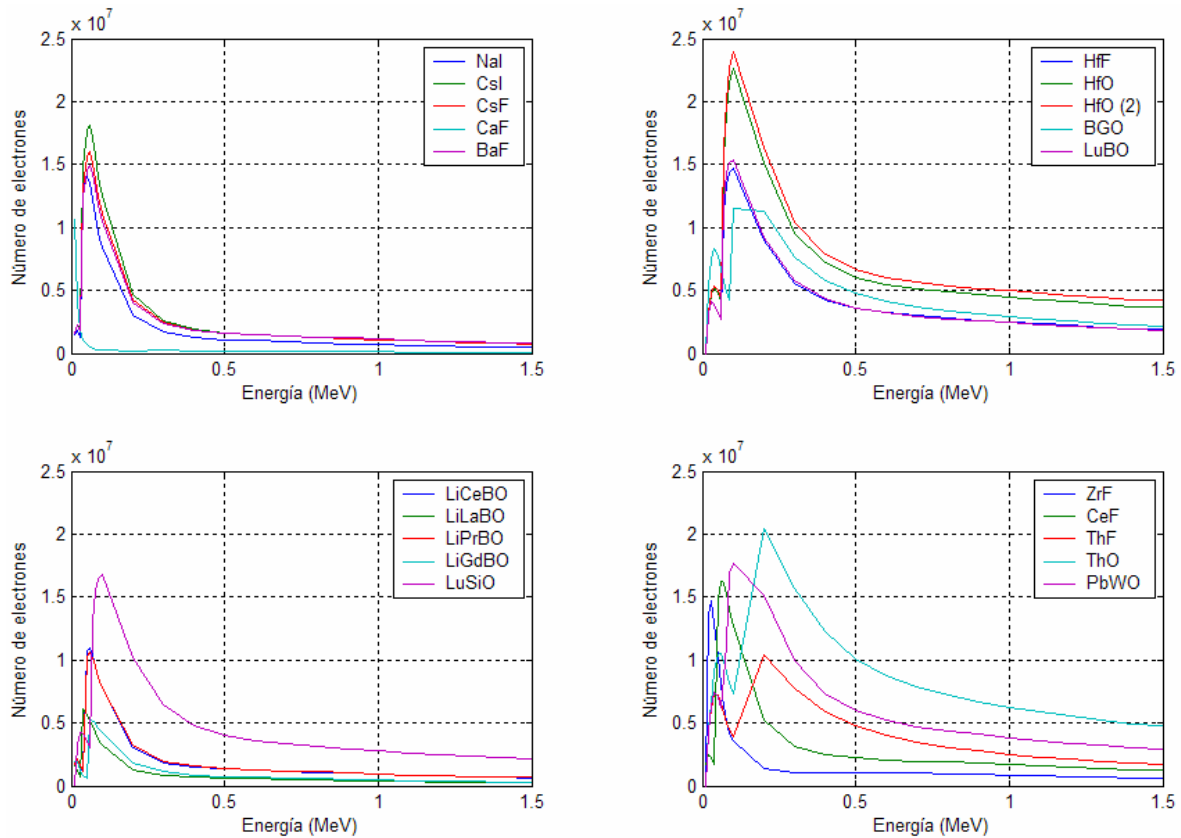


**Figura 6.8.** Producción de Electrones vs. Energía del Fotón Incidente para el NaI y el LiCeBO.

Se puede observar en la Figura 6.9 que la producción total de electrones no es muy diferente a la producción de electrones debido solamente al efecto Knock-on (Figura 6.7). Además, la discontinuidad que presenta la gráfica de las secciones eficaces para el efecto fotoeléctrico se ve reflejada también en una discontinuidad en la curva de producción de electrones totales.

Si se toma como parámetro la producción total de electrones para determinar cual cristal es mejor detector de rayos gamma en lo que se refiere a la primera etapa de detección, concluiríamos que el ThO y el HfO son los mejores materiales para el rango de energía estudiado. Los materiales boratos de varias tierras raras propuestos en este trabajo no representan entonces una mejor detección de fotones gamma en la primera etapa. Para energía de 0.511 MeV utilizado en PET, el LuBO es el material propuesto que más electrones presenta; por el contrario el LiLaBO es el cristal con menor producción de electrones.

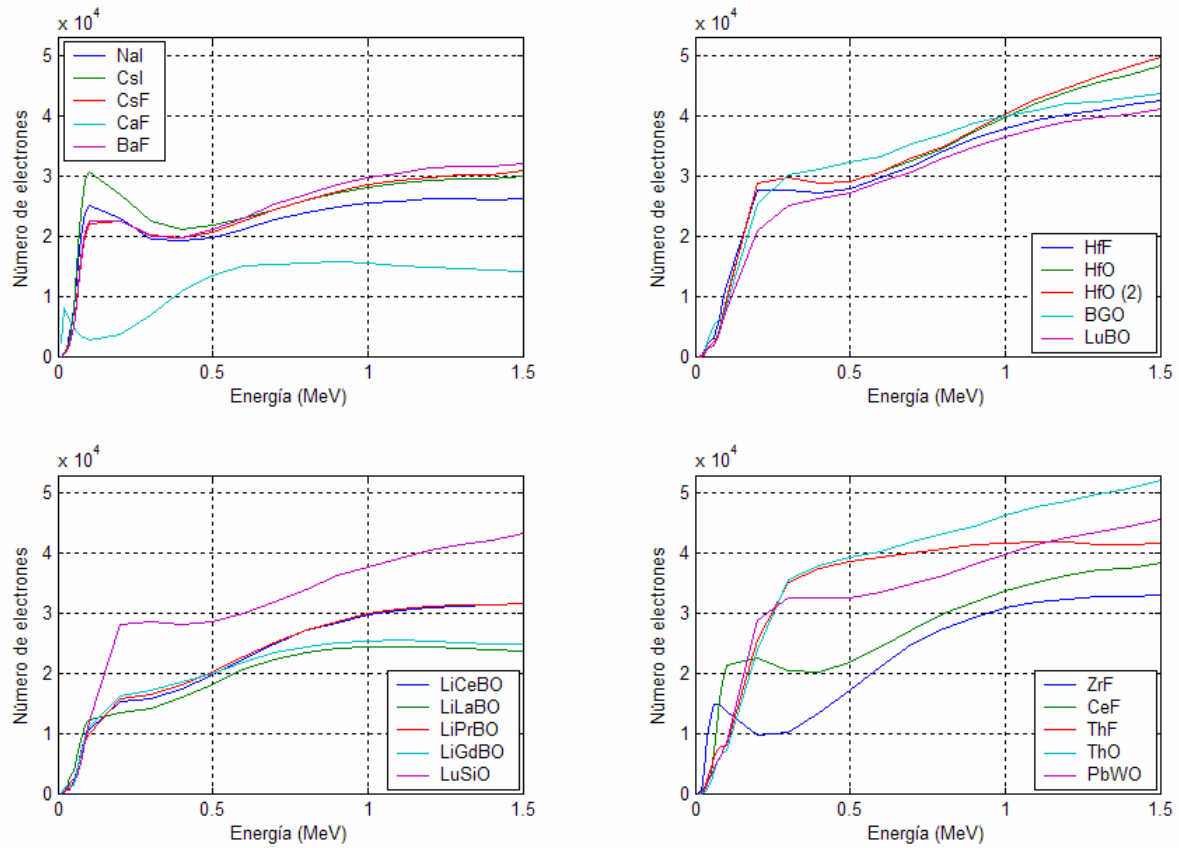




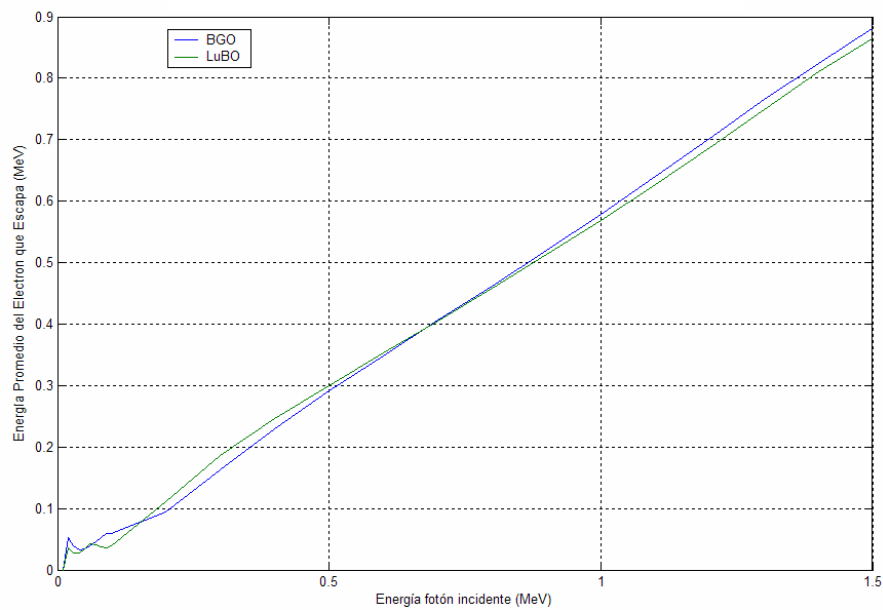
**Figura 6.9.** Producción Total de Electrones como función de la Energía del Fotón Incidente.

No hay regularidad en las curvas de los electrones que escapan dado a que el proceso involucra todas las interacciones explicadas anteriormente. Sin embargo, se deduce de la Figura 6.10 que mientras mayor es la energía del fotón incidente, más son los electrones producidos que logran escapar de la superficie. Esto se debe a que los electrones producidos tienen en promedio más energía para lograr atravesar la superficie del cristal, como se puede ver en las simulaciones de MCNP. Un ejemplo de esto se puede estudiar en la Figura 6.11 que representa la energía media de los electrones que logran escapar por fotón gamma incidente para el BGO y el LuBO.

La mayor parte de los electrones producidos durante un proceso de detección son capturados dentro del material centellador; en MCNP equivale a terminar el cálculo de la trayectoria del electrón ya que su energía es muy pequeña.



**Figura 6.10.** Electrones que Escapan vs. Energía del Fotón Incidente



**Figura 6.11.** Energía Promedio de los Electrones que Escapan.

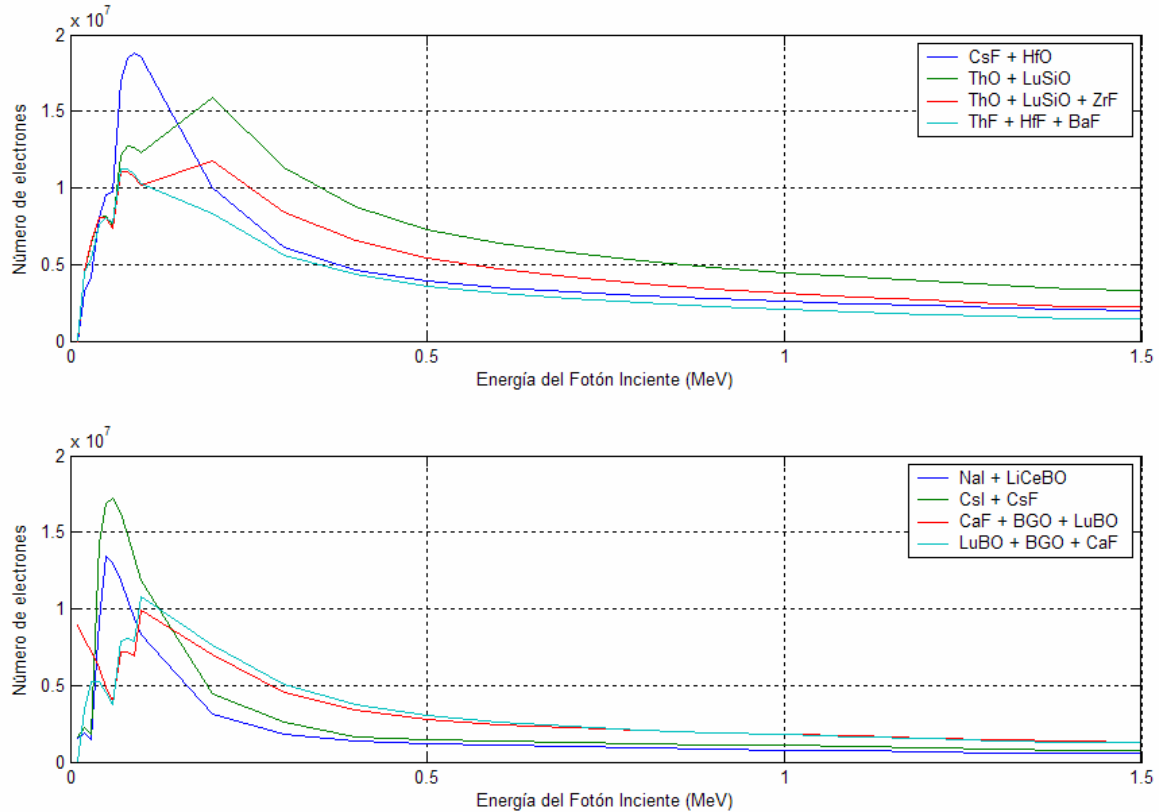
Los electrones que escapan del cascarón son capaces de transferir más lejos la energía, por consiguiente continuarán con las siguientes etapas de la detección. El número de estos electrones podría también ser considerado como un criterio de la eficiencia de la primera etapa de detección de rayos gamma. En la Figura 6.10 se puede observar que el BGO, altamente utilizado en PET ( $E=0.511$  MeV), tiene una producción mayor de electrones que escapan. En este caso el ThO, ThF y el HfO son los mejores detectores de rayos gamma tomando en cuenta únicamente la primera etapa. Los nuevos materiales propuestos también se consideran buenos detectores, especialmente el LuBO. Estas conclusiones son muy similares a las que se obtienen si se toma como criterio de detección el número total de electrones producidos.

## **6.2 Trabajo con distintas Geometrías.**

### ***6.2.1. Geometría de Cascarones Concéntricos.***

La geometría utilizada en estas simulaciones es equivalente a la geometría anterior. Consiste en una fuente isotrópica que emite 10 000 000 fotones monoenergéticos dentro del rango de 0.01 MeV a 1.5 MeV; y dos o tres cascarones esféricos concéntricos y adyacentes. Estos cascarones tienen el mismo ancho cada uno, formando en total un cascarón de 2 mm de ancho y radio interno de 7.49 cm. Por ejemplo, para el material CsF + HfO se tiene un cascarón de 1 mm de CsF y un cascarón de 1 mm de HfO. Para ese radio interno y ancho de cascarón, el volumen de cada uno de los materiales es el mismo.

Si se colocan cascarones concéntricos de diferentes cristales, se puede observar (Ver Figura 6.12) que la curva final de los electrones producidos se vuelve más regular para rangos menores a 0.5 MeV, teniendo como resultado un funcionamiento más uniforme en esa etapa. Esta conducta se debe a que la curva total resulta ser la suma de las curvas respectivas de cada material involucrado, por lo que se siguen presentando los máximos locales en la misma posición que antes.



**Figura 6.12.** Producción Total de Electrones como función de la Energía del Fotón Incidente.

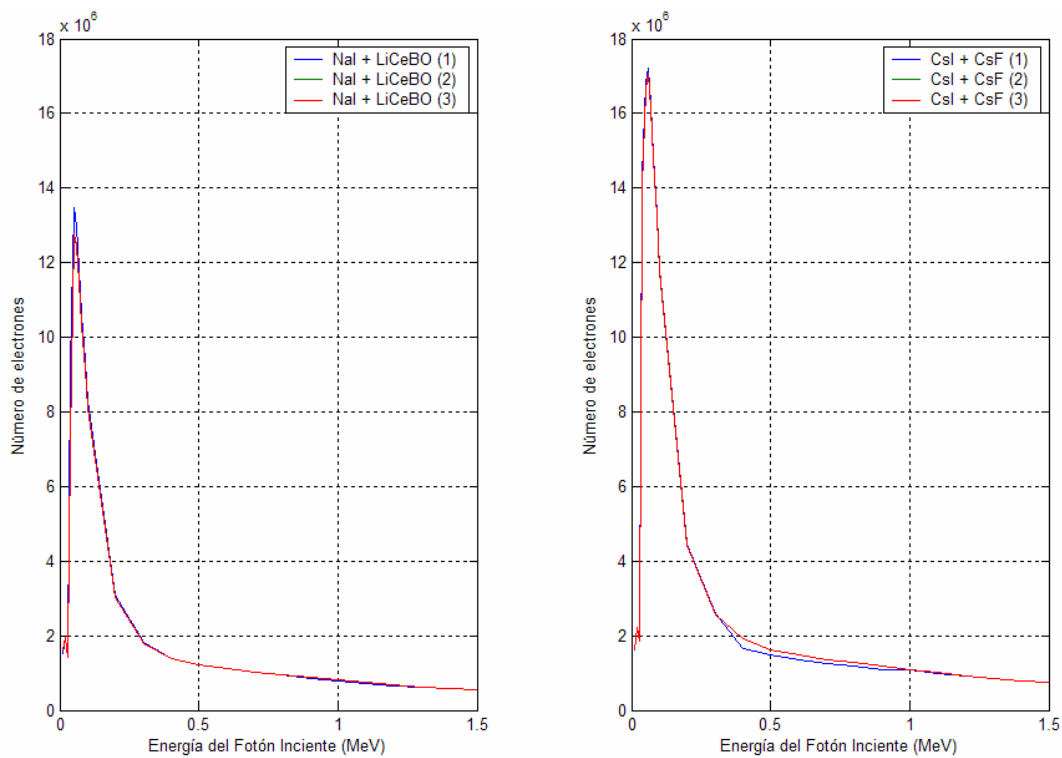
### 6.2.2. Geometrías para Distintas Distribuciones del Material.

Se planteó la pregunta de que si la producción total de electrones dependería de la distribución del material dentro del cascarón; por esta razón se comparan los resultados de tres geometrías diferentes. La geometría básica sigue siendo la misma, una fuente puntual con las mismas características ya mencionadas y un cascarón esférico de 2 mm de ancho. La geometría (1) se tiene dos cascarones esféricos concéntricos de distinto material y 1 mm de ancho cada uno. La geometría (2) consiste en un cascarón dividido en mitades, donde cada mitad esta hecha de un material diferente. Y por último la geometría (3) es un cascarón partido en cuartos, donde los dos cuartos opuestos están compuestos del mismo material. (Ver Figura 6.13).



**Figura 6.13.** Geometría de los cascarones.

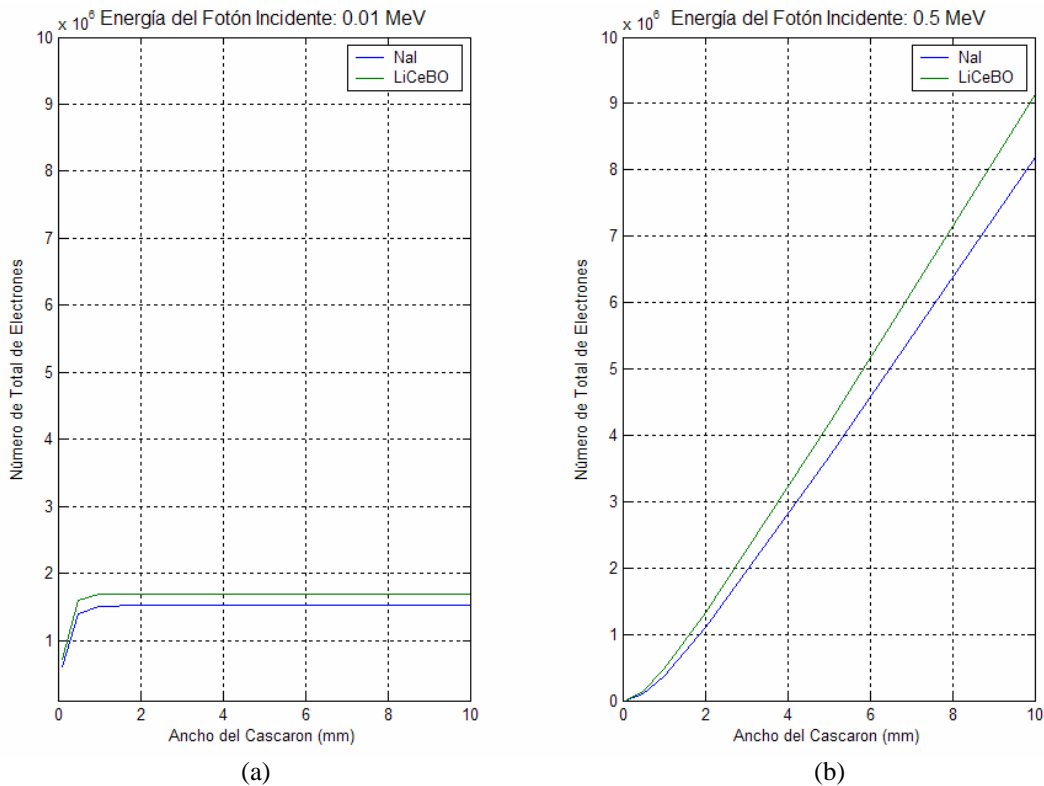
En la Figura 6.14 se puede distinguir que no existe diferencia en la manera de colocar el material, el resultado es el mismo para las tres geometrías propuestas. Esto puede deberse a que la probabilidad del ángulo de emisión del fotón desde la fuente sea igual a la probabilidad de que el fotón logre atravesar la primera esfera concéntrica. A pesar de que es un resultado interesante, en la práctica no tiene sentido.



**Figura 6.14.** Producción Total de Electrones para distintas Geometrías.

### 6.3 Ancho Cascarones.

No se observa en la Figura 6.15 un comportamiento lineal en la producción de electrones al variar el ancho del cascaron, incluso este resultado es muy diferente para distintas energías. Cuando el fotón incidente posee 0.01 MeV se puede ver que existe una saturación en la curva de producción de electrones (Figura 6.15.a.). Se sabe que en este rango predomina el efecto fotoeléctrico, por consiguiente los fotones interactúan una sola vez y depositan toda su energía. El fotón de baja energía es absorbido en los primeros milímetros por debajo de la superficie del cristal. En cambio, la física es distinta para fotones con energía de 0.5 MeV (Figura 6.15.b.) donde se verifica que la producción de electrones aumenta al hacer más ancho el cascaron. Esto se debe a que los fotones incidentes energéticos son más penetrantes; además predomina el efecto Compton. El fotón continúa su trayectoria después de una interacción Compton, por lo que este puede seguir generando más electrones en el camino y a mayor profundidad en el cristal. En promedio se generan más electrones por fotón mediante procesos Compton, que a través de efectos fotoeléctricos.



**Figura 6.15.** Producción total de electrones vs. ancho del cascarón para una energía fija.

Se sabe que el ancho del material es proporcional al número de fotones absorbidos<sup>1</sup>, por consiguiente si hay más absorción habrá más interacciones para producir más electrones primarios. Además, al aumentar la cantidad de material se puede producir más electrones por medio del efecto Knock-on. Para energías pequeñas el resultado no varía mucho porque los electrones Knock-on producidos tienen poca energía y son detenidos rápidamente, ya no logran hacer el efecto cascada.

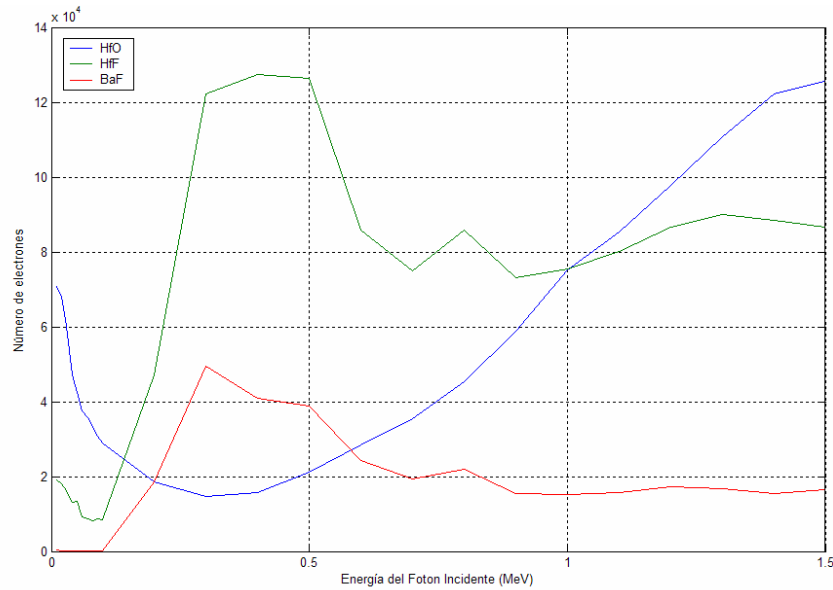
#### 6.4 Trabajo con fuente de Neutrones.

La detección de rayos gamma está muy relacionada con la detección de neutrones porque la mayoría de las veces se requiere tener un buen detector de rayos gamma y de neutrones al mismo tiempo. Se hizo una simulación para ciertos materiales con la geometría básica propuesta en la Sección 6.1, pero esta vez se coloca una fuente de neutrones aunque con las mismas características ya descritas. No se pudieron hacer cálculos de neutrones con más materiales porque no se contaba con todas las librerías de las secciones eficaces que requiere MCNP.

En la Figura 6.16 se distingue que la curva de producción total de electrones no es homogénea. Este comportamiento se debe, al igual que en los rayos gamma, a que la curva de las secciones eficaces tampoco es homogénea. Es más difícil detener un neutrón y su probabilidad de interactuar es menor que la de un fotón, debido a las distintas interacciones que cada partícula sufre. Por esta razón, la producción de electrones durante la detección de neutrones es mucho menor que la observada para rayos gamma.

---

<sup>1</sup>  $N = N_0 e^{-\mu x}$  donde  $N_0$  es el número de fotones incidentes,  $\mu$  es el coeficiente de atenuación lineal y  $x$  es el ancho del material que atraviesa.



**Figura 6.16.** Producción Total de Electrones como función de la Energía del Neutrón Incidente.

## 6.5 Error en las simulaciones.

Debido a que se hicieron las simulaciones con un número grande de partículas ( $10^7$ ), se pudo comprobar que los datos obtenidos en esta tesis son confiables. Todas las simulaciones corridas pasaron las pruebas estadísticas que el software realiza y muestra en el archivo de salida *out* (ver Apéndice 2). El error relativo calculado por MCNP para todas las tallies siempre fue menor a 0.1; es decir, se tiene un error aceptable según lo señalado en la Tabla 2.1.

## 6.6 Conclusiones Finales.

Si tomamos como criterio el número total de electrones podemos concluir que los mejores detectores de rayos gamma durante la primera etapa de detección son el HfO, ThO y PdWO para energías de 0.01 MeV a 1.5 MeV. Ciertamente se puede afirmar que la presencia de oxígeno en los cristales centelladores juega un papel importante en el proceso



de detección de rayos gamma. Resultados muy similares se encuentran si tomamos como parámetro el número de electrones que escapan, pero además se distinguen el ThF y BGO como otros posibles candidatos para desarrollar mejores detectores.

No se puede afirmar con los datos conseguidos que los cristales boratos propuestos son mejores detectores de rayos gamma, ya que tienen un comportamiento muy similar a cualquier otro cristal estudiado en este trabajo. Sin embargo, debido a la presencia de litio y boro podrían ser a la vez muy buenos detectores de neutrones [4]; desgraciadamente no se pudo estudiar este último punto debido a la falta de librerías ya mencionadas. Si se llegará a comprobar que los materiales boratos de litio son buenos detectores de neutrones, se plantearía la posibilidad de fabricar cristales centelladores más completos. Incluso se podría determinar los materiales óptimos y crear una geometría de cascarones concéntricos, como la propuesta en esta tesis, para lograr una detección más uniforme para todo el rango de energías.

## **6.7 Trabajo a Realizar.**

Los conocimientos adquiridos de MCNP y los resultados obtenidos en esta tesis servirán de base para futuros estudios en conjunto con la Unidad de Oncología del Centro Médico del Estado de Puebla. Se planea complementar los datos experimentales realizados en la Unidad de Oncología con las siguientes investigaciones teóricas:

- Verificar los cálculos de blindajes. Es decir, demostrar que el ancho y composición de las barreras del bunker, donde se localiza el Acelerador Lineal, son suficientes para detener los rayos X producidos para los tratamientos a pacientes. Comprobar que la parafina y el polietileno boratado sirven para detener los neutrones producidos.
- Investigar la cantidad de ozono que se crea al radiar el oxígeno en las tuberías de los gases medicinales y en todo el cuarto de tratamiento al ser expuesto a la radiación.

- Continuamente se utiliza cera de Campeche para hacer más uniforme la superficie del paciente y poder proporcionar una dosis homogénea en el tumor a tratar. Se quiere investigar la similitud del comportamiento de la cera y el tejido (agua) ante la radiación. Verificar si esta práctica tiene una base científica.
- Comprobar teóricamente la dosis en profundidad que se obtiene siempre de manera experimental. Se estudiará la producción de electrones dependiendo de la cantidad de agua que debe atravesar la radiación.