Caracterización de la Reacción de Captura Neutrónica por ^{16}O



UNIVERSIDAD DISTRITAL
FRANCISCO JOSÉ DE CALDAS

Luis Stivens Sanabria Castro

Universidad Distrital Francisco José de Caldas
Facultad de Ciencias y Educación
Proyecto Curricular de Licenciatura en Física

Bogotá D.C.
Mayo, 2022

Caracterización de la Reacción de Captura Neutrónica por ^{16}O



UNIVERSIDAD DISTRITAL
FRANCISCO JOSÉ DE CALDAS

Luis Stivens Sanabria Castro

***DIRECTOR**:*
Dr. Edwin Munévar Espitia
Proyecto Curricular de Licenciatura en Física, Universidad Distrital

Tesis de pregrado presentada como requisito para optar al título de:
Licenciado en física

Universidad Distrital Francisco José de Caldas
Facultad de Ciencias y Educación
Proyecto Curricular de Licenciatura en Física

Bogotá D.C.
Mayo, 2022

Dedicado a mis padres, a mi hermano
y a una mujer muy especial.

Agradecimientos

Agradezco grandemente al profesor Edwin Munévar Espitia, porque su paciencia, acompañamiento y conocimiento fueron la ayuda más grande para poder culminar este proyecto académico, que hace un par de años solo era un sueño. A la Universidad Distrital Francisco José de Caldas por las experiencias académicas, personales y profesionales que se forjaron durante mi estancia y a la Facultad de Ciencias y Educación por los profesores que aportaron conocimiento a mi formación.

A mis padres ya que sin ellos nada de esto sería posible, porque gracias a sus consejos, apoyo y su constante esfuerzo, me han fortalecido personalmente, por eso, este logro es dedicado a ellos.

Finalmente agradezco a Ángela Peña Malambo, quien con sus consejos me ha hecho crecer como persona, apoyándome de manera incondicional desde el principio y me ha acompañado en momentos difíciles, siempre creyendo en mí y en mis capacidades.

Resumen

El propósito de este trabajo es estudiar el estado final de la reacción nuclear obtenida cuando un haz de neutrones interactúa con blancos que contienen O^{16}, para determinar cantidades físicas de interés como la energía cinética de las partículas emitidas, la energía depositada, la transferencia lineal de energía, entre otras. Esto se hace con el fin de caracterizar la reacción y verificar si las partículas del estado final son o no perjudiciales para el tejido humano. La caracterización cinemática de la reacción y las cantidades mencionadas anteriormente se determinan a parir de simulaciones desarrolladas en la herramienta computacional Geant4. La simulación implementa la interacción de la radiación con la materia para la captura neutrónica por O^{16}.

Notación y Abreviaturas

α	Alfas
B^{10}	Boro
Be^{3}	Berilio
Br_{35}^{87}	Bromo
C^{12}	Carbono
Cf^{252}	Californio
e^{-}	Electrones
eV	Electrónvoltios
E_k	Energía Cinética
$E_{\bar{O^{17}}}$	Energía promedio del O^{17}
ω_R	Factor de Ponderación
f	Fragmentos de fisión
γ	Gammas
Gd	Gadolinio
Gy	Gray
H^{2}	Deuterio
H_1^1	Hidrógeno
He^{4}	Helio
keV	Kiloelectrónvoltios
La_{57}^{147}	Lantanio
meV	Milielectrónviltios
MeV	Megaelectrólvoltios
n	Neutrones
N_7^{16}	Nitrógeno
NCT	Terapia de captura neutrónica (por sus siglas en inglés)
$O^{16} - O^{17}$	Oxígeno
p	Protones
RBE	Eficacia biológica relativa (por sus siglas en inglés)
U_{92}^{235}	Uranio

Tabla de Contenido

Agradecimientos **I**

Resumen **III**

Notación y Abreviaturas **IV**

1. Introducción **1**

1.1. Reacciones Nucleares 1

1.2. Sección eficaz 2

1.3. Interacción de neutrones con la materia 3

1.3.1. Dispersión Elástica 5

1.3.2. Dispersión Inelástica 6

1.3.3. Fisión Nuclear 6

1.3.4. Captura Neutrónica 7

1.4. Fuentes de Neutrones 8

1.4.1. Fuentes de neutrones para procesos nucleares 9

1.4.2. Fuente de neutrones en la captura neutrónica 10

1.5. Motivación 12

1.6. Outline 14

2. Efectos Biológicos **16**

2.1. Efectos biológicos del haz de neutrones 16

2.1.1. Deposición de Energía 16

2.1.2. Transferencia Lineal de energía (LET) 17

2.1.3. Dosis Absorbida 18

2.1.4. Dosis Equivalente 19
2.1.5. Dosis Efectiva 19
2.1.6. Efectividad Biológica Relativa (RBE): 21
2.1.7. Fluencia 21
2.1.8. Poder de Frenado (Stopping Power) 21

3. Caracterización Cinemática del estado final 23
3.1. Geometría de la Simulación 23
3.2. Evento Primario y Lista de Física de la simulación 24
3.3. Resultados obtenidos de la Caracterización 25
3.3.1. Número de neutrones capturados de acuerdo a su energía 27
3.3.2. Distribución de energía del estado final 28
3.3.3. Distribución de momento del estado final 30
3.3.4. Distribuciones angulares (Θ y Φ) del estado final 31
3.3.5. Distribución del vértice primario del estado final 34
3.3.6. Distribución de velocidad del estado final 35
3.3.7. Valor Q de la reacción 37
3.4. Aspectos adicionales en la Caracterización 39
3.4.1. Cambio en la distribución espacial del haz de neutrones 39
3.4.2. Cambio en la distribución energética del haz de neutrones 43
3.4.3. Cambio en la forma geométrica del blanco de O^{16} 46
3.4.4. Cambio en el tamaño del blanco de O^{16} 50
3.4.5. Cambios generales tanto en el haz incidente como en el blanco de O^{16} 51

4. Simulación en agua y tejido con un haz de O^{17} y γ 55
4.1. Cambio en la Geometría implementada 55
4.2. Evento Primario y Lista de Física 56
4.3. Resultados obtenidos en agua y tejido con haces de O^{17} y γ 57
4.3.1. Energía depositada en agua por O^{17} 58
4.3.2. Energía depositada en agua por γ 60
4.3.3. LET en agua de O^{17} 62
4.3.4. LET en agua de γ 64

4.3.5. Energía depositada en tejido por O^{17} 67
4.3.6. Energía depositada en tejido por γ 68
4.3.7. LET en tejido de O^{17} 69
4.3.8. LET en tejido de γ 70
4.4. Aspectos adicionales en la simulación 70
4.4.1. Energía depositada en tejido por O^{17} usando el *mesh* 71
4.4.2. Energía depositada en tejido por γ usando el *mesh* 72

5. Conclusiones **74**

A. Distribuciones cinemáticas restantes **77**
A.1. Distribución de energía cinética del O^{17} y γ: 78
A.2. Distribución de momento del O^{17} y γ: 79
A.3. Distribuciones angulares (Φ y Θ) del O^{17} y γ: 80
A.4. Distribuciones de posición (vértice) del O^{17} y γ: 82
A.5. Distribuciones de velocidad del O^{17} y γ: 83
A.6. Valor Q de la reacción con diferentes energías 84

B. Cálculo analítico de las cantidades cinemáticas de los O^{17} y γ **85**
B.1. Valor Q encontrado con las energías cinéticas 85
B.2. Energías cinéticas de las partículas del estado final 86
B.3. Momentos de las partículas del estado final 89
B.4. Velocidad de las partículas O^{17} y γ 89
B.5. Ángulos de emisión θ y ϕ para los O^{17} y γ 90

C. Procesos de perdida de energía y estimación LET **93**
C.1. Perdida de energía de partículas cargadas pesadas 93
C.1.1. Caso clásico, cálculo de Bohr 93
C.1.2. Ecuación de Bethe - Bloch 94
C.2. Perdida de energía de fotones 96
C.2.1. Efecto fotoeléctrico 96
C.2.2. Efecto Compton 96
C.2.3. Producción de pares 96

C.3. Perdida de energía de electrones 97
C.4. Estimación de LET 97
C.4.1. Algoritmos para calcular el LET: usando la definición 98
C.4.2. Algoritmos para calcular el LET: forma Analítica 98

D. Aspectos básicos de Geant4 **102**
D.1. Geant4 102
D.2. Aplicaciones de Geant4 103
D.3. Aspectos que componen una simulación en Geant4 103

Lista de Figuras

1.1 Secciones eficaces típicas por neutrones en $U^2 38$ 2

1.2 Sección eficaz de captura de neutrones en O^{16}. 8

1.3 Representación gráfica de un BSA común 11

1.4 Ilustración del NCT y de los elementos más abundantes en el tejido humano. 13

3.1 Geometría implementada en la simulación 24

3.2 Vista de las partículas generadas cuando el haz de neutrones interactúa con blanco puro de O^{16} 25

3.3 Número de Capturas en función de la energía del haz 27

3.4 Distribución de energía de los O^{17} y γ a 0.025 eV. 28

3.5 Error en la distribución de energía del O^{17}. 29

3.6 Distribución de momentos para los O^{17} y γ y su diferencia. 30

3.7 Error en la distribución de momento del O^{17}. 31

3.8 Distribuciones angulares para los O^{17} y γ. 32

3.9 Suma y diferencia del ángulo polar y azimutal para O^{17} y γ. 32

3.10 Reacción y emisión *back to back* de las partículas del estado final. 33

3.11 Relación entre ángulo polar Θ y ángulo azimutal Φ. 33

3.12 Distribución del vértice para O^{17} y γ 35

3.13 Distribución de velocidad para O^{17} y γ 36

3.14 Valor Q de la reacción 37

3.15 Diferentes distribuciones espaciales del haz de neutrones 40

3.16 Distribuciones de O^{17} obtenidas con una forma espacial cónica de haz de neutrones 40

3.17 Distribuciones γ obtenidas con una forma espacial cónica de haz de neutrones 41

3.18 Distribuciones de O^{17} obtenidas con una forma espacial cilíndrica de haz de neutrones 42
3.19 Distribuciones γ obtenidas con una forma espacial cilíndrica de haz de neutrones 42
3.20 Valor Q obtenido para las distribuciones espaciales del haz 43
3.21 Diferentes distribuciones energéticas del haz de neutrones 43
3.22 Distribuciones de O^{17} obtenidas con una forma energética uniforme de haz de neutrones 44
3.23 Distribuciones γ obtenidas con una forma energética uniforme de haz de neutrones 44
3.24 Distribuciones de O^{17} obtenidas con una distribución energética gaussiana de haz de neutrones 45
3.25 Distribuciones γ obtenidas con una forma energética gaussiana de haz de neutrones 45
3.26 Valor Q obtenido para las distribuciones energéticas del haz 46
3.27 Diferentes geometrías utilizadas para el blanco de O^{16} 46
3.28 Distribuciones de O^{17} obtenidas con un blanco de O^{16} con forma cónica . 47
3.29 Distribuciones γ obtenidas con un blanco de O^{16} con forma cónica 47
3.30 Distribuciones de O^{17} obtenidas con un blanco de O^{16} con forma cilíndrica 48
3.31 Distribuciones γ obtenidas con un blanco de O^{16} con forma cilíndrica . . 48
3.32 Distribuciones de O^{17} obtenidas con un blanco de O^{16} con forma esférica 49
3.33 Distribuciones γ obtenidas con un blanco de O^{16} con forma esférica . . . 49
3.34 Valor Q para las diferentes formas geométricas del blanco de O^{16}. 50
3.35 Número de neutrones capturados en función del tamaño del cubo de O^{16} (blanco). 51
3.36 Cambios generales del haz de neutrones 52
3.37 Distribuciones de O^{17} obtenidas con los cambios del haz y del blanco de O^{16} 52
3.38 Distribuciones de γ obtenidas con los cambios del haz y del blanco de O^{16} 53
3.39 Valor Q obtenido con los cambios del haz y del blanco de O^{16} 53

4.1 Geometría utilizada en la simulación para O^{17} y γ 56

4.2 Vista del haz lineal de incidente de O^{17} (izquierda) y γ (derecha) 57
4.3 Distribución isotrópica de un haz de partículas γ 58
4.4 Energía depositada por un haz lineal de O^{17} 59
4.5 Energía depositada por un haz isotrópico de O^{17} 60
4.6 Energía depositada por un haz lineal de γ generado desde afuera y adentro del blanco 61
4.7 Energía depositada por un haz isotrópico de γ generado desde afuera y adentro del blanco 62
4.8 LET obtenidos con un haz lineal de O^{17} 63
4.9 LET obtenidos con un haz isotrópico de O^{17} 64
4.10 LET obtenidos con un haz lineal de γ generado afuera del blanco 64
4.11 LET obtenidos con un haz lineal de γ generado adentro del blanco . . . 65
4.12 LET obtenidos con un haz isotrópico de γ generado fuera del blanco . . 66
4.13 LET obtenidos con un haz isotrópico de γ generado dentro del blanco . . 67
4.14 Energía depositada por un haz isotrópico de O^{17} dentro del blanco de tejido 68
4.15 Energía depositada por un haz isotrópico de $O\gamma$ fuera del blanco de tejido 68
4.16 LET obtenidos con un haz isotrópico de O^{17} generado fuera del blanco . 69
4.17 LET obtenidos con un haz isotrópico de γ generado afuera del blanco . . 70
4.18 Ilustración del *mesh* e interacción de los O^{17}con el medio 71
4.19 Energía depositada por un haz isotrópico de O^{17} implementando el *mesh.* 72
4.20 Ilustración del *mesh* e interacción de los γ con el medio 72
4.21 Energía depositada por un haz isotrópico de γ implementando el *mesh.* . 73

A.1 Distribución de energía del O^{17}, de 0.025 a 1 eV. 78
A.2 Distribución de energía del γ, de 0.025 a 1 eV. 78
A.3 Distribución de momento del O^{17}, de 0.025 a 1 eV. 79
A.4 Distribución de momento del γ, de 0.025 a 1 eV. 79
A.5 Distribución azimutal Φ del O^{17}, de 0.025 a 1 eV. 80
A.6 Distribución azimutal Φ del γ, de 0.025 a 1 eV. 80
A.7 Distribución polar Θ del O^{17}, de 0.025 a 1 eV. 81
A.8 Distribución polar Θ del γ, de 0.025 a 1 eV. 81

A.9 Distribución de posición (vértice) del O^{17}, de 0.025 a 1 eV. 82

A.10 Distribución de posición (vértice) del γ, de 0.025 a 1 eV. 82

A.11 Distribución de velocidad del O^{17}, de 0.025 a 1 eV. 83

A.12 Distribución de velocidad del γ, de 0.025 a 1 eV. 83

A.13 Valor Q de la reacción, de 0.025 a 1 eV. 84

Lista de Tablas

1.1 Clasificación de los neutrones de acuerdo al rango de su E_k 3

1.2 Parámetros sugeridos para los haces de neutrones térmicos y epitérmicos para NCT 11

2.1 LET de diferentes partículas en un blanco de agua 18

2.2 Factores de ponderación ω_R 19

2.3 Rangos de dosis equivalente y sus efectos biológicos 20

2.4 Factores de ponderación tisular ω_T 20

3.1 Cantidades obtenidas del O^{17} para 0,025eV 26

3.2 Cantidades obtenidas de las partículas γ para 0,025eV 26

Capítulo 1

Introducción

1.1. Reacciones Nucleares

Las reacciones nucleares son procesos por los cuales interactúan núcleos atómicos con partículas que poseen energía u otros núcleos atómicos. Estas interacciones entre la partícula incidente y el blanco, da como resultado isótopos del mismo elemento utilizado como blanco o isótopos de otros elementos y la emisión de partículas definidas como residuos de la reacción. Un método común para denotar reacciones nucleares es el siguiente [1]:

$$A + a \rightarrow B + b + Q \tag{1.1}$$

donde a es la partícula de bombardeo, A el núcleo objetivo, B el núcleo resultante, b es la partícula o partículas salientes y Q es la energía liberada o también llamado factor Q. Este factor se clasifica dependiendo de su valor: si $Q = 0$, indica que no hay cambio en la energía de la reacción, si $Q > 0$, entonces se dice que la reacción es exotérmica, lo que corresponde a un desprendimiento de energía en la reacción y si $Q < 0$, entonces la reacción es llamada endotérmica y se debe suministrar energía para que ocurra la reacción entre los núcleos que chocan. La fisión nuclear es un ejemplo de una reacción exotérmica [2]. Una notación más compacta de escribir las reacciones nucleares es:

$$A\,(a, b)\,B \tag{1.2}$$

Se debe tener en cuenta que las partículas entrantes y salientes están siempre en el

interior de los paréntesis. La notación abreviada es (a, b), por lo tanto, indica cualquier reacción nuclear en la que a es la partícula incidente y b la partícula saliente resultante. A manera de ejemplo, en la captura de neutrones por medio de un blanco puro de O^{16} la reacción nuclear que se obtiene es:

$$O^{16}\,(n,\gamma)\,O^{17} \tag{1.3}$$

1.2. Sección eficaz

La interacción de dos partículas se describe generalmente en términos de sección eficaz. Esta cantidad da una medida de la probabilidad de que ocurra una reacción nuclear y puede calcularse si se conoce la forma de la interacción básica entre las partículas [3]. Es una magnitud que se puede determinar experimentalmente y calcular analíticamente. La sección eficaz se representa con la letra griega σ y se mide en unidades de área (cm^2 *o* $barns; 1\ barns = 10^{-24}\ cm^2$). La descripción de la interacción de los neutrones con los núcleos atómicos se puede hacer cuantitativamente por medio de la sección eficaz.

La figura 1.1 muestra algunas secciones eficaces típicas inducidas por neutrones para un buen absorbente como el núcleo U^{238}. Además de la sección eficaz total, de captura y de fisión, se muestran las secciones eficaces para la dispersión inelástica que deja el núcleo en el primer, segundo y tercer estado excitado [4].

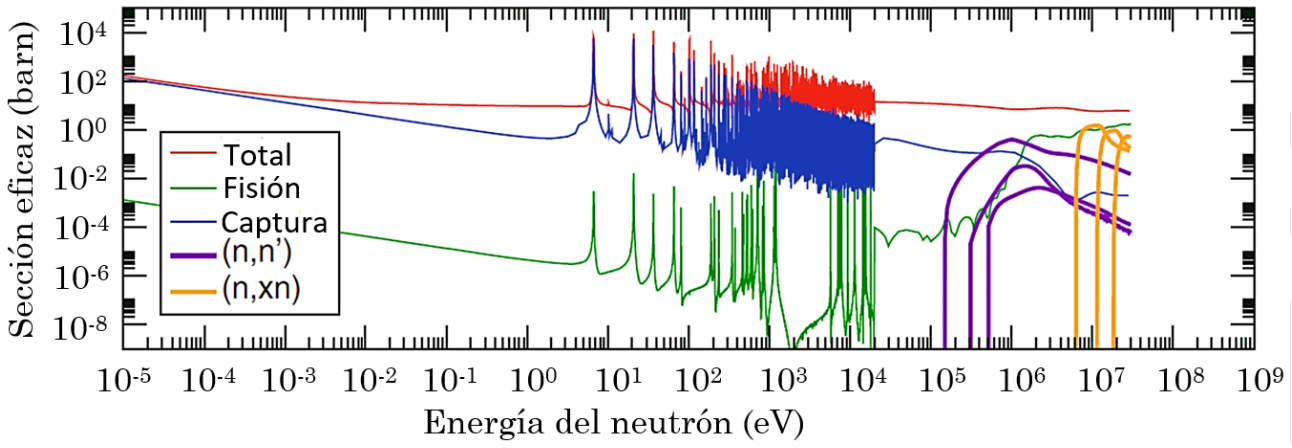


Figura 1.1: Secciones eficaces típicas inducidas por neutrones para el núcleo U^{238} en un rango de energía de 10^{-2} a 10^{9} eV. **Fuente:** [4].

1.3. Interacción de neutrones con la materia

Los neutrones son partículas sin carga que se encuentran con abundancia en la naturaleza. Estas partículas interactúan con los núcleos atómicos que se encuentran a su alrededor, provocando diversas reacciones nucleares. Dado que los neutrones no tienen carga eléctrica, no se ven afectados por el campo eléctrico de los demás átomos. Esto les permite moverse rápidamente a través de grandes espacios atómicos sin interactuar. Sin embargo, si están cerca de los núcleos, son afectados por la fuerza nuclear ganando energía cinética. Dependiendo de su energía, los neutrones se pueden clasificar de la siguiente manera:

Clasificación	**Rango de E_k**
Neutrones fríos	$0\ eV < E_k < 0{,}025\ eV$
Neutrones térmicos	$E_k \approx 0{,}025\ eV$
Neutrones epitérmicos	$0{,}025\ eV < E_k < 0{,}4\ eV$
Neutrones cadmio	$0{,}4\ eV < E_k < 0{,}6\ eV$
Neutrones epicadmio	$0{,}6\ eV < E_k < 1\ eV$
Neutrones lentos	$1\ eV < E_k < 10\ eV$
Neutrones de resonancia	$10\ eV < E_k < 300\ eV$
Neutrones intermedios	$300\ eV < E_k < 1\ MeV$
Neutrones rápidos	$1\ MeV < E_k < 20\ MeV$
Neutrones relativistas	$E_k > 20\ MeV$

Tabla 1.1: Clasificación de los neutrones de acuerdo al rango de su energía cinética "E_k". **Fuente:** [5].

Las reacciones entre neutrones y núcleos se distribuyen en dos grandes grupos: *dispersión* y *absorción*. En las reacciones de dispersión, el resultado final es solamente un intercambio de energía entre las dos partículas que colisionan, en donde el neutrón queda libre después de la interacción. Por otra parte, en los procesos de absorción, el neutrón es retenido por el núcleo, formando nuevas partículas [6].

Al considerarse reacciones por absorción, hay dos tipos: por neutrones lentos o por neutrones rápidos. Existen cuatro clases de reacciones con neutrones lentos:

1. Emisión de radiación gamma (n, γ).

2. Expulsión de una partícula alfa (n, α).

3. Expulsión de un protón (n, p).

4. Fisión (n, f).

La más frecuente es el proceso (n, γ), que tiene lugar en gran número de reacciones. Si se excluyen la dispersión y la fisión, son pocas las reacciones de neutrones rápidos con núcleos atómicos. Aunque pueden ser bastantes las reacciones que se producen con neutrones rápidos, la probabilidad de darse son bastante pequeñas, entre ellas hay que tener en cuenta la reacción (n, p) de neutrones rápidos con O^{16}:

$$O^{16} \; + \; n^1 \; \rightarrow \; \left(O^{17}\right)^* \; \rightarrow \; H^1 \; + \; N^{16} \tag{1.4}$$

En el que:

- O^{16} es el núcleo blanco.
- n^1 es el proyectil.
- $(O^{17})^*$ es el núcleo excitado.
- H^1 el residuo de la reacción.
- O^{17} es el núcleo resultante.

Y en notación más compacta se puede escribir la reacción (1.4) como:

$$O^{16}\left(n^1,\, H^1\right) N^{16} \tag{1.5}$$

El producto es N^{16}, el cual presenta actividad beta en un período de $7,3\, s$ emitiendo rayos γ de alta energía (alrededor de 6 MeV).

A pesar de que la mayoría de las fisiones son provocadas por neutrones térmicos, hay un número considerable de neutrones rápidos liberados por la fisión. Estos pueden interactuar con núcleos de O^{16} para producir N^{16}, altamente radiactivo, pero de vida corta. El producto de desintegración de este último es O^{16} ordinario.

Siempre que la energía de excitación sea suficiente, es más probable la expulsión de una partícula cargada por parte de un núcleo compuesto formado por captura neutrónica que por la emisión de radicación. Con neutrones rápidos de energía superior a 1 MeV, con frecuencia se produce con facilidad reacciones (n, α) y (n, p) que la reacción (n, γ). Si se utilizan neutrones con energías lo suficientemente altas, el núcleo puede expulsar dos o más neutrones o protones [6].

Las reacciones de absorción, al igual que la mayoría de dispersión, tienen dos etapas. La primera etapa consiste en la captura de un neutrón por el blanco, para formar un núcleo compuesto, que puede ser el núcleo de un isótopo conocido o una especie inestable (radioactiva); inmediatamente después de su formación, el núcleo queda en un estado de alta energía lo que se conoce como *estado excitado*.

En un intervalo de tiempo muy corto, el núcleo compuesto excitado experimenta la segunda etapa de la reacción, en donde se puede generar alguno de los siguientes casos: (a) expulsión de una partícula, que puede ser un neutrón, un protón o una partícula alfa; (b) emisión de un fotón o (c) ruptura del núcleo en dos fragmentos más o menos iguales "fisión".

Para la dispersión y la absorción en la interacción de los neutrones con la materia, hay cuatro procesos principales característicos, los cuales son: dispersión elástica, dispersión inelástica, captura neutrónica y fisión nuclear.

1.3.1. Dispersión Elástica

La dispersión elástica es la interacción de un neutrón energético con un núcleo de un medio absorbente. El proceso de dispersión elástica es importante para neutrones con energías de hasta 14 MeV. El principal núcleo de dispersión en el medio absorbente para sistemas equivalentes de tejido es el protón. También se produce una dispersión adicional con oxígeno, carbono y nitrógeno, en ese orden de importancia. Para la dosimetría de la absorción de neutrones, es importante que la dispersión elástica, en particular con el hidrógeno, se considere casi isotrópica para energías por debajo de 14 MeV [7]. Normal-

mente la dispersión elástica se describe de la siguiente manera:

$$n \ + \ X_p^{n+p} \ \rightarrow \ n \ + \ X_p^{n+p} \tag{1.6}$$

donde:

- n es la partícula que hace de proyectil (neutrón).
- X_p^{n+p} es el núcleo blanco.

Cabe recordar que en los procesos de dispersión, el neutrón solo intercambia energía con el núcleo, pero tanto el proyectil como el núcleo no cambian.

1.3.2. Dispersión Inelástica

A diferencia de la dispersión elástica, la dispersión inelástica deja el núcleo objetivo en un estado excitado, que luego puede decaer en rayos γ de alta energía o alguna otra forma de emisión radioactiva. El neutrón "n" primero es capturado por el núcleo y luego emitido como un neutrón "n'" con una energía cinética más baja y en una dirección que es diferente de la dirección del neutrón incidente, dado que se absorbe y se emite un neutrón, el núcleo del producto es idéntico al núcleo inicial.

Las reacciones solo son cinemáticamente posibles si la energía del neutrón es mayor que la energía umbral necesaria para la conservación de la energía y el momento. La transferencia de energía al medio en dispersión inelástica se realiza mediante las interacciones de rayos γ de desexcitación. Debido a la energía generalmente alta de los γ de desexcitación, la cantidad de energía transferida, así como la energía absorbida, es pequeña [7]. Este proceso se ilustra con la siguiente relación:

$$n \ + \ X_p^{n+p} \rightarrow X_p^{n+p} \ + \ \gamma \tag{1.7}$$

1.3.3. Fisión Nuclear

En este proceso, un núcleo pesado, como el uranio-235, captura neutrones lentos y los lleva a un estado excitado. Luego, el núcleo se divide en fragmentos después de cierto tiempo, emitiendo varios neutrones y rayos γ durante este proceso, el uranio-235 se fisiona

solo en un 85 % del tiempo después de la absorción de neutrones térmicos. Los núcleos con un número impar de nucleones se fisionan más fácilmente después de la absorción de neutrones que los núcleos con un número par de nucleones. Este hecho está relacionado con la mayor energía de enlace por nucleón que se encuentra en los núcleos pares. El núcleo de uranio-235 es par-impar en términos de sus números de protones y neutrones, la adición de un neutrón lo transforma en un núcleo par-par. Los núcleos fisionables se rompen de diferentes formas. El núcleo de uranio-235 se divide en unos 40 modos aproximadamente después de la absorción de un neutrón térmico. Un ejemplo típico es el siguiente [8]:

$$n \ + \ U_{92}^{235} \ \rightarrow \ La_{57}^{147} \ + \ Br_{35}^{87} \ + \ 2n \tag{1.8}$$

En el proceso de fisión se libera en promedio energía de aproximadamente 195 MeV, distribuida de la siguiente manera: la mayor parte de la energía (162 MeV) es llevada por los fragmentos de fisión cargados, como los fragmentos: La y Br mostrados en (1.8). Los neutrones de fisión y los rayos γ representan otros 12 MeV, la posterior desintegración del producto de fisión representa 10 MeV y los neutrinos transportan 11 MeV.

1.3.4. Captura Neutrónica

La captura de neutrones describe una reacción nuclear en la que se bombardea un núcleo con neutrones térmicos sin producir fisión, emitiendo protones o rayos γ [9]. Los procesos de captura ocurren a bajas energías y representan una fracción muy significativa de la dosis tisular para neutrones de muy baja energía los cuales se encuentran en el rango de los térmicos y los epitérmicos. En realidad, la captura es casi toda la fuente de dosis tisular de los neutrones que se encuentran en este rango. La captura neutrónica se representa de la siguiente manera:

$$n \ + \ X_p^{n+p} \rightarrow \left(X_p^{n+p+1}\right)^* \rightarrow X_p^{n+p+1} \ + \ \gamma \tag{1.9}$$

El uso de un espectro térmico se fundamenta en la sección eficaz de captura de neutrones que es proporcional a $1/v$ donde v es la velocidad del neutrón; es un hecho experimental que la sección eficaz de captura neutrónica aumenta a medida que la velocidad del neutrón disminuye [3].

Para el caso específico de un blanco como el O^{16}, se puede observar que la sección eficaz total es bastante pequeña y disminuye a medida que la energía del haz de neutrones aumenta como se puede ver en la figura 1.2, esto causa que el número de neutrones deba ser considerable para que la probabilidad de que ocurra la reacción nuclear de captura neutrónica aumente "$O^{16}\,(n,\gamma)\,O^{17}$".

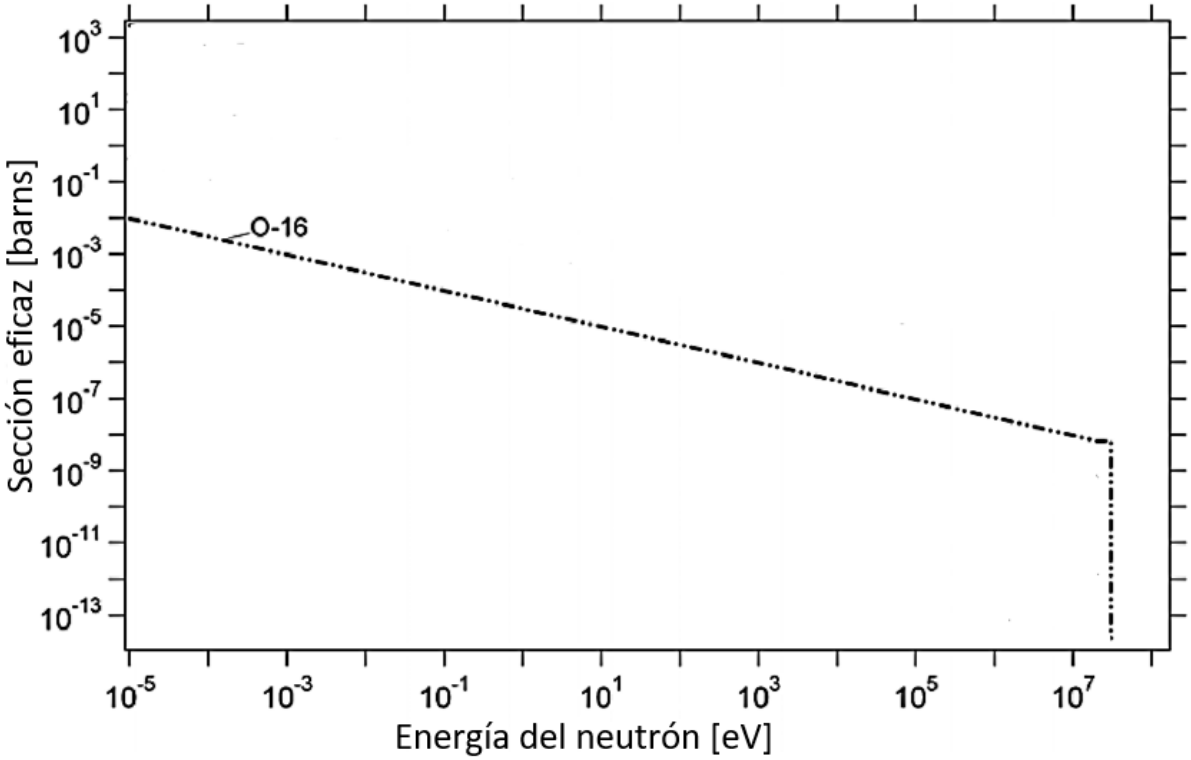


Figura 1.2: Sección eficaz en función de la energía de los neutrones capturados en O^{16}. **Fuente:** [10].

1.4. Fuentes de Neutrones

Las reacciones nucleares son la única fuente de neutrones, la reacción (α, n) llevó al descubrimiento de los neutrones y todavía se utilizan para producir estas partículas. Cuando se mezcla un gramo de radio con varios gramos de berilio en polvo, se emiten aproximadamente 10^7 neutrones rápidos por segundo como resultado de la reacción [11].

$$Be^9 \; + \; He^4 \rightarrow C^{12} \; + \; n^1 + 5{,}71 \; MeV \tag{1.10}$$

La mezcla puede estar contenida en un volumen de 6 o 7 cm^3 y proporciona una

fuente conveniente de neutrones. Las fuentes de neutrones radio isotópicos son mucho más limitadas y se basan en la *fisión espontánea* o *reacciones nucleares* en las que la partícula incidente es el producto de un proceso de desintegración convencional.

1.4.1. Fuentes de neutrones para procesos nucleares

1. **Fisión Espontánea:** Esta manera de obtener neutrones representa una forma de desintegración radiactiva que involucra isótopos pesados. La diferencia entre la fisión espontánea con la fisión nuclear radica en que la primera no necesita de ningún tipo de partícula que interactúe con el núcleo para que genere la desintegración, debido a que la masa llega a un estado crítico generando una reacción en cadena. Uno de los isótopos más usados para este tipo de fisión es el Cf^{252}. Los neutrones se producen directamente en el proceso de fisión, a una tasa de aproximadamente 4 por fisión, en otras palabras la tasa de producción de neutrones es de $2{,}3 \times 10^{12}$ neutrones/s por gramo de Cf^{252}. La fisión ocurre alrededor del 3 % de las desintegraciones. Otros productos del proceso de fisión son los productos de fisión pesados, los rayos γ de fisión rápida y la actividad β y γ de los productos de fisión acumulados dentro de la muestra [12].

2. **Reacciones Nucleares:** Hay muchas reacciones nucleares que producen neutrones, las más comunes son: (α, n) o (γ, n). Las reacciones de este tipo ocurren con muchos núcleos, sin embargo, solo se utilizan los que tienen el mayor rendimiento. Tales fuentes se fabrican generalmente mezclando el material que es el objetivo con un emisor α o γ. El material más común es el berilio. Bajo el bombardeo de partículas α, el berilio sufre una serie de reacciones que conducen a la producción de neutrones libres [3]. Se tienen dos fuentes importantes relacionadas con las reacciones mencionadas anteriormente:

   a) Fuentes de Berilio: Debido a que las partículas α están disponibles a partir de la desintegración directa de varios radionucleidos convenientes, es posible fabricar una pequeña fuente de neutrones mezclando un isótopo emisor de α con un material objetivo adecuado. Varios materiales pueden conducir a reacciones (α, n) para las energías de las partículas α que están fácilmente disponibles en

la desintegración radiactiva. El rendimiento máximo de neutrones se obtiene cuando se elige el berilio "Be^9" como objetivo y los neutrones se producen a través de la reacción (1.10).

b) Fuente de Fotoneutrones: Es un proceso similar a la fuente (α, n) discutida anteriormente, aunque se suele usar la reacción (γ, n) para producir neutrones. Algunos emisores de rayos γ de radioisótopos también pueden usarse para producir neutrones cuando se combinan con un material objetivo apropiado. Las fuentes de fotoneutrones resultantes se basan en suministrar suficiente energía de excitación a un núcleo objetivo mediante la absorción de un fotón de rayos γ permitiendo la emisión de un neutrón libre. La ventaja de la producción de fotoneutrones es que garantiza que los neutrones sean más monoenergéticos. Solo dos núcleos: Be^9 y H^2, se sugieren en la producción de fotoneutrones. [12].

1.4.2. Fuente de neutrones en la captura neutrónica

Para el caso de reacciones nucleares de captura neutrónica con fines terapéuticos es necesario usar fuentes de neutrones que produzcan haces con energía en el rango de los neutrones térmicos (ver tabla 1.1). Para la producción de haces para NCT, se utilizan: reactores nucleares y generadores compactos.

1. **Reactores Nucleares:** La mayoría de las investigaciones y los estudios clínicos en NCT han utilizado haces de neutrones generados por reactores de fisión. Los reactores que han sido construidos específicamente para estudios de NCT son: el Reactor de Investigación del Instituto de Tecnología de Massachusetts (MITR por sus siglas en inglés) y el Reactor de Investigación Médica Brookhaven (BMRR por sus siglas en inglés) [13]. Pese a que los haces de neutrones son generados sin inconvenientes, se ha observado que los haces contienen una gran cantidad de neutrones rápidos y rayos γ, considerados como agentes contaminantes y perjudiciales para el tejido sano circundante. En la tabla 1.2, se muestran algunos de los parámetros necesarios que se deben tener en cuenta en los haces de neutrones para poder ser usados en NCT.

Con el fin de reducir estos agentes contaminantes y que la dosis absorbida por el

Parámetros	Neutrones epitérmicos	Neutrones térmicos
Energía	$0{,}4\ eV < E < 10\ keV$	$0\ eV < E < 0{,}4\ eV$
Intensidad	$> 2 \times 10^{9}\ ncm^{-2}\ s^{-1}$	$> 0{,}5 \times 10^{9}\ ncm^{-2}\ s^{-1}$
Contaminación	$\lesssim 2{,}8 \times 10^{-13}\ RBE\ Gy\ cm^{2}$ Para γ y neutrones rápidos	$\lesssim 2{,}8 \times 10^{-13}\ RBE\ Gy\ cm^{2}$ Para γ y neutrones rápidos
Profundidad de ventaja	$> 9\ cm$	$> 4\ cm$
Tamaño del Haz	$> 16\ cm$ *de diámetro*	$> 16\ cm$ *de diámetro*

Tabla 1.2: Recomendaciones para las propiedades deseables de los haces de neutrones térmicos y epitérmicos para NCT. Las intensidades se estiman para irradiaciones aproximadamente de 12,5 RBE Gy, en 30 minutos o menos utilizando un compuesto de captura avanzado. **Fuente:** [13].

medio objetivo no exceda los límites de los tejidos, se debe utilizar un conjunto moderador, conocido como Beam Shaping Assembly (BSA, por sus siglas en inglés) [14]. El BSA es un sistema que está conformado por diferentes elementos, los cuales permiten controlar la energía de los neutrones, en otras palabras permite pasar de neutrones epitérmicos a térmicos, filtrando neutrones rápidos y reduciendo la contaminación γ. Este sistema está compuesto por: un colimador, reflectores, filtros y un moderador como se observa en la figura 1.3.

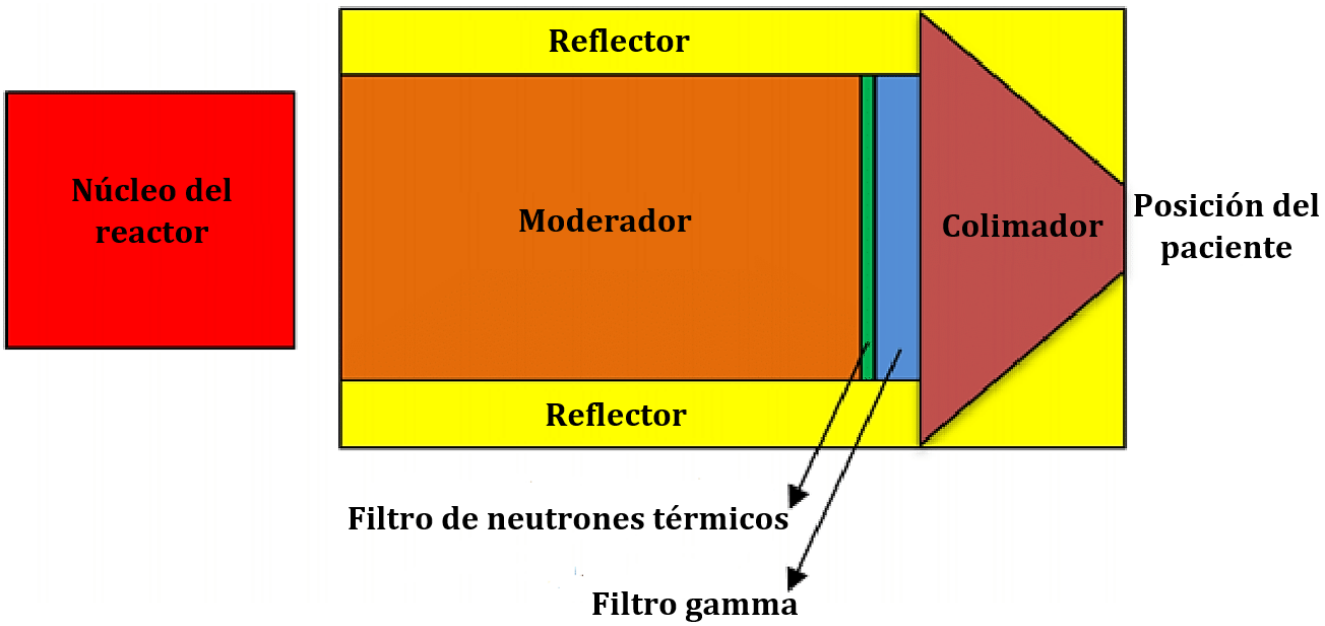


Figura 1.3: Representación gráfica de un BSA común. **Fuente:** [14].

El *moderador* modifica el espectro de energía del haz de neutrones, pero si los neutrones rápidos logran pasar sin que el moderador los detecte, automáticamente

se activan los *reflectores*. Estos se encargan de devolver los neutrones que se filtran para que su espectro energético sea modificado al nivel de interés. Los *filtros* tienen como objetivo reducir la contaminación (rayos γ y neutrones rápidos) del haz para obtener un flujo epitérmico de alta calidad y finalmente el *colimador* se usa para enfocar un haz de radiación divergente hacia el blanco de interés [13].

2. **Generadores Compactos:** Se utilizan como fuentes de neutrones: rápidos, epitermales y térmicos en una variedad de aplicaciones. Actualmente, la mayoría de los generadores de neutrones compactos de baja potencia se utilizan para producir neutrones entre 2,45 y 14 MeV a través de la reacción de fusión Deuterio + Deuterio "(H^2, H^2)" o Deuterio + Tritio "(H^2, H^3)". Con el fin de proporcionar la intensidad de neutrones necesaria para diversas aplicaciones, generalmente se cree que debe emplearse la reacción de fusión Deuterio + Tritio que produce neutrones de 14 MeV, debido a su mayor sección eficaz y a una tensión de funcionamiento de alrededor de 100 kV [15].

1.5. Motivación

La detección de neutrones es una tarea bastante complicada, ya que son partículas que no poseen carga eléctrica. Para su detección generalmente se utilizan materiales puros que capturan neutrones como: B^{10}, Gd^{157}, Li^6, etc. De esta interacción se generan reacciones nucleares que liberan energía. Las reacciones de captura neutrónica se han enfocado en dos aspectos principales: detección de neutrones y radioterapia.

Cuando se utiliza la captura de neutrones en radioterapia, se le conoce como NCT y en general es una terapia binaria en la que se utiliza un compuesto puro como el B^{10} u otro elemento, el cual es introducido en la zona afectada para luego ser irradiado por un haz de neutrones térmicos, iniciando así una secuencia citotóxica [16]. Pero en este proceso, hay un porcentaje de neutrones que sobre el área perjudicada no llegan a reaccionar con el B^{10}, debido a que esta región está compuesta de diversos elementos como el: Oxígeno, Nitrógeno, Hidrógeno, Carbono, etc. Los cuales cuentan con una sección eficaz de captura neutrónica no despreciable y además siendo los compuestos de mayor abundancia por

fracción de masa en el tejido humano [17] (ver figura 1.4).

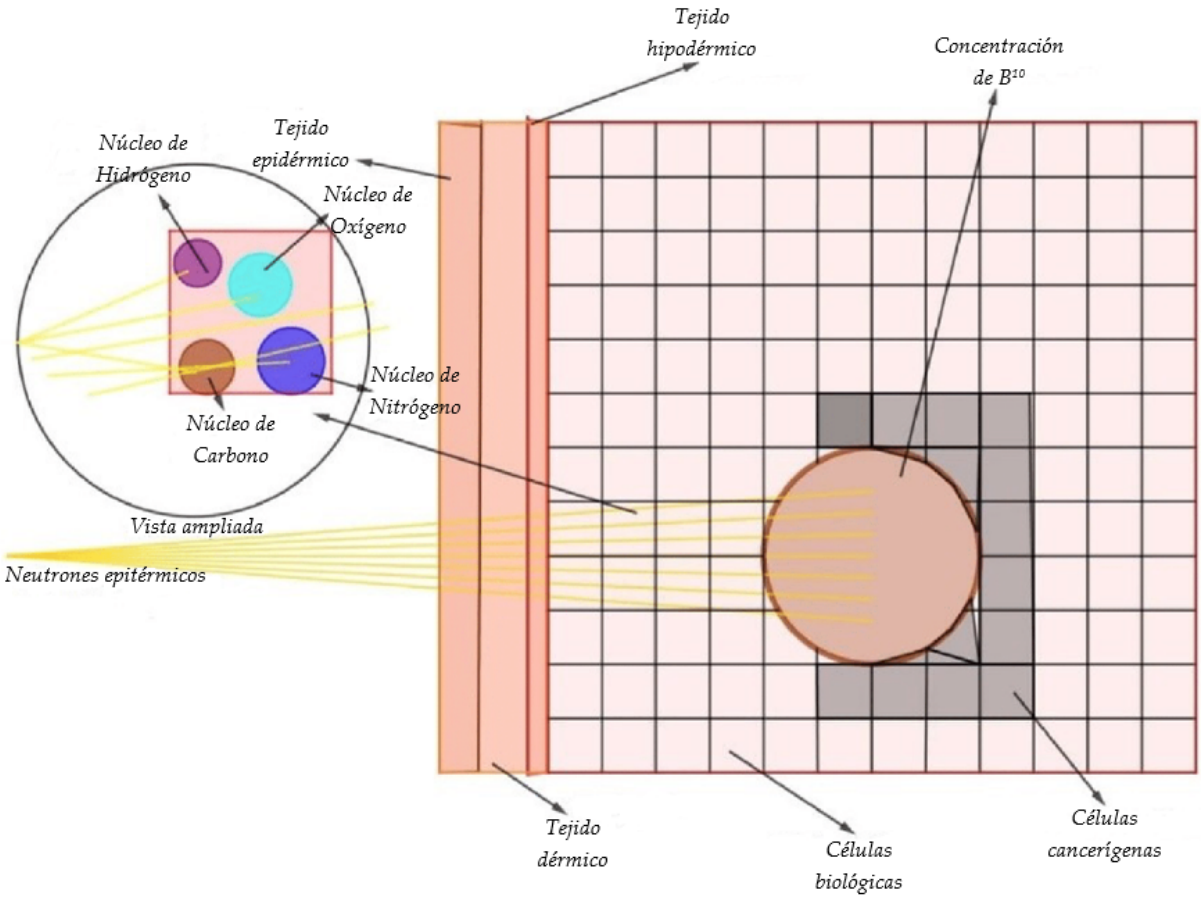


Figura 1.4: Ilustración del NCT con Boro y de los elementos más abundantes en el tejido humano. **Fuente:** [18].

Los neutrones que son capturados por estos elementos, dan lugar a reacciones nucleares que son necesarias identificar y estudiar para determinar sus correspondientes estados finales y así tener algún indicio de los posibles efectos que se pueden presentar a causa de estas reacciones. Por ejemplo, en la captura neutrónica por Oxígeno, la reacción final libera partículas γ las cuales pueden penetrar profundamente en el tejido causando daño en la médula ósea y en los pulmones, además de quemaduras profundas en la piel [19]. Dado el carácter abundante del O^{16} en el tejido (65 % de abundancia por fracción masa [17]), este trabajo se enfocará en particular en el estudio de la captura neutrónica por O^{16}. La reacción de interés por captura neutrónica es la siguiente:

$$n \ + \ O^{16} \ \rightarrow \ \gamma \ + \ O^{17} \tag{1.11}$$

Este estudio forma parte de otros estudios que al final se podrán combinar dado que

ya se analizó el hidrógeno y se está investigando el nitrógeno y el carbono, además se está realizando un trabajo con boro y gadolinio a nivel de maestría, debido a que sé desea entender lo que hacen los elementos principales que componen el tejido en la terapia de captura neutrónica por B^{10} y Gd^{157}.

1.6. Outline

El documento está dividido en cinco capítulos, en los cuales se hace una descripción de las reacciones nucleares, las fuentes de neutrones, los efectos biológicos producidos por la interacción de los neutrones en tejido, además se explica cuáles son los motivos para estudiar la cinemática de las partículas obtenidas en la reacción y el porqué es importante el cálculo de la deposición de energía y LET en los diferentes blancos, de la misma manera se discuten los resultados obtenidos a partir de la comparación con datos reportados en la literatura.

En el capítulo 1 se presenta las reacciones nucleares y la notación que se utiliza para referirse a ellas, se menciona cuáles son las fuentes de neutrones, cómo interactúan los neutrones con la materia y se da una mención al NCT y cómo se ve afectado por la captura neutrónica por O^{16}. El segundo capítulo está dedicado a los efectos biológicos producidos por las partículas del estado final cuando se propagan por el tejido humano.

En el tercer capítulo se exponen los resultados de la caracterización cinemática en un blanco puro de O^{16}, además se muestran las distribuciones tanto de energía como de ángulos polares y azimutales obtenidos en la simulación, entre otras. En el capítulo 4 se lleva a cabo el cálculo de la deposición de energía y LET en dos diferentes phantoms (maniquís). Estos resultados son comparados con los reportados en la literatura para conocer si son dañinos para el cuerpo humano.

Finalmente, en el capítulo cinco se presentan las conclusiones obtenidas tanto de la caracterización cinemática como de la deposición de energía y LET de las partículas del estado final en diferentes blancos y además se menciona si estas dos últimas cantidades son o no prejudiciales para el tejido humano.

En los anexos se incluyen las diferentes distribuciones que se obtuvieron para las diferentes energías del haz de neutrones (0,220, 0,415, 0,610, 0,805 y 1) eV, asimismo se presenta que es Geant4, sus aplicaciones y los aspectos importantes que componen una simulación en esta herramienta computacional y en el último anexo se presenta los cálculos analíticos del valor Q utilizando las energías cinéticas medias de las partículas del estado final junto con el cálculo dos a dos de las energías cinéticas de estas partículas con el fin de validar y corroborar las cantidades encontradas con Geant4 dado que no hay datos experimentales en la literatura.

Capítulo 2

Efectos Biológicos

2.1. Efectos biológicos del haz de neutrones

Cuando el haz de neutrones entra en contacto con las partículas que componen el tejido humano, interactúan liberando partículas secundarias, las cuales depositan energía en el medio en el que se encuentran, afectando biológicamente las zonas circundantes.

Las interacciones causantes de depositar y dispersar la energía en el medio corresponden a: *colisiones inelásticas* y *colisiones elásticas*. En las colisiones inelásticas, la E_K total no se conserva, por lo que es absorbida como energía de excitación, ionización, desintegración del núcleo o creación de partículas. En colisiones elásticas, la E_K total del blanco y del proyectil se conserva, por lo que genera un cambio en la dirección del haz [20].

2.1.1. Deposición de Energía

Se define como la energía depositada en una interacción, se mide en eV [21] y se puede encontrar con:

$$\varepsilon_i = \varepsilon_{en} - \varepsilon_{sal} + Q \tag{2.1}$$

donde ε_{en} es la energía de la partícula ionizante incidente (excluyendo la energía en reposo), ε_{sal} es la suma de las energías de todas las partículas ionizantes cargadas y no cargadas que salen de la interacción (excluida la energía en reposo) y Q es el cambio en las energías en reposo del núcleo y de todas las partículas implicadas en la interacción.

2.1.2. Transferencia Lineal de energía (LET)

El LET o poder de frenado restringido para partículas cargadas de un tipo y energía determinados, se define como el cociente de ΔE_L dividido por Δx, donde ΔE_L es la energía promedio impartida localmente al medio por las partículas cargadas debido a interacciones electrónicas que atraviesan una distancia Δx y se utiliza en radiobiología y protección radiológica para especificar la calidad de un haz de radiación ionizante [21] [7]. Hay dos categorías distintas de radiación ionizante [9]:

1. *Radiación LET baja* (también denominada poco ionizante).

2. *Radiación LET alta* (también denominada densamente ionizante).

Ahora, ¿en qué se diferencia el LET del término potencia de frenado que se utiliza habitualmente en física? Comparado con la potencia de frenado, que centra su atención en la pérdida de energía por una partícula cargada que se mueve a través de un absorbente, el LET se centra en la tasa lineal de absorción de energía por el medio absorbente cuando la partícula cargada lo atraviesa. El LET se mide en keV/μm con 10 keV/μm de separación entre el de LET poco ionizante del LET densamente ionizante [7]. Para calcular el LET se utiliza:

$$LET = \frac{\Delta E_L}{\Delta x} \tag{2.2}$$

donde:

- ΔE_L es la energía promedio perdida por las partículas cargadas debido a interacciones electrónicas al atravesar cierta distancia.

- Δx es la distancia atravesada por las partículas.

Para el caso de electrones, se calcular esa energía promedio perdida, utilizando dos formulaciones:

- Cálculo de Bohr usando argumentos clásicos.

- Fórmula de Bethe – Bloch, que usa argumentos cuánticos.

En la Tabla 2.1 se muestra la Transferencia Lineal de Energía asociada a diferentes partículas de interés en radioterapia en un blanco de agua [22]:

Radiación		**Carga**	**Masa**	**Energía MeV**	**LET** $[KeV/\mu m]$
Electrón		-e	1 m_e	0.01 0.1 1	2.30 0.42 0.25
Fotón		0	0	^{60}C - rayos γ	0.2 - 2
Neutrón		0	1839 m_e = 1.0009 u	14	3 - 30
Próton		+e	1836 m_e = 1.0008 u	2 5 10 200	16 8 4 0.4
Partículas α He^{+2}		+2e	2 u	5	95
Núcleos de Carbono C^{+6}		+6e	6 u	10 - 25 MeV/u	14 - 170
^{20}Ne		+10e	20 u	525 MeV/u	50
^{40}Ar		+18e	40 u	730 MeV/u	150
BNCT	^{4}He	+1e	4 u	7 μm	150
	^{7}Li	+1e	7 u	5 μm	150

Tabla 2.1: Transferencia de Energía Lineal asociada a diferentes partículas de interés en radioterapia en un blanco de agua. **Fuente:** [22] y [23].

Se debe tener en cuenta que a cada tipo de radiación se le asigna un factor de ponderación ω_R (o factor de calidad) que indica su eficacia biológica relativa (RBE, por sus siglas en inglés) (Ver la subsección 2.1.6). La tabla 2.2 enumera este factor para varios tipos diferentes de radiación. Por lo tanto, para dosis absorbidas iguales, las partículas α pueden considerarse aproximadamente cuatro veces más dañinas que los protones, y 20 veces más dañinas que los electrones o fotones.

2.1.3. Dosis Absorbida

Por definición, la dosis absorbida la cual se simboliza con D, en ocasiones llamada simplemente como dosis, es la relación entre la energía total absorbida "E_{ab}" impartida por la irradiación a un pequeño volumen (tejido) y la masa m de este volumen de material. La relación (Ver ecuación 2.3) se mide en Gray (Gy), 1 Gy equivale a 1 J/kg [22].

$$D = \frac{dE_{ab}}{dm} \tag{2.3}$$

Tipo de Radiación con su energía	**Factor de ponderación ω_R**
Fotones, para cualquier energía	1
Electrones y Muones, para cualquier energía	1
Neutrones <10 KeV 10 KeV a 100 KeV >100 KeV a 2 MeV >2 MeV a 20 MeV >20 MeV	 5 10 20 10 5
Protones, distintos de los protones de retroceso, energía >2 MeV	5
Partículas alfa, fragmentos de fisión, núcleos pesados	20

Tabla 2.2: Factores de ponderación ω_R. **Fuente:** [20].

2.1.4. Dosis Equivalente

La dosis equivalente "$H_{T,R}$", donde T es para tejido y R para tipo de radiación, es el producto de la dosis absorbida para un tipo de radiación "D_R" y el factor de ponderación de la radiación "ω_R" el cual depende del tipo de radiación (Ver tabla 2.2) [7]; su unidad de medida es el Sievert (Sv) y se calcula con:

$$H_{T,R} = D_R \times \omega_R \tag{2.4}$$

La dosis equivalente da un valor significativo con respecto a la dosis absorbida. Sin embargo, el valor no representa una medida exacta de los síntomas que se refleja en el cuerpo de la dosis que es absorbida, por lo que se establece un rango en el cual se muestra en donde comienza a ser importante la dosis que se absorbe. La Tabla 2.3 muestra los rangos de la dosis equivalente en los cuales se empieza a presentar alteraciones en el cuerpo humano.

2.1.5. Dosis Efectiva

La probabilidad de desarrollar efectos biológicos como cáncer o anomalías genéticas debido a la radiación también depende del órgano o tejido específico que recibe la radiación. Por lo anterior, se define un factor de ponderación tisular ω_T, para los distintos órganos humanos, estos se muestran en la tabla 2.4. Hay que tener en cuenta que los

Dosis Equivalente (Sv)	**Efectos**
$<$ 0,25	Ninguno
0,25 - 1	Náuseas, pérdida de apetito y daño en medula ósea o bazo.
1 - 3	Náuseas leves y agudas, pérdida de apetito, infección, pérdida de médula ósea severa, daños en ganglios linfáticos y bazo.
3 - 6	Náusea severa, pérdida de apetito, hemorragias, infección, diarrea, descamación, esterilidad y muerte si no se trata a tiempo.
6 - 10	Mismos síntomas, deterioro del sistema nervioso central y muerte si no se trata a tiempo.
$>$ 10	Parálisis y muerte.

Tabla 2.3: Rangos de dosis equivalente y sus efectos biológicos. **Fuente:** [3].

factores de ponderación del tejido son totalmente independientes del tipo de radiación y la energía (al igual que los factores de ponderación de la radiación son independientes del tipo de tejido) [3]. Usando estos factores, la dosis efectiva E, se define como:

$$E = \sum_{T} \omega_T \times H_T \tag{2.5}$$

Donde la suma es sobre los diferentes tejidos y órganos expuestos. Se ha descubierto que la dosis efectiva se relaciona con las probabilidades de desarrollar efectos como el cáncer y, al igual que la dosis equivalente, se mide en unidades de Sieverts. Los diferentes valores de ω_T se presentan en la siguiente tabla:

Tejido u Órgano	**Factor de ponderación tisular**
Gónadas	0,20
Médula ósea	0,12
Colon	0,12
Pulmón	0,12
Estómago	0,12
Vejiga	0,05
Mama	0,05
Hígado	0,05
Esófago	0,05
Tiroides	0,05
Piel	0,01
Superficie ósea	0,01

Tabla 2.4: Factores de ponderación tisular ω_T. **Fuente:** [3].

2.1.6. Efectividad Biológica Relativa (RBE):

La eficacia biológica relativa (RBE) de una radiación en particular, es la relación entre la dosis absorbida de una radiación de referencia "D_R", y la dosis absorbida de la radiación particular que se está examinando "D_x", que es necesario para alcanzar el mismo nivel de efecto biológico; para encontrar el RBE se utiliza [7]:

$$RBE_x = \frac{D_R}{D_x} \tag{2.6}$$

2.1.7. Fluencia

La fluencia de partículas, Φ, se define como el cociente de dN dividido por da, donde dN es el número de partículas que entran en una esfera de área transversal a:

$$\Phi = \frac{\Delta N}{\Delta a} \tag{2.7}$$

La definición requiere una interpretación tridimensional, ya que el número de partículas se define como las partículas que entran en una esfera de sección transversal a, y por tanto la dirección de la que proceden las partículas no es una condición limitante. Se mide en unidades de m^{-2} [7] y [21]

2.1.8. Poder de Frenado (Stopping Power)

El poder de frenado es un parámetro utilizado para describir la pérdida de energía de una partícula cargada, mientras esta se desplaza a través de un medio material. Se conocen dos tipos de poder de frenado: el poder de frenado por colisión (Collision stopping power) que resulta de las interacciones de las partículas con los diferentes electrones y el poder de frenado por radiación (Radiation stopping power) que está relaciona directamente con la interacción de las partículas con los núcleos atómicos [17]

La pérdida de energía, expresada en MeV/cm, para una partícula se le conoce como poder de frenado lineal ($-dE/dx$), del cual se obtiene el poder de frenado másico o específico S, que ésta relacionado con el LET por medio de la siguiente ecuación [24]:

$$S_{el} = -\frac{1}{\rho}\frac{dE}{dx} \tag{2.8}$$

Nota: *Es importante entender estas cantidades, ya que la radiación causa efectos nocivos y es debido a esto que se utilizan generalmente en radioterapia para determinar los daños causados en el cuerpo.*

Capítulo 3

Caracterización Cinemática del estado final

La idea detrás de la caracterización cinemática, es entender el comportamiento de las partículas del estado final dentro de un blanco puro de O^{16}, además de cuál debe ser el haz de neutrones adecuado, la geometría ideal para que se lleve a cabo la reacción y finalmente cuáles deben ser las condiciones de contorno para obtener una estadística óptima en la captura neutrónica por O^{16}. Con el fin de cubrir un amplio espectro de energía para el haz de neutrones, se manejaron energías distribuidas de la siguiente manera: 0.025 eV, 0.220 eV, 0.415 eV, 0.610 eV, 0.805 eV y 1 eV. El rango utilizado coincide con el rango en el que se encuentran los neutrones térmicos y epitérmicos.

En aras de mostrar las diferentes distribuciones realizadas en la caracterización, se toma como referencia el valor específico de energía de 25 meV. Las cantidades correspondientes para los otros valores de energía tenidos en cuenta se podrán encontrar en el apéndice A.6.

3.1. Geometría de la Simulación

La geometría implementada en la simulación consiste en un volumen principal (world volumen), el cual tiene una forma cúbica que en su interior contiene vacío y tiene unas dimensiones de (4, 4, 4) km en los tres ejes coordenados. En su interior tiene un volumen concéntrico conformado por O^{16} (blanco o target) con dimensiones de (2, 2, 2,) km, la cara lateral izquierda del blanco se encuentra ubicada en el centro geométrico del volumen principal (véase la figura 3.1). Las dimensiones de la geometría se implementaron con el

fin de obtener una estadística óptima para la construcción de las diferentes distribuciones de interés y para garantizar la captura neutrónica por el blanco de O^{16}.

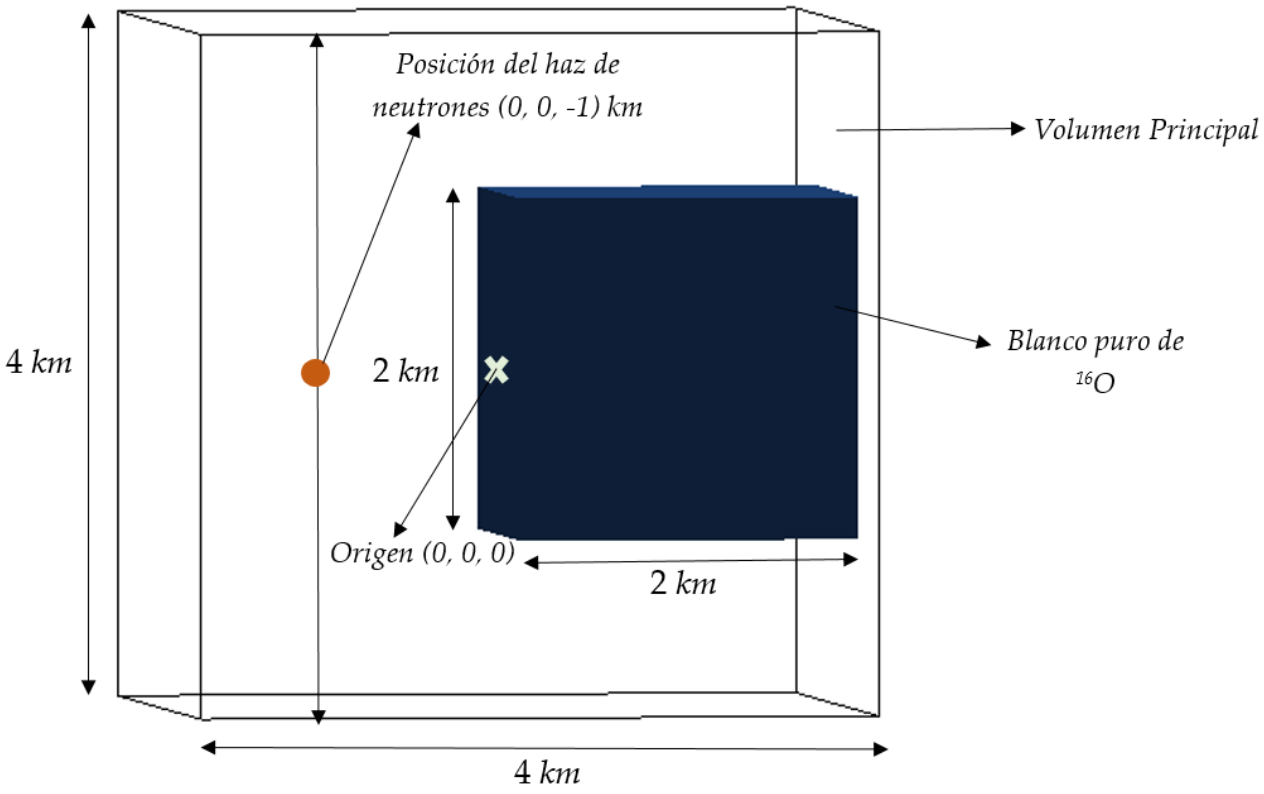


Figura 3.1: Geometría implementada en la simulación. **Fuente:** [Autor].

3.2. Evento Primario y Lista de Física de la simulación

La fuente primaria consiste de un haz puntual, monoenergético y unidireccional (sobre el eje z) de neutrones térmicos de 25 meV, el cual está ubicado en la posición (0, 0, -1) km con respecto al centro geométrico del volumen principal. El haz de neutrones incide a lo largo del eje +Z sobre el volumen de O^{16}, esta interacción produce la captura neutrónica generando partículas γ y O^{17}. Las librerías que permiten simular las interacciones electromagnéticas y de captura son: *G4EmStandardPhysics* que cuenta con una variedad de herramientas y modelos de interacción electromagnética para distintos tipos de partículas y procesos de interacción como dispersión Compton, efecto fotoeléctrico, producción de pares, entre otros y *G4HadronPhysicsQGSP_BIC_HP* la cual adopta un paquete de neutrones de alta precisión *(HP)* para describir las interacciones de neutrones de energías térmicas de hasta 20 MeV [25].

3.3. Resultados obtenidos de la Caracterización

Cuando el haz neutrones es generado, debe recorrer el camino correspondiente hasta alcanzar su objetivo, con el cual interactúa y genera la reacción nuclear mostrada en la figura 3.2.

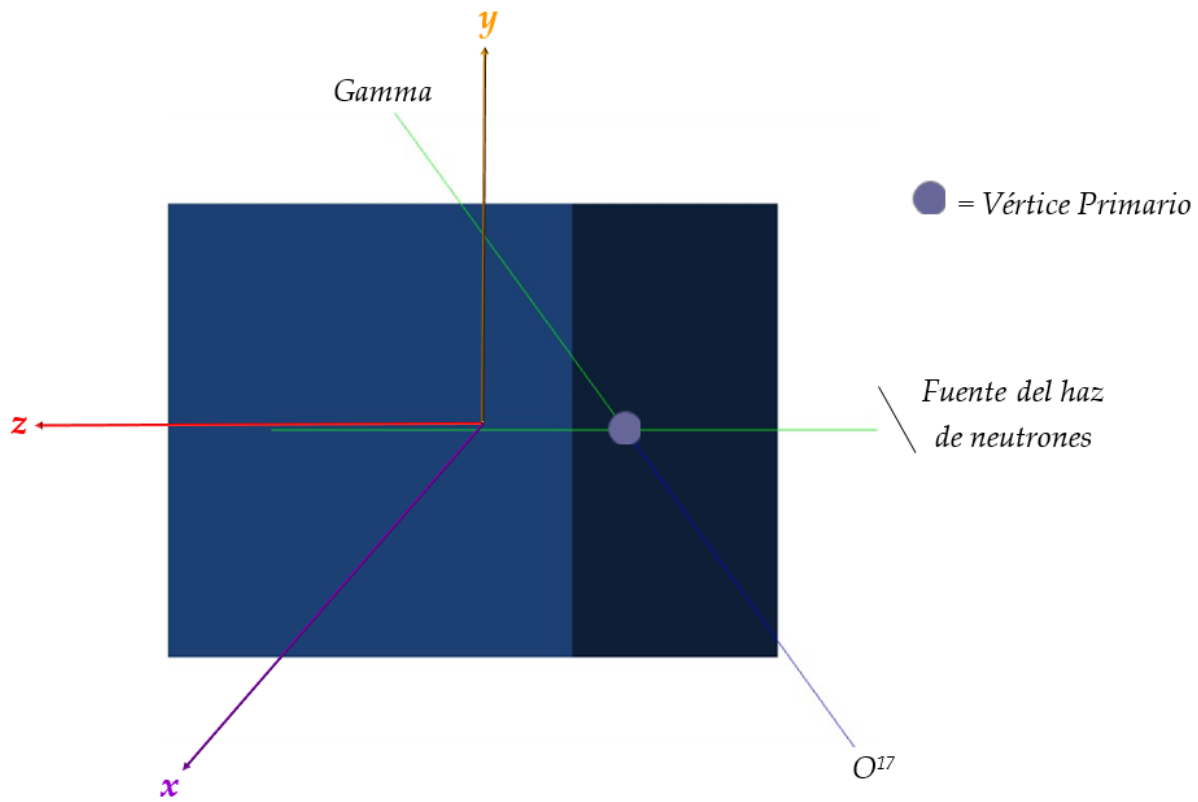


Figura 3.2: Vista de las partículas generadas cuando el haz de neutrones interactúa con un blanco puro de O^{16}. **Fuente:** [Autor].

Hay cierto porcentaje del haz de neutrones que no interactúan, solo se mueven a través del blanco y por lo tanto no son capturados, logrando traspasar por completo el blanco de O^{16} sin realizar ningún proceso nuclear en su recorrido como se muestra en la Figura 3.2. Por último, para realizar las diferentes distribuciones y el cálculo del error asociado a las cantidades de interés: energía, momento, ángulo polar y azimutal, posición, velocidad y valor Q que se van a presentar en las subsecciones siguientes, se modificó la semilla del Monte Carlo que usa Geant4 para generar números aleatorios con el fin de obtener diferentes valores de las cantidades ya mencionadas, posteriormente se ejecutó la simulación 10 veces para cada valor de energía del haz de neutrones. Los datos obtenidos para O^{17} y γ y se presentan en las tablas 3.1 y 3.2 para energía del haz de 0,025 eV:

Ensayo	Neutrones capturados	Energía media (KeV)	Momento medio (MeV/c)	Ángulo Polar medio Θ (°)	Ángulo Azimutal Φ (°)*	Vértice Primario (km)*
1	41777	0,542204	4,14308	89,9981	-0,820004	0,99355
2	41792	0,542235	4,432	89,6489	-0,41445	1,00233
3	41653	0,542151	4,14288	90,1015	0,839885	1,00068
4	41525	0,542152	4,14289	89,9392	-0,225774	1,00089
5	41765	0,542173	4,14297	89,8294	0,696297	0,997644
6	41602	0,542214	4,14312	89,6352	-0,554273	0,998825
7	41182	0,542222	4,14315	90,0152	-0,0680478	0,994595
8	41395	0,542173	4,14297	89,7833	-0,378343	0,997694
9	41415	0,542188	4,14302	89,6366	-0,692192	1,00548
10	41654	0,542175	4,14297	89,9716	0,189935	1,00241

Tabla 3.1: Cantidades obtenidas del O^{17} para energía del haz de 0,025 eV para 20'000.000 de eventos. La última columna representa la posición en la cual se produce la captura neutrónica. *Los valores para ángulo azimutal y de vértice primario corresponden a valores medios de los histogramas. **Fuente:** [Autor].

Ensayo	Neutrones capturados	Energía media (KeV)	Momento medio (MeV/c)	Ángulo Polar medio Θ (°)	Ángulo Azimutal Φ (°)*	Vértice Primario (km)*.
1	41777	4,14255	4,14255	89,8605	0,439187	0,99355
2	41792	4,14255	4,14255	90,2059	0,326564	1,00233
3	41653	4,14255	4,14255	89,7596	-0,904129	1,00068
4	41525	4,14255	4,14255	89,9143	0,654155	1,00089
5	41765	4,14255	4,14255	90,027	-0,325599	0,997644
6	41602	4,14255	4,14255	90,128	0,350577	0,998825
7	41182	4,14255	4,14255	89,8332	0,376704	0,994595
8	41395	4,14255	4,14255	90,0734	0,554238	0,997694
9	41415	4,14255	4,14255	90,2141	0,632342	1,00548
10	41654	4,14255	4,14255	89,8812	-0,0257893	1,00241

Tabla 3.2: Cantidades obtenidas de las partículas γ para energía del haz de 0,025 eV para 20'000.000 de eventos. La última columna representa la posición en la cual se produce la captura neutrónica. *Los valores para ángulo azimutal y de vértice primario corresponden a valores medios de los histogramas. **Fuente:** [Autor].

Con las tablas 3.1 y 3.2, se encuentra la incertidumbre de la media de la energía obtenida y de las demás cantidades de interés para energía del haz de 0.025 eV de la siguiente manera [26]:

$$\delta x \;=\; \sigma_{\bar{x}} \;=\; \frac{\sigma_x}{\sqrt{N}} \tag{3.1}$$

Pero σ_x se calcula como sigue [26]:

$$\sigma_x \;=\; \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{N-1}} \tag{3.2}$$

donde N es la cantidad de veces que se ejecutó la simulación (10 veces), x_i es la cantidad

de interés que se consiguió cada vez que se puso en funcionamiento la simulación y $\bar{x}$ es la media de la cantidad de interés, por lo que estas se escribirán como sigue:

$$x_{cantidaddeinters} = \bar{x} \pm \delta x \tag{3.3}$$

3.3.1. Número de neutrones capturados de acuerdo a su energía

En el proceso de captura neutrónica por parte del blanco de O^{16} se produce la reacción $O^{16}\,(n,\gamma)\,O^{17}$, la cual concuerda con una simulación preliminar llevada a cabo en Geant4, construida especialmente para la captura de neutrones (ver [27], 10.3.11 Hadronic, Hadron04). Como la sección transversal del O^{16} es de 0,00001 barns [28], la captura de neutrones no es muy numerosa, por este motivo se efectúan 20'000.000 millones de eventos para que haya captura por parte del blanco. La siguiente gráfica muestra cómo disminuye el número de reacciones de captura que se dan cuando se aumenta la energía del haz de neutrones incidentes:

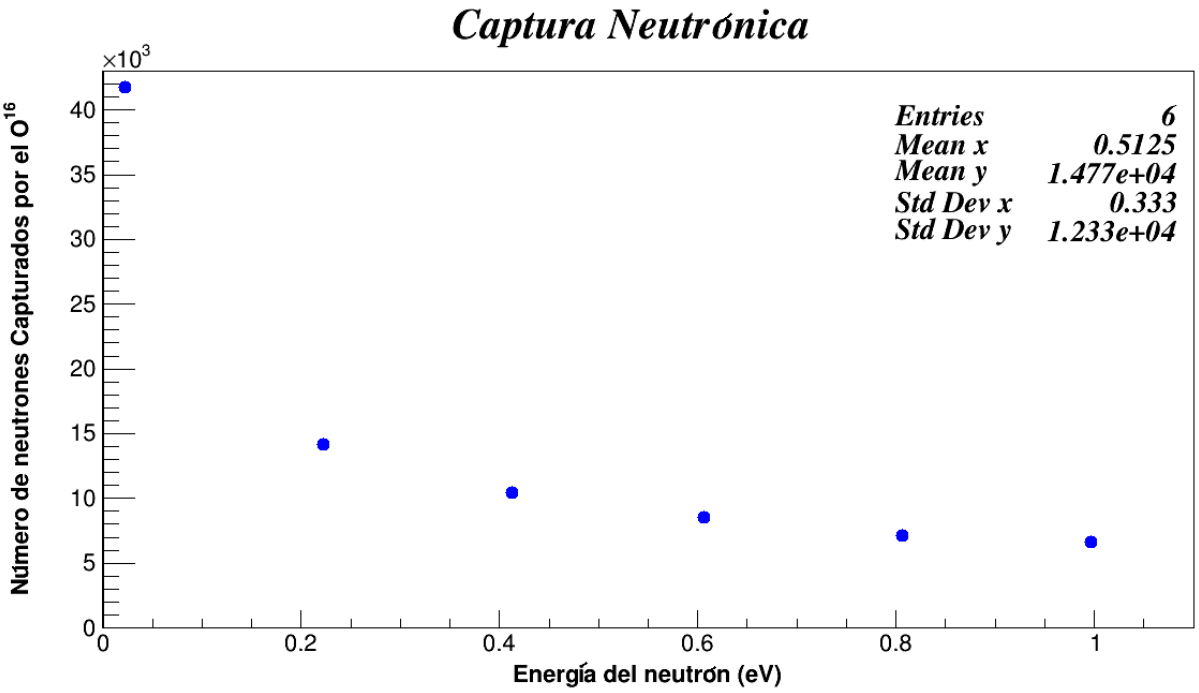


Figura 3.3: Número de Capturas en función de la energía del haz. De izquierda a derecha los diferentes grupos de energía corresponden a: 0,025 eV, 0,220 eV, 0,415 eV, 0,610 eV, 0,805 eV y 1 eV. **Fuente:** [Autor].

Esto se debe a que la sección transversal disminuye con el aumento de energía y por ende el haz de neutrones atraviesa el blanco sin dificultad y sin interactuar con su entorno,

debido a esto la mejor energía para llevar a cabo los análisis de distribución es con la de 25 meV, ya que es donde se presenta la mayor captura neutrónica (ver figura 3.3).

3.3.2. Distribución de energía del estado final

En la figura 3.4 se muestra la distribución de energía cinética de las partículas del estado final (O^{17} y γ) las cuales son emitidas con energías medias de 0,0005422 MeV y 4,143 MeV respectivamente. Como se puede observar, son capturados 41.777 neutrones de 20'000.000 que son generados, esto se debe a la sección eficaz del O^{16} como ya se ha mencionado anteriormente. El ancho de las gráficas es del orden de 1×10^{-5} eV y 1×10^{-6} eV, esto indica que la energía emitida tanto de las partículas γ como de los O^{17} tiene un carácter monoenergético.

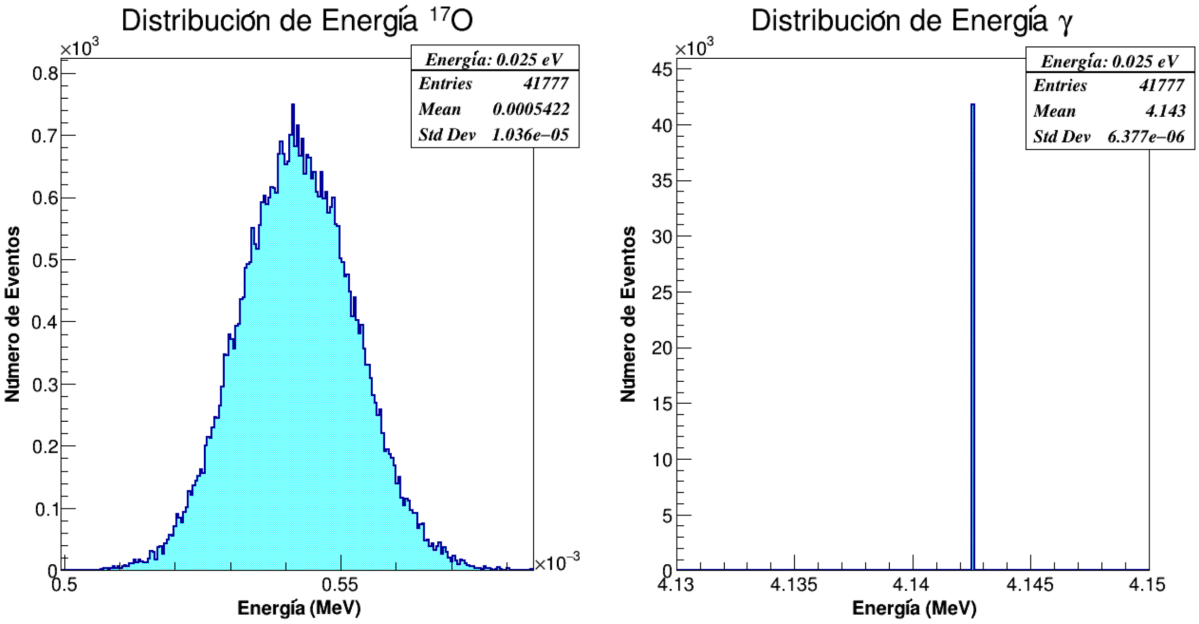


Figura 3.4: Distribución de energía cinética para los O^{17} (izquierda) y γ (derecha) para neutrones incidentes con energía de 0,025 eV. El ancho de la distribución es del orden de los 10^{-5} y 10^{-6} eV, lo que indica que la energía de las partículas tiene un carácter monoenergético tanto para el O^{17} como para los γ. **Fuente:** [Autor]..

El error asociado a la gráfica de distribución de energía para la partícula O^{17} (panel izquierdo) se muestra en la figura 3.5, en ella se puede observar que las barras de error en el eje Y son pequeñas y se debe a que la energía media a la que es emitido el O^{17} empieza a cambiar a partir de la diezmilésima parte decimal (ver tabla 3.1), esto indica que el cambio que se da en la energía es despreciable, adicionalmente esta gráfica se ajusta con un polinomio de grado 0, cuya función asociada tiene la forma de una constante: $y = c$.

En la figura 3.5, las barras de error en el eje Y se ven altas, pero esto se debe a la escala que se está manejando, como el ajuste que se realizó es constante, esto muestra y apoya la idea de que la energía media obtenida del O^{17} no cambia significativamente con respecto a la energía del haz de neutrones.

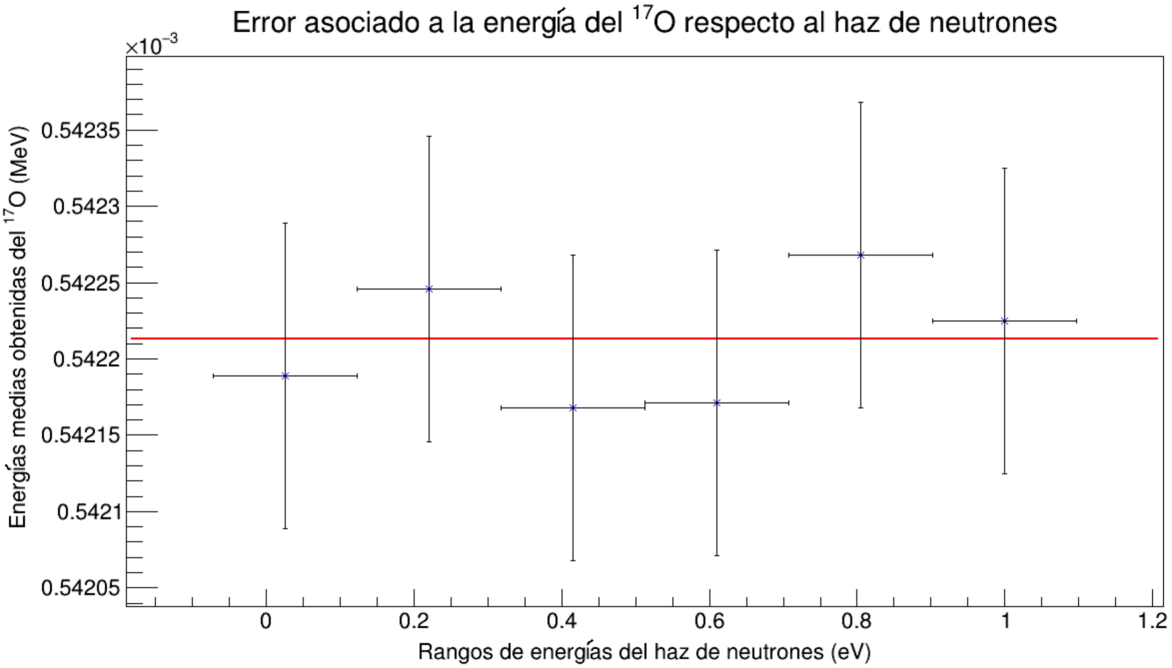


Figura 3.5: Error en la distribución de energía del O^{17} para diferentes energías del haz de neutrones incidentes. La línea roja muestra el ajuste con un polinomio de orden 0, cuyo valor corresponde a $0{,}000542213 \pm 3,77964 \times 10^{-8}$ MeV y representa el valor medio de la energía en todo el rango desde 25 meV hasta 1 eV, además la barra de error es calculada por Root haciendo uso de la desviación estandar. **Fuente:** [Autor].

De acuerdo a la información de la tabla 3.1 y a los cálculos realizados a partir de las ecuaciones (3.1) y (3.2), la energía del O^{17} junto con su incertidumbre usando un haz de neutrons de 25 meV de energía es:

$$E_{O^{17}} \;=\; 0,54219 \;\pm\; 9,17545 \times 10^{-6}\; keV \tag{3.4}$$

Hay que tener en cuenta que la incertidumbre en la ecuación (3.4), corresponde a la desviación estándar de la media y se diferencia la barra de error de la figura 3.5 en que esta última se encuentra con la desviación estándar en el rango de 25 meV, de ahí la diferencia en factor de 10 entre la ecuación y la figura. Como se puede observar, el error porcentual asociado con la energía cinética media del O^{17} es menor al 0,01 %. Ahora, para la partícula γ se puede observar en la tabla 3.2, que su energía cinética media no cambia

en ningún ensayo que se hace cuando se cambia la generación de números aleatorios, por lo que se puede escribir junto con su incertidumbre como sigue:

$$E_\gamma \ = \ 4142,55 \ \pm \ 6,38 \times 10^{-3} \ keV \tag{3.5}$$

3.3.3. Distribución de momento del estado final

En la figura 3.6 se observa la distribución de momento de los productos finales (O^{17} y γ respectivamente) de la reacción nuclear: $n \ + \ O^{16} \rightarrow \ \gamma \ + \ O^{17}$. La distribución de ambas partículas es discreta y tiene el mismo valor medio sin importar el valor de energía del haz incidente (ver A.3), lo que conlleva a que la diferencia de los momentos (tercera gráfica de izquierda a derecha) se distribuye alrededor de cero, lo cual indica que las partículas se producen en el sistema de laboratorio con un momento de igual magnitud.

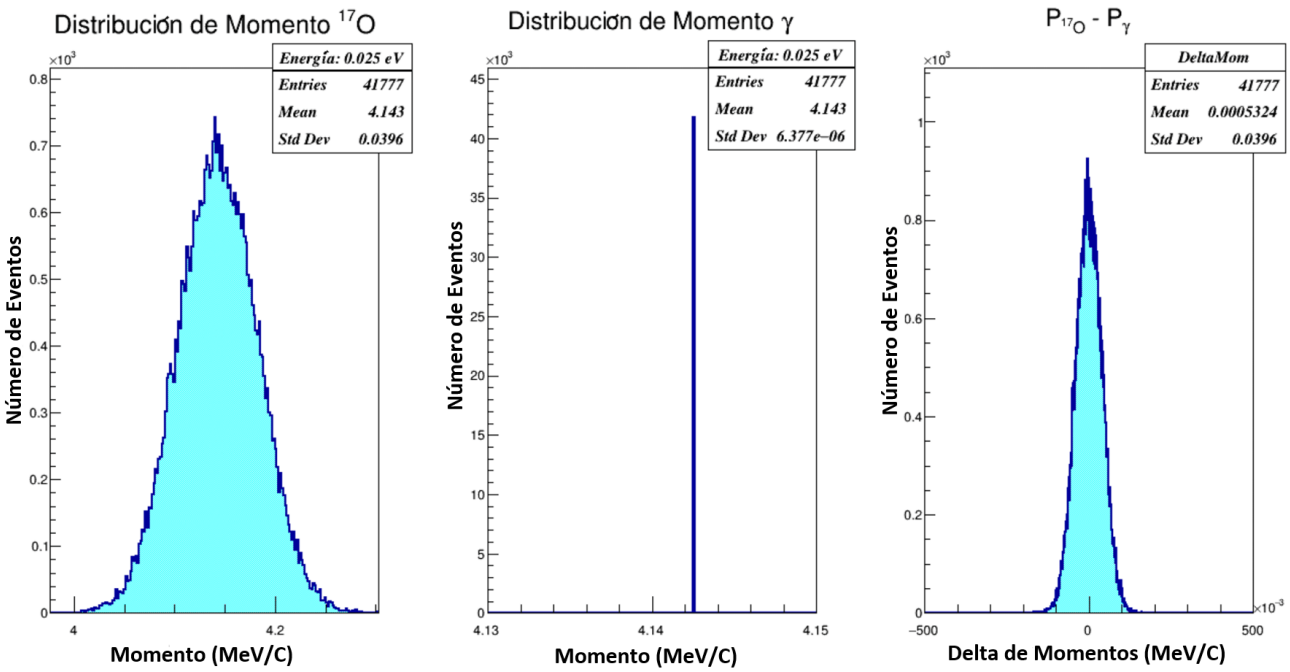


Figura 3.6: Distribución de momento en O^{17} (izquierda) y γ (centro) con neutrones incidentes con energía de 0,025 eV. El histograma de la derecha representa la diferencia de momento entre O^{17} y γ que se distribuye alrededor de cero.**Fuente:** [Autor].

La gráfica que muestra el error en la distribución de momento para el O^{17}, se puede observar en la figura 3.7, las barras de error verticales se ven bastantes grandes, pero esto se debe a la escala que se maneja; como se puede ver, el cambio del momento del O^{17} es prácticamente despreciable, también a esta gráfica se le realiza un ajuste con un polinomio de grado 0, cuya función es una constante.

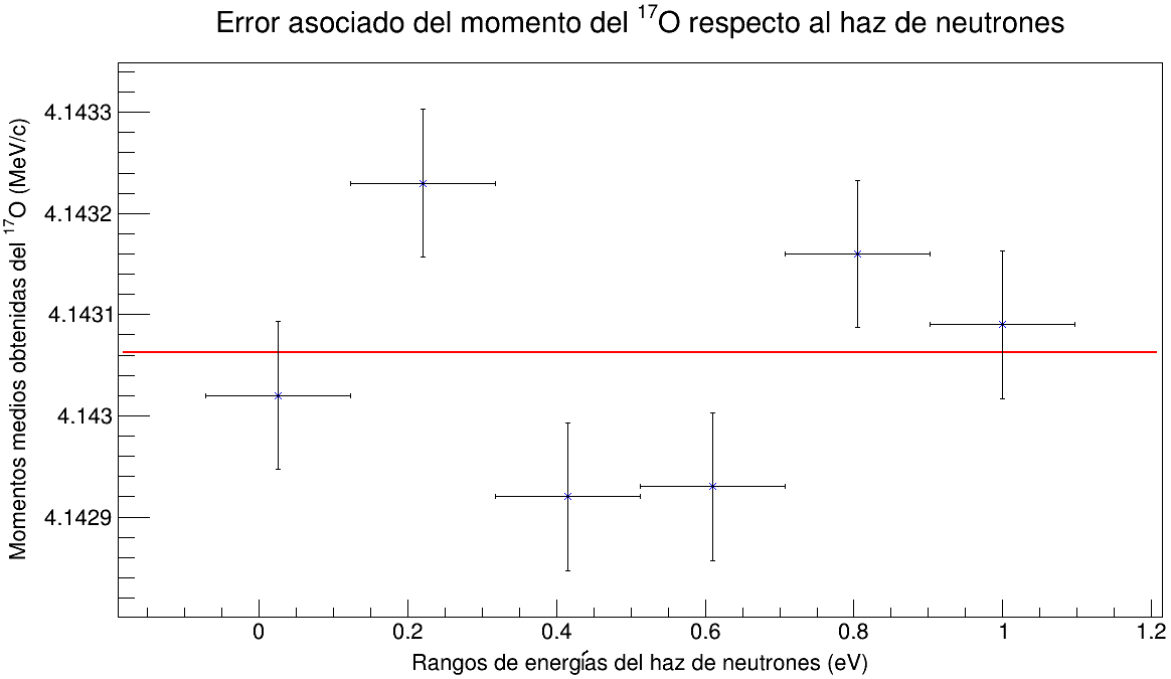


Figura 3.7: Error en la distribución de momento del O^{17}. La línea roja representa el ajuste con un polinomio de orden 0, cuyo valor corresponde a $4,14306 \pm 2,75914 \times 10^{-5}$ MeV/c. y representa el valor medio del momento en todo el rango desde 25 meV hasta 1 eV, además la barra de error es calculada por Root haciendo uso de la desviación estandar. **Fuente:** [Autor].

Para calcular el error del momento, se sigue el mismo procedimiento que para el error en la energía y representa el valor medio del momento para 25 meV, teniendo en cuenta los datos obtenidos en la tabla 3.1:

$$M_{O^{17}} \ = \ 4,143025 \ \pm \ 3,442383 \times 10^{-5} \ MeV/c \tag{3.6}$$

Si bien, el momento del γ no cambia cuando se utiliza un haz de nuetrones de 25 meV (ver tabla 3.2), su valor medio con su incertidumbre es:

$$M_{\gamma} \ = \ 4,143 \ \pm \ 6,377 \times 10^{-6} \ MeV/c \tag{3.7}$$

3.3.4. Distribuciones angulares (Θ y Φ) del estado final

La relación angular entre las partículas del estado final (O^{17} y γ) se presentan en la figura 3.8, se puede observar que en las distribuciones polares para ambas partículas se presenta un valor medio de 90° y la distribución en el ángulo azimutal es uniforme, lo cual refleja que no existe dependencia azimutal en la reacción.

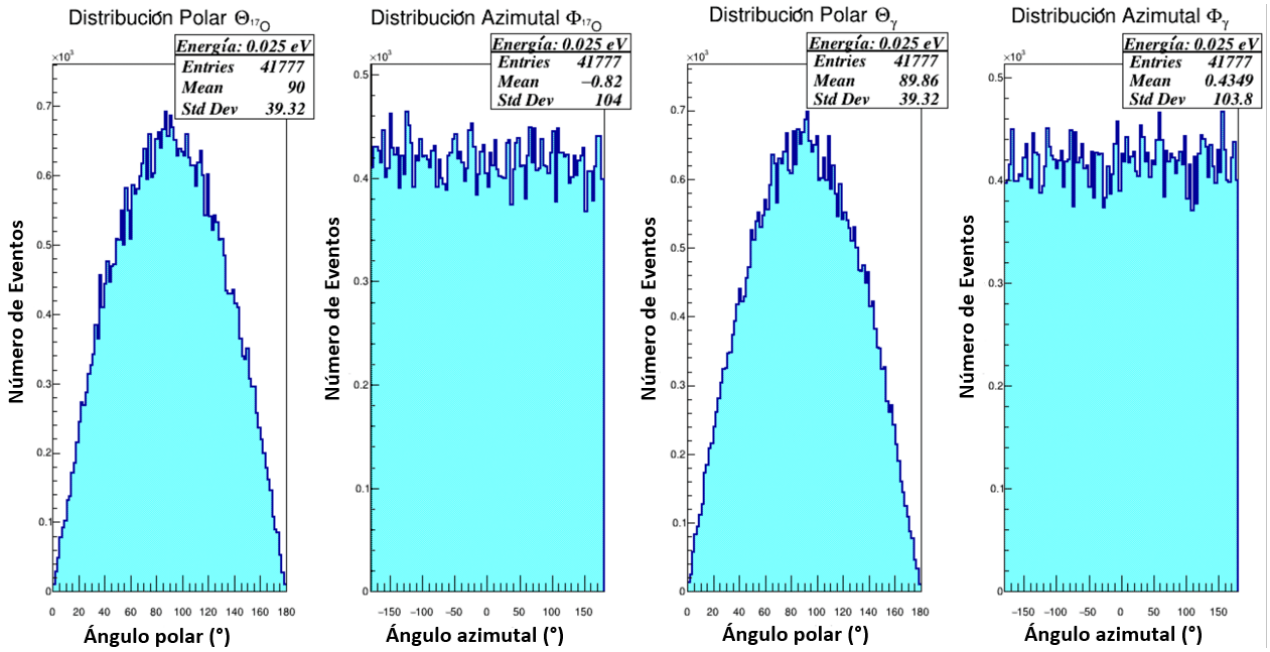


Figura 3.8: Distribución del ángulo polar y azimutal en O^{17} y γ con neutrones incidentes con energía de 0,025 eV.**Fuente:** [Autor].

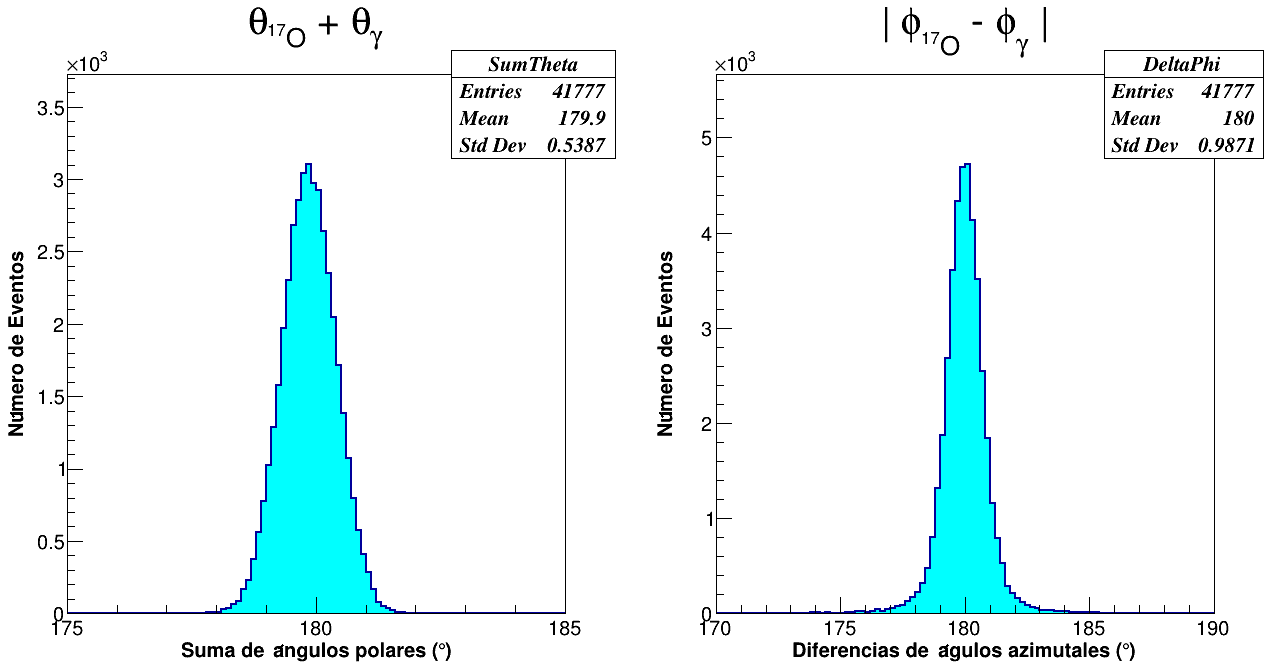


Figura 3.9: Suma y diferencia del ángulo polar (izquierda) y el ángulo azimutal (derecha) para O^{17} y γ con neutrones incidentes con energía de 0,025 eV. **Fuente:** [Autor].

Las distribuciones de la suma y la diferencia en el ángulo polar y azimutal para O^{17} y γ son presentadas en la figura 3.9. El valor medio en cada caso equivale a 180°, con un ancho alrededor de cero, esto evidencia la forma en que las partículas son emitidas en el sistema laboratorio: de manera opuesta o *back to back*, como se observa a continuación.

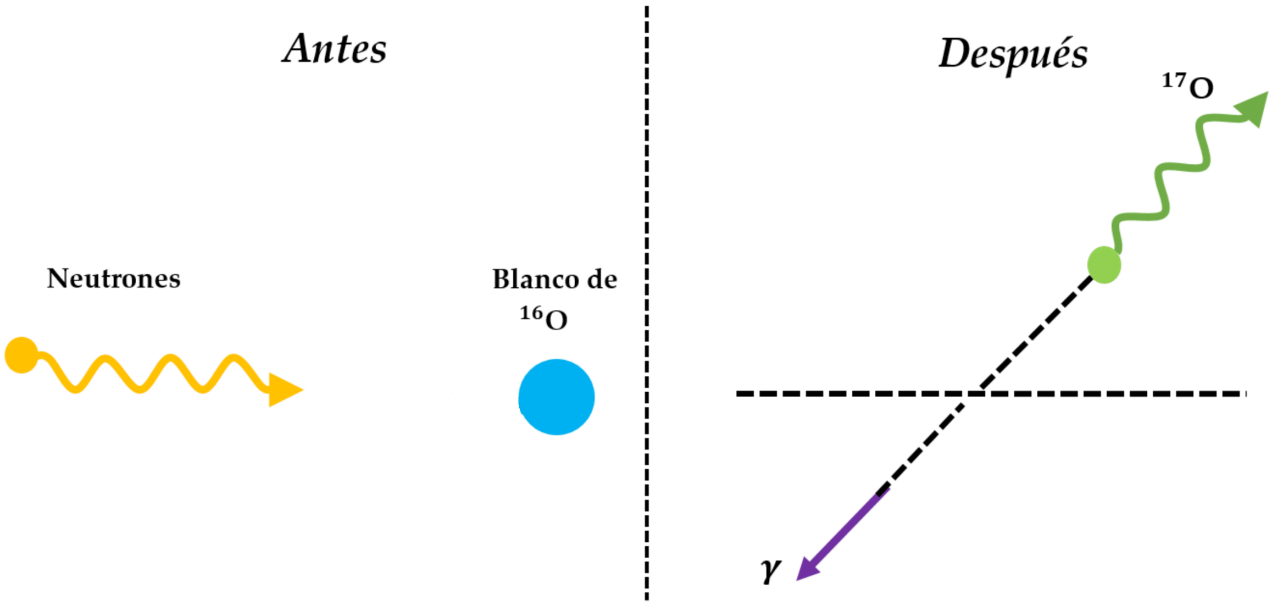


Figura 3.10: Reacción y emisión *back to back* de los O^{17} y γ con neutrones incidentes con energía de 0,025 eV en el sistema laboratorio. **Fuente:** [Autor].

Se toma la suma y la diferencia de ángulos respectivamente, porque son las que muestran la relación inversa y directa que hay entre ángulos Θ y Φ, ya que mientras el ángulo del O^{17} es 180° el del γ es 0°, aumentando o disminuyendo según corresponda, de la forma en que se muestra en la figura 3.11.

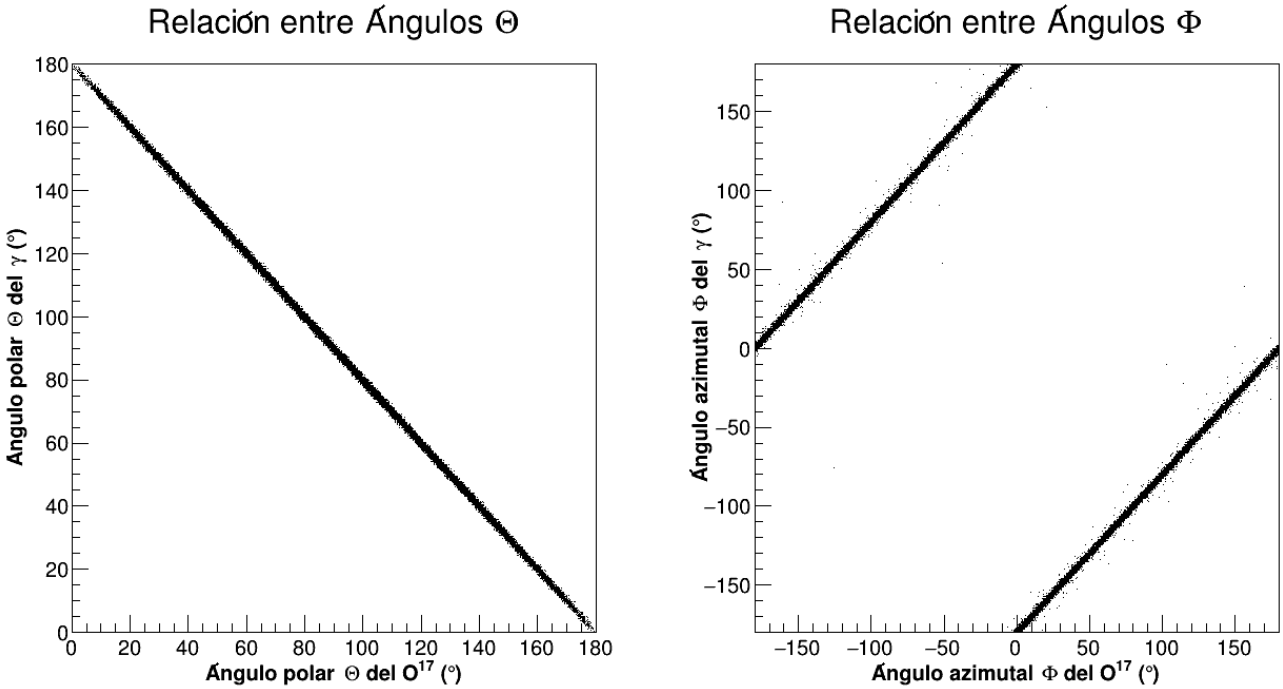


Figura 3.11: Relación entre ángulo polar Θ (izquierda) y ángulo azimutal Φ (derecha) de las partículas del estado final. **Fuente:** [Autor].

La incertidumbre en el ángulo polar del O^{17} y del γ, se obtienen de las tablas 3.1 y 3.2 y corresponden a los siguientes valores:

$$\Theta_{O^{17}} = 89,8559 \ \pm \ 0,05496 \ ^\circ \tag{3.8}$$

$$\Theta_{\gamma} = 89,9897 \ \pm \ 0,05123 \ ^\circ \tag{3.9}$$

Y para el ángulo azimutal Φ (cuya distribución es uniforme) presenta un error asociado obtenido de las tablas 3.1 y 3.2 el cual es:

$$\Phi_{O^{17}} = -0,142696 \ \pm \ 0,178012 \ ^\circ \tag{3.10}$$

$$\Phi_{\gamma} = 0,207824 \ \pm \ 0,156045 \ ^\circ \tag{3.11}$$

3.3.5. Distribución del vértice primario del estado final

Como ya se ha mencionado a lo largo de este capítulo, cuando el haz de neutrones interactúa dentro del blanco de O^{16}, se produce una reacción nuclear la cual emite O^{17} y γ, la figura 3.12 muestra en qué punto se generan las partículas ya mencionadas mientras los neutrones recorren el blanco. Esto proporciona información con respecto a la probabilidad de que se den ciertas capturas neutrónicas en determinadas secciones del blanco.

La Figura 3.12 también exhibe que, si se mantiene un valor fijo de 2 km para la arista del blanco, la distribución del vértice de la captura será uniforme al ir aumentando la energía del haz (ver figura A.9 y A.10), de esta manera la posibilidad de que ocurra una captura neutrónica resulta ser igual en todo el volumen, esto muestra una distribución uniforme constante, para un intervalo de 0 a 2 km. Es necesario aclarar que la distribución del vértice de la captura neutrónica, seguirá mostrando una dependencia constante, aunque se aumente la energía del haz y una vez se amplíen las dimensiones del volumen blanco. En conclusión, es igualemente probable que la reacción nuclear producido cuando el neutrón es capturado se de en cualquier punto del banco de O^{16}.

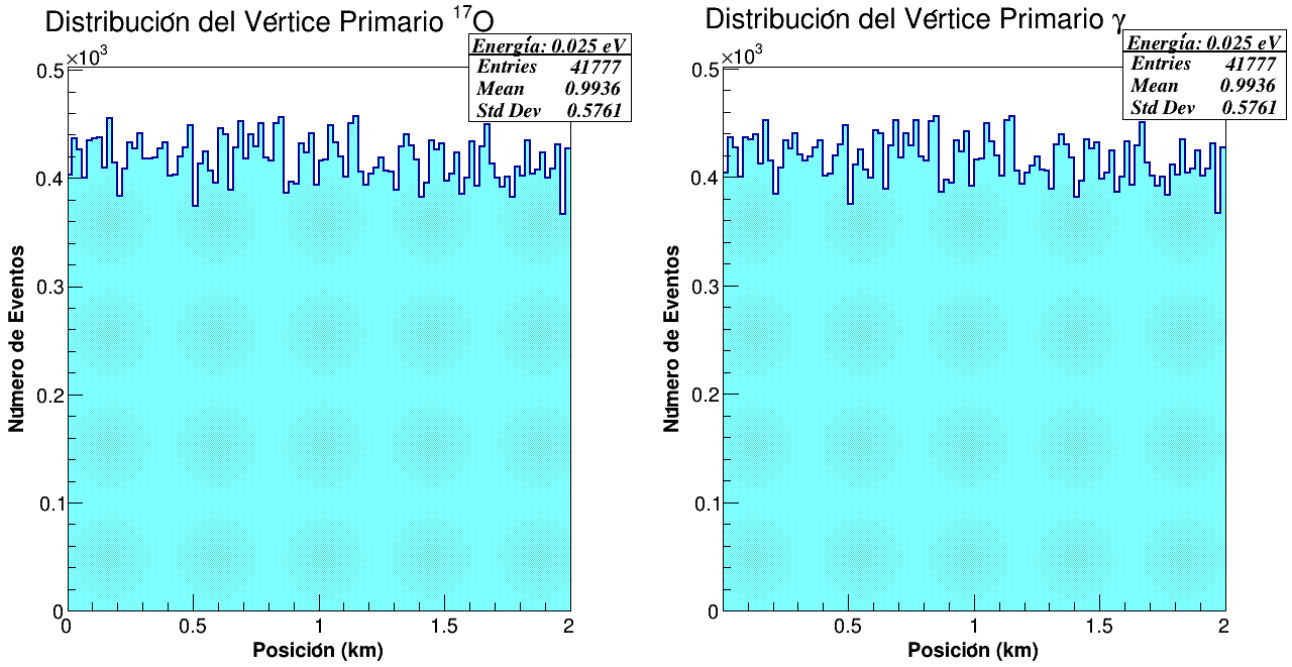


Figura 3.12: Distribución del vértice primario de la reacción en O^{17} (izquierda) y γ (derecha) con neutrones incidentes con energía de 0,025 eV. El histograma muestra una distribución uniforme cuando se genera la reacción. **Fuente:** [Autor].

La incertidumbre asociada con la determinación de la posición del vértice primario (ver tablas 3.1 y 3.2) corresponde a:

$$Vertice_{(\gamma\ y\ O^{17})} = 0,99941\ \pm\ 0,00117\ km \tag{3.12}$$

3.3.6. Distribución de velocidad del estado final

En la figura 3.13, se presenta la distribución de velocidades del O^{17} y γ, como se puede observar, la velocidad del γ es aproximadamente la velocidad de la luz como está reportado en la literatura. Ahora, el valor medio de la velocidad del O^{17} es considerablemente menor que la velocidad del γ, concretamente 10^4 veces menor en órdenes de magnitud.

Como se observa, el ancho de la distribución es de 750 m/s, esto es un valor bastante pequeño en comparación con el valor de la velocidad que se obtuvo del γ, considerando lo anterior se puede afirmar que la velocidad del O^{17} posee un carácter discreto en comparación con la del γ. La velocidad del O^{17} resulta no ser influyente para tener en cuenta el caso relativista, esto ser puede observar cuando se realiza el cálculo del momento clásico:

$$P = mv = 4,1412704\ MeV/c \tag{3.13}$$

donde m es la masa del O^{17} en MeV/c y v su velocidad. Y el momento relativista:

$$P = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} = 4,1412706\ MeV/c \tag{3.14}$$

Esto muestra que la variación en porcentaje entre el modelo clásico y el modelo relativista es mucho menor al 1 % (Se usa el concepto de error porcentual [29]), mostrando que se puede considerar un análisis no relativista del O^{17}.

Los valores de velocidad obtenidos permanecen estables alrededor de 7,486$\times 10^4$ m/s para el O^{17} y 2,998$\times 10^8$ m/s para los γ, se observa además que la desviación estandar para el caso del O^{17} va aumentado a medida que aumenta la energía del haz de neutrones incidente como se observa en la figura A.11 y para los γ permanece nula ya que su velocidad es constante como se puede apreciar en la figura A.12.

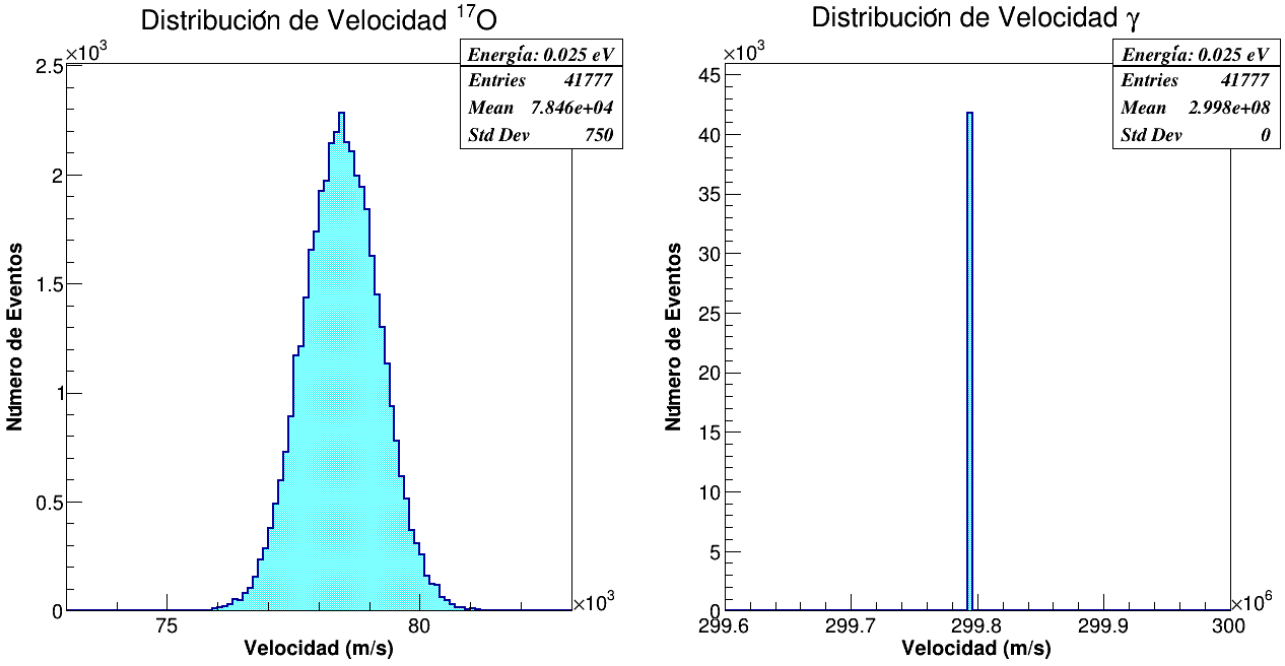


Figura 3.13: Distribución de velocidad para O^{17} (izquierda) y γ (derecha) con neutrones incidentes con energía de 0,025 eV. El histograma muestra que la velocidad del O^{17} es mucho menor que la del γ, mientras que para este último la velocidad es constante y cercana a la de la luz. **Fuente:** [Autor].

3.3.7. Valor Q de la reacción

En esta parte se abarcará la diferencia entre las energías cinéticas del estado inicial y final, lo cual es causa del intercambio de energía entre las partículas provocado por la colisión del neutrón con el blanco de O^{16}. Dicha diferencia se conoce como el valor Q de la reacción. Como se mencionó en la sección 1.1, el valor de Q determina la clase de reacción nuclear que se generó, de esta manera la figura 3.14 muestra que la distribución del valor Q en la captura neutrónica por O^{16} es de clase exotérmica ($Q > 0$), esto indica que la reacción puede suceder sin importar la energía del haz de neutrones, ya que presenta un valor medio de Q = 4,143 MeV el cual está reportado en la literatura [30], lo cual indica una pérdida de energía potencial interna en el sistema mientras gana energía cinética.

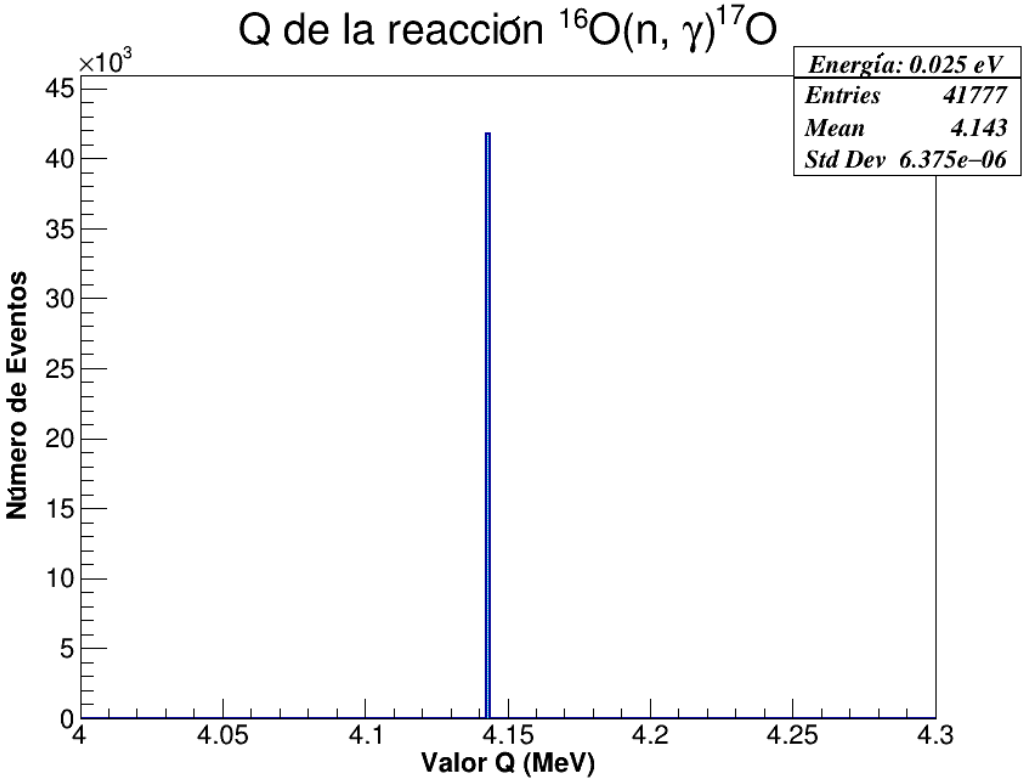


Figura 3.14: Valor Q de la reacción con neutrones incidentes con energía de 0,025 eV, cuyo valor es de 4,143 MeV. **Fuente:** [Autor].

El valor Q que se mencionó anteriormente, se obtiene a partir de los datos obtenidos en la figura 3.14, pero también se puede obtener de manera analítica como se hará a continuación. Este cálculo se puede realizar mediante el uso de las masas de las partículas que están presentes en la reacción debido a la relación relativista masa - energía o también haciendo uso de la diferencia de la energía cinética inicial y final [31].

$$Q = (m_{inicial} - m_{final})\, c^2 = (m_X + m_a - m_Y + m_b)\, c^2 \tag{3.15}$$

donde m_X y m_a son las masas de las partículas iniciales y m_Y y m_b son las masas de las partículas finales. O al exceso de energía cinética de los productos finales:

$$Q = T_{final} - T_{inicial} = T_X + T_a - T_Y - T_b \tag{3.16}$$

En las ecuaciones (3.15) y (3.16) se presenta las dos maneras de obtener el valor Q de la reacción, donde la ecuación (3.16) representa la forma en que se encontró el valor Q mostrada en la figura 3.14, esta representa la diferencia de energía cinética de la reacción. Ahora, para obtener el valor Q de manera analítica, se hará uso de la ecuación (3.15) mediante el valor correspondiente de la masa de cada partícula: $m_X = m_n = 1,008665\ uma$, $m_a = m_{O^{16}} = 15,994915\ uma$, $m_b = m_{O^{17}} = 16,999132\ uma$ y $m_Y = m_\gamma = 0\ uma$ [32].

$$Q = (1,008665\ uma + 15,994915\ uma - 16,999132\ uma)\, c^2$$

Al resolver la suma se obtiene:

$$Q = (0,004448\ uma)\, c^2 \tag{3.17}$$

Pero se sabe que: $1\ uma = 931,494\ MeV/c^2$, obteniendo en estas nuevas unidades que el valor de Q es de:

$$Q = 4,14328\ MeV \tag{3.18}$$

Para comparar cuanto es la incertidumbre asociada a la distribución del valor medio de Q con respecto al valor teórico encontrado, se hace usó del concepto de error porcentual, con el fin de saber los márgenes de incertidumbre los resultados de la simulación y los resultados analíticos [29]:

$$E_p = \frac{|V_T - V_E|}{V_T} \times 100 \tag{3.19}$$

donde V_T es el valor analítico encontrado y V_E es el valor obtenido de la simulación. Teniendo en cuenta lo anterior, el error porcentual es:

$$E_p = 0,004586\,\% \tag{3.20}$$

De acuerdo al error porcentual encontrado, se puede observar que la diferencia es relativamente pequeña, esto muestra que el valor obtenido de manera analitica resulta ser aproximado al valor encontrado en la figura 3.14 y corroborado con el valor reportado en la literatura [30]. La figura A.13 demuestra que el valor Q de la reacción es constante al ir aumentando la energía del haz de neutrones.

Para tener en cuenta: *La cantidad de cifras decimales para cada valor de masa de las partículas desempeñan un papel importante en los resultados que se obtienen.*

3.4. Aspectos adicionales en la Caracterización

En aras de no tener condiciones tan ideales, se hacen modificaciones tanto espaciales como energéticas al haz incidente de neutrones, para la primera se usará dos formas geométricas manteniendo la misma energía (0,025 eV) y para la segunda el haz incluirá un espectro de neutrones térmicos y epitérmicos; adicionalmente se cambia la forma geométrica como las dimensiones del blanco para mostrar que las condiciones presentadas en la sección 3.1, son las idóneas para la captura neutrónica.

3.4.1. Cambio en la distribución espacial del haz de neutrones

La primera modificación que se hace al haz de neutrones, consiste en cambiar su forma espacial, pasa de tener una forma puntual y unidireccional a una forma cónica o cilíndrica que incidirá sobre el blanco puro de O^{16}, el cual seguirá teniendo sus mismas dimensiones y además el haz mantendrá su carácter monoenergético. En la figura 3.15, se presenta los nuevos aspectos del haz y el evento que ocurre con estas nuevas formas espaciales y en las figuras posteriores se presentan los resultados obtenidos.

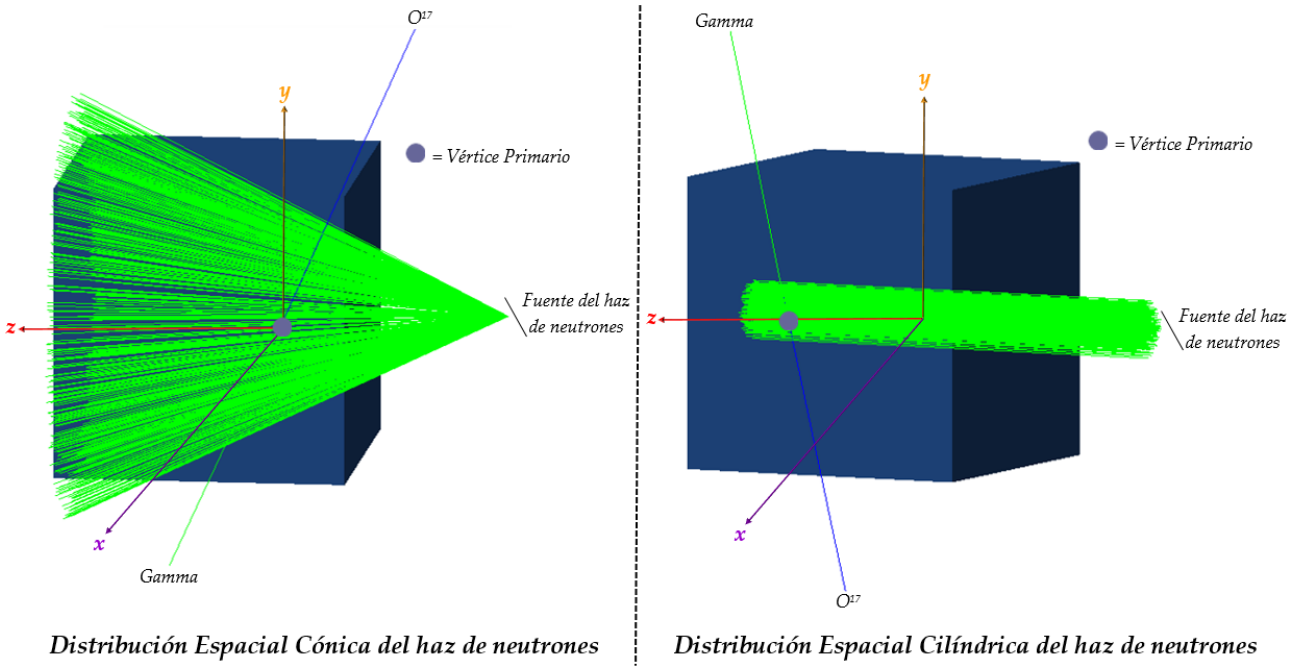


Figura 3.15: Diferentes distribuciones espaciales del haz de neutrones: forma cónica (izquierda) y forma cilíndrica (derecha). **Fuente:** [Autor].

La figura 3.16, muestra que luego de incidir el haz de neutrones con distribución cónica contra el blanco, las cantidades de interés del O^{17} no se alteran, a excepción de la gráfica de posición, esto se debe a que los neutrones en su recorrido diagonal escapan del blanco y no interactúan, provocando que el conteo disminuya (ver figura 3.15 panel izquierdo).

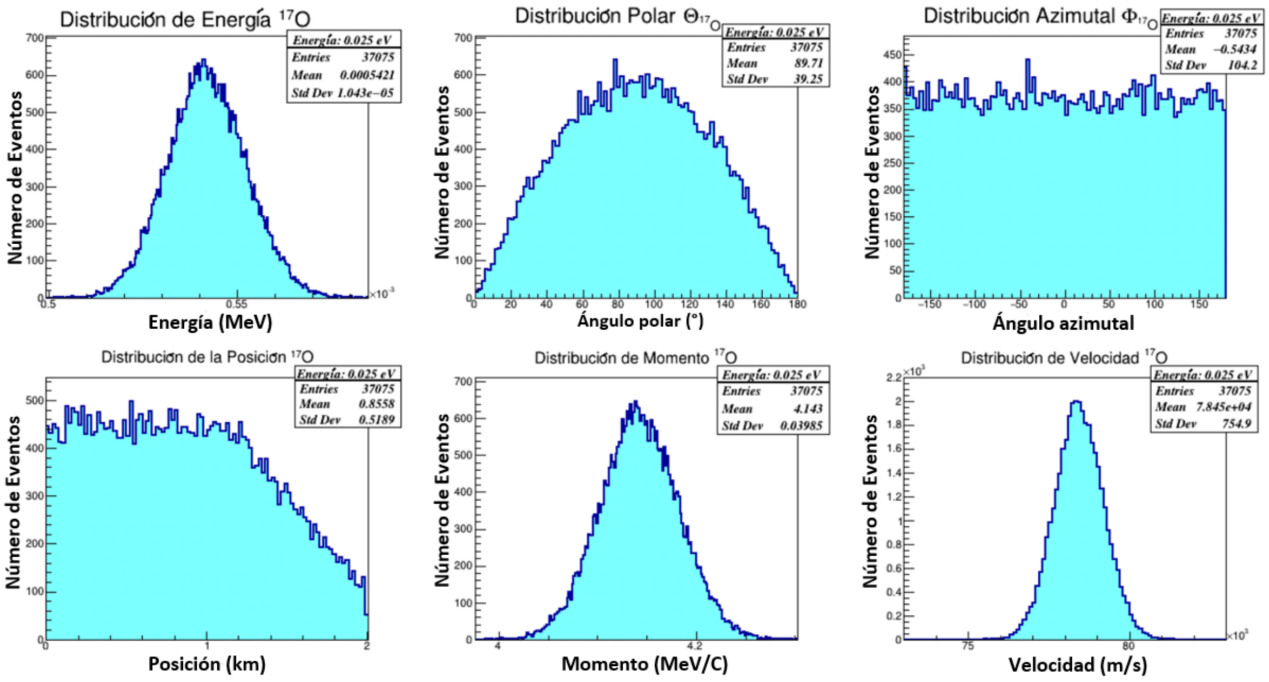


Figura 3.16: Distribuciones de O^{17} obtenidas con una forma espacial cónica de haz de neutrones con energía 0,025 eV que chocan con un blanco puro de O^{16}. **Fuente:** [Autor].

Como se puede observar en la figura 3.17, los datos del γ no se alteran con esta distribución cónica de haz de neutrones, a excepción de la gráfica de posición, pero la razón es la misma que se mencionó para el O^{17}.

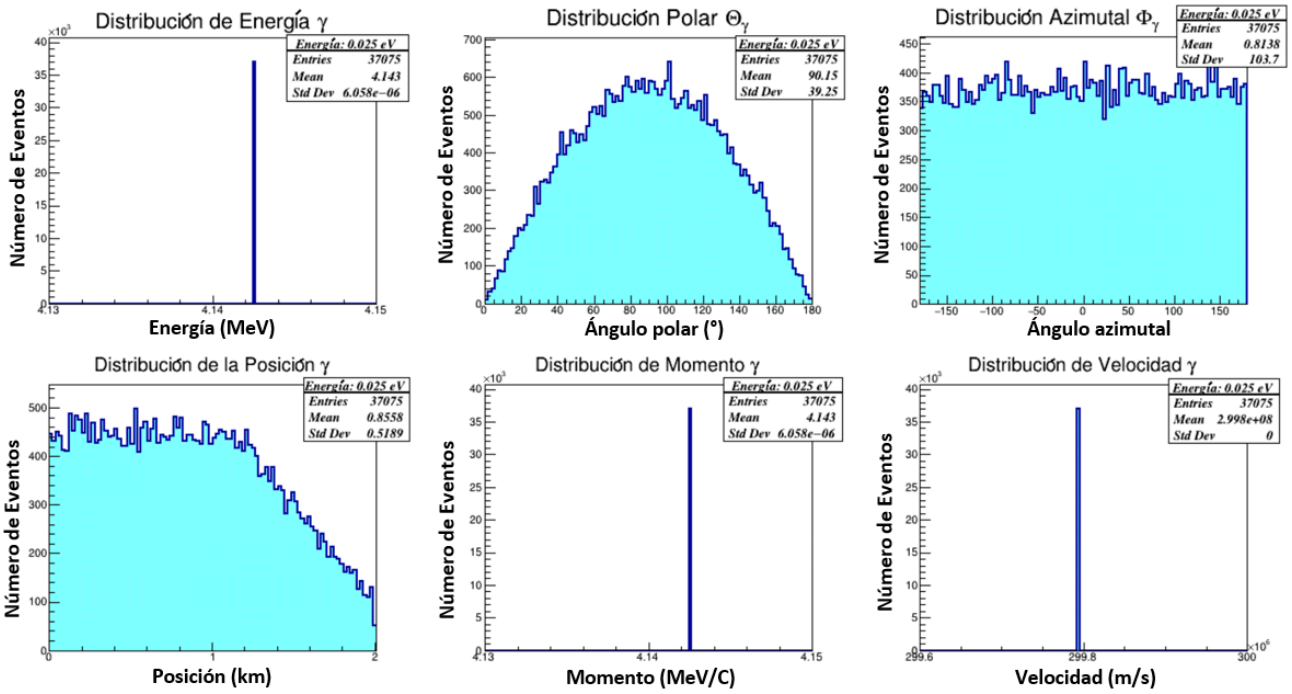


Figura 3.17: Distribuciones γ obtenidas con una forma espacial cónica de haz de neutrones de 0,025 eV que chocan con un blanco puro de O^{16}. **Fuente:** [Autor].

En las figuras 3.18 y 3.19, se muestran las gráficas obtenidas cuando el haz de neutrones tiene una distribución cilíndrica (ver figura 3.15 panel derecho) que interactúa con el blanco puro de O^{16}, se puede ver que las cantidades cinemáticas de interés no están cambiando, incluso esto permite comprobar que la gráfica de posición tiene la misma forma uniforme y coincide con la obtenida cuando se usa un haz lineal, esto refuerza la idea que la gráfica de posición que se encontró cuando el haz es cónico cambia por la dirección que siguen los neutrones en su recorrido dentro del blanco, que para ese caso es diagonal.

En el caso de la cantidad de neutrones capturados por los O^{16} para ambas distribuciones espaciales del haz, se puede apreciar que para el caso del haz cónico, disminuyo y esto se debe a que algunos neutrones por su recorrido diagonal no están interactuando con el blanco, en cambio para el caso del haz cilíndrico, el número de capturas si se mantiene bastante cercano al obtenido cuando se usa un haz lineal de neutrones.

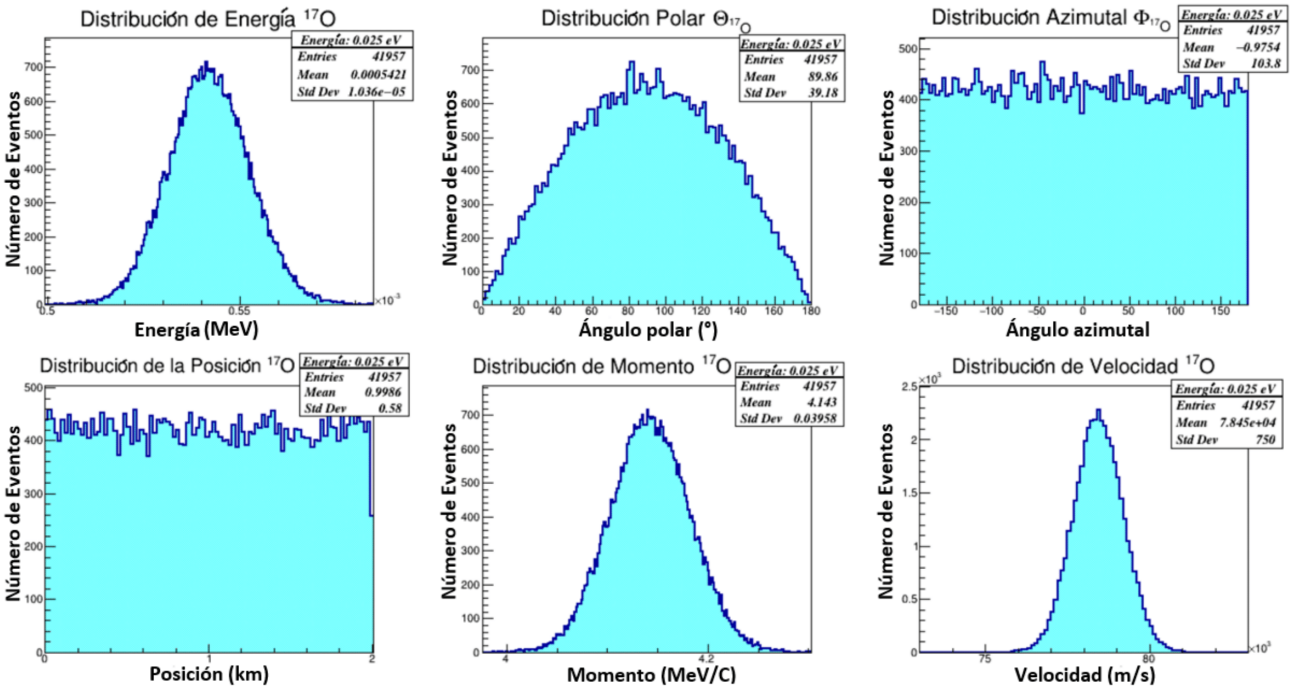


Figura 3.18: Distribuciones de O^{17} obtenidas con una forma espacial cilíndrica de haz de neutrones de 0,025 eV que chocan con un blanco puro de O^{16}. **Fuente:** [Autor].

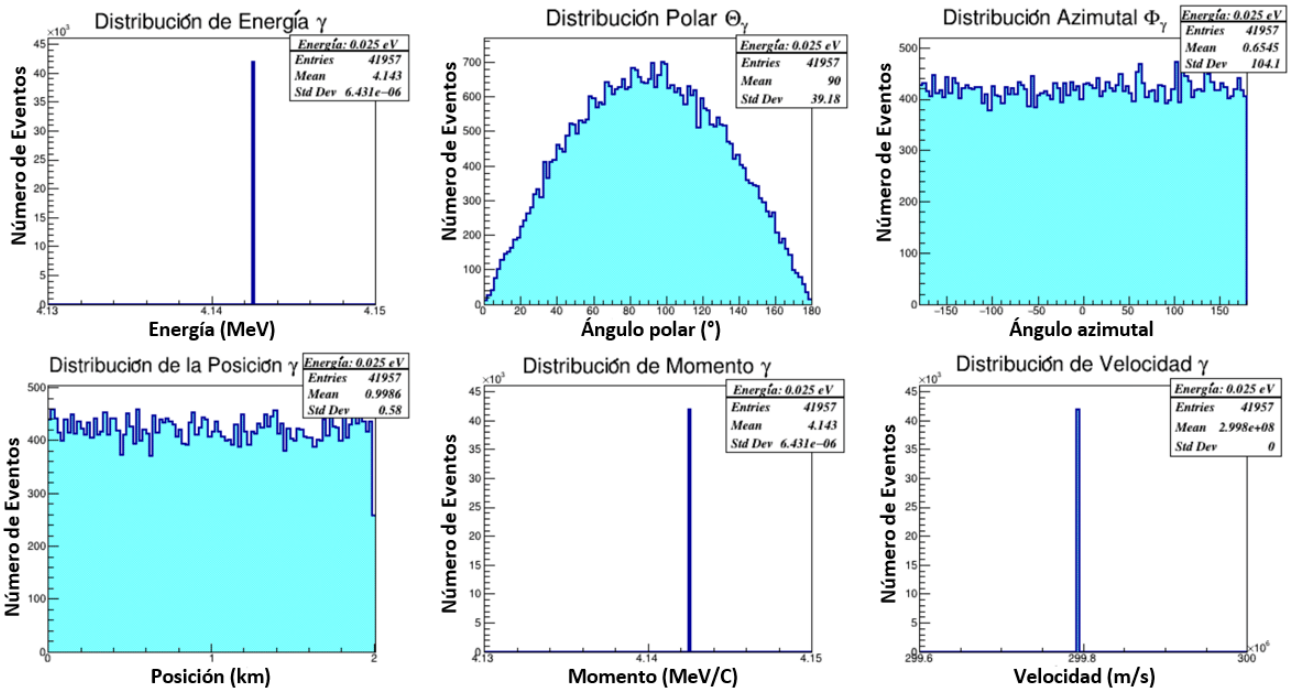


Figura 3.19: Distribuciones γ obtenidas con una forma espacial cilíndrica de neutrones de 0,025 eV que chocan con un blanco puro de O^{16}. **Fuente:** [Autor].

En la Figura 3.20 se presenta el valor Q de la reacción. Como se puede apreciar, este valor se mantiene constante sin importar la distribución espacial que se utilice para el haz de neutrones.

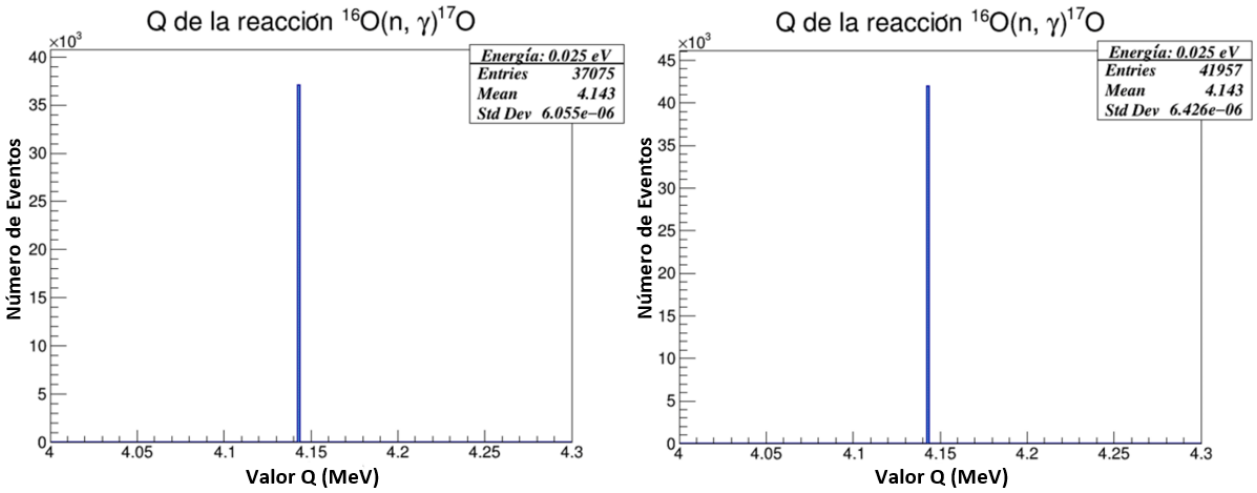


Figura 3.20: Valor Q obtenido para las distribuciones espaciales del haz de neutrones: distribución cónica (izquierda) y distribución cilíndrica (derecha). **Fuente:** [Autor].

3.4.2. Cambio en la distribución energética del haz de neutrones

La segunda modificación que se le hace al haz incidente es a nivel de su espectro energético, ya que al principio se utiliza un haz monoenergético, para este caso se utiliza un haz uniforme con energía entre 0,025 eV hasta 1 eV, en donde todos los valores de energía tendrán la misma intensidad y luego un haz gaussiano, donde predomine los neutrones térmicos (0,025 eV) con una contribución de nuetrones epicadmios (0,610 eV), la forma energética del haz se muestra en la figura 3.21.

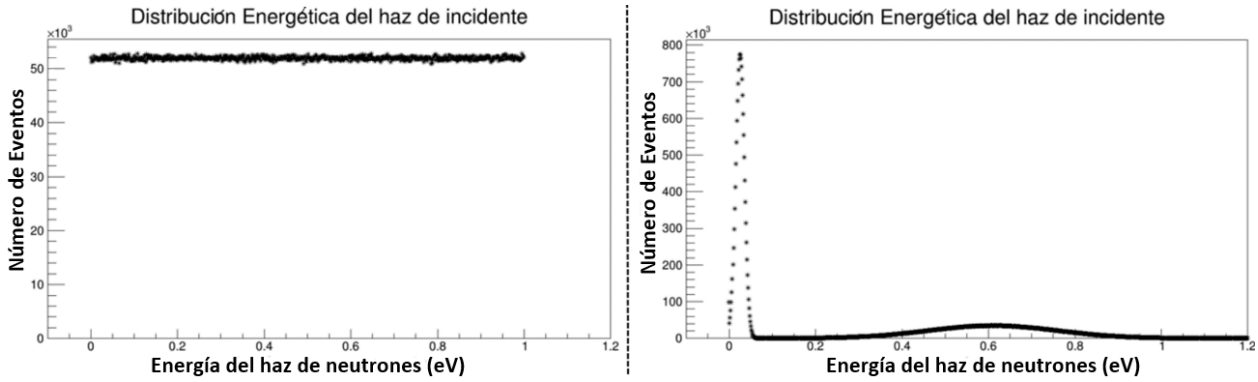


Figura 3.21: Diferentes distribuciones energéticas del haz de neutrones: distribución uniforme (izquierda) y gaussiana (derecha). **Fuente:** [Autor].

Como se puede ver en las figuras 3.22 y 3.23, las cantidades de interés no se ven alteradas con un haz de neutrones con distribución energética uniforme (ver figura 3.21 izquierda), tanto para los O^{17} como para los γ, lo único que está cambiando es la cantidad de capturas por parte del O^{16} y como se puede notar es considerable la reducción de las

capturas, esto se debe a que algunos de los neutrones del haz, por las energías en la que son emitidas, recorren el blanco sin interactuar.

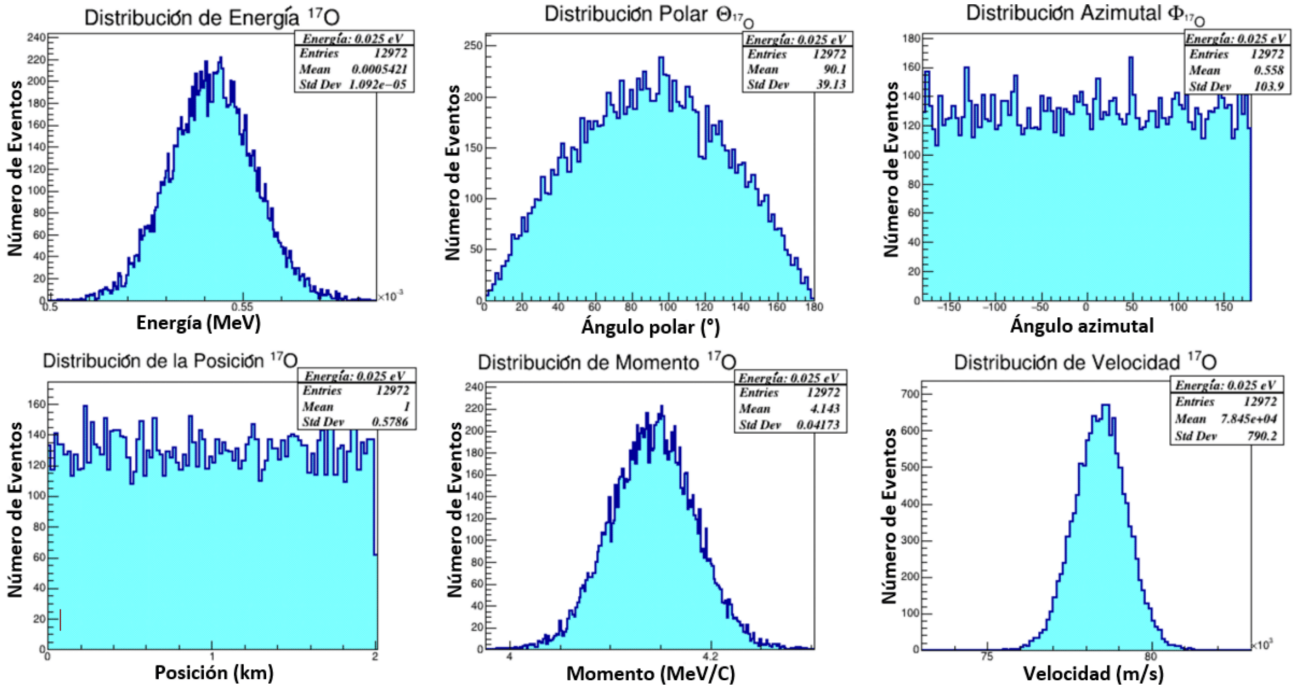


Figura 3.22: Distribuciones de O^{17} obtenidas con una forma energética uniforme de haz de neutrones que chocan con un blanco puro de O^{16}. **Fuente:** [Autor].

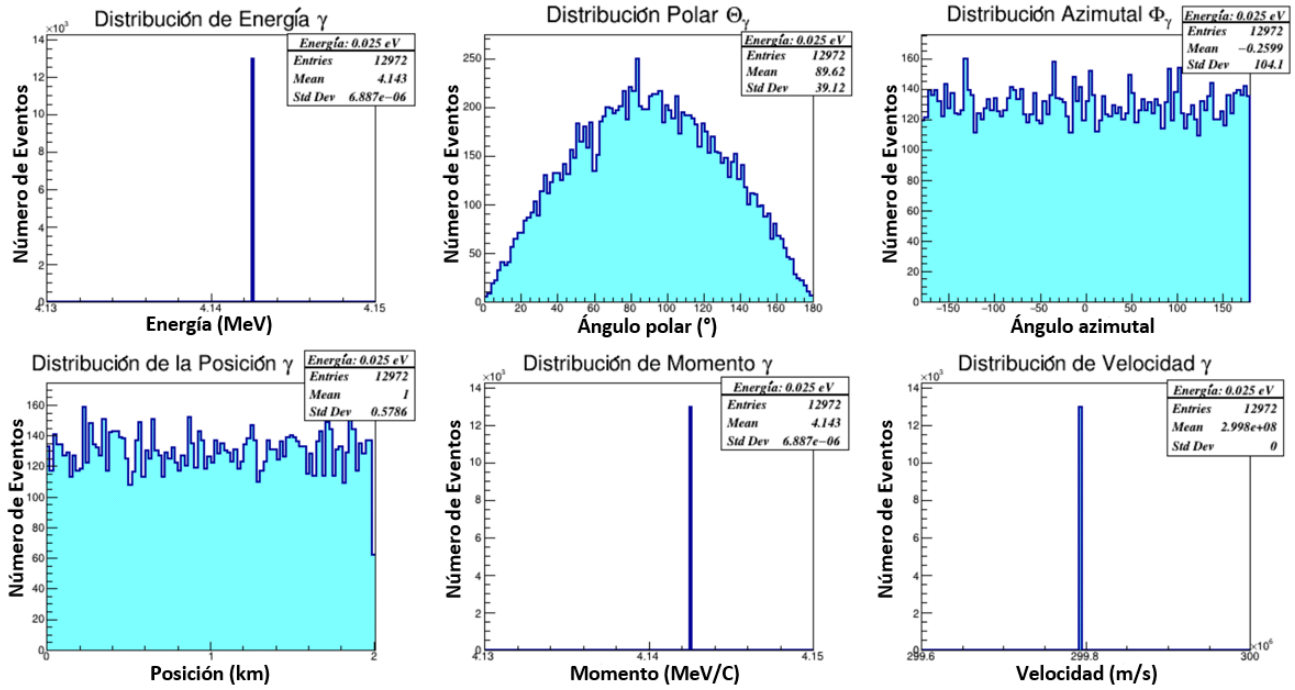


Figura 3.23: Distribuciones γ obtenidas con una forma energética uniforme de haz de neutrones que chocan con un blanco puro de O^{16}. **Fuente:** [Autor].

Los resultados para el haz de neutrones con distribución energética gaussiana (ver

figura 3.21 derecha) se presentan en las figuras 3.24 y 3.25, acá tampoco hay cambio en las cantidades cinemáticas, solo en la cantidad de neutrones capturados y su razón es la misma que para el haz de neutrones con distribución uniforme.

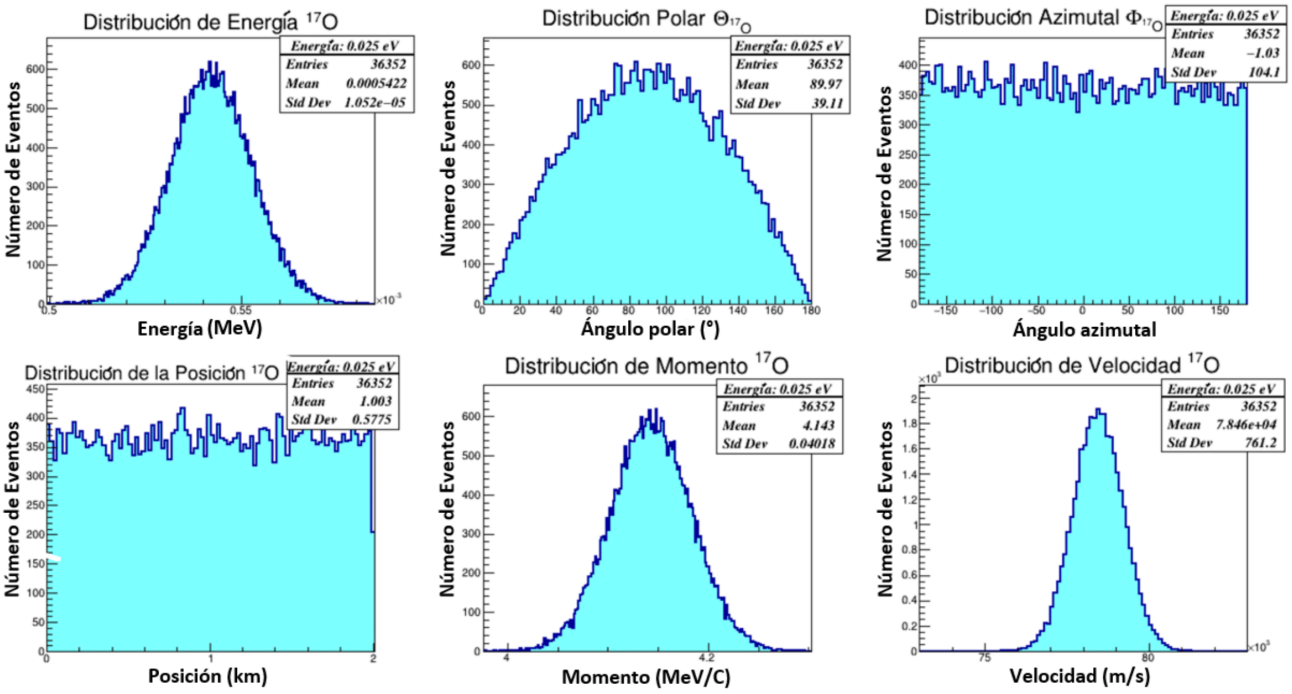


Figura 3.24: Distribuciones de O^{17} obtenidas con una distribución energética gaussiana de haz de neutrones que chocan con un blanco puro de O^{16}. **Fuente:** [Autor].

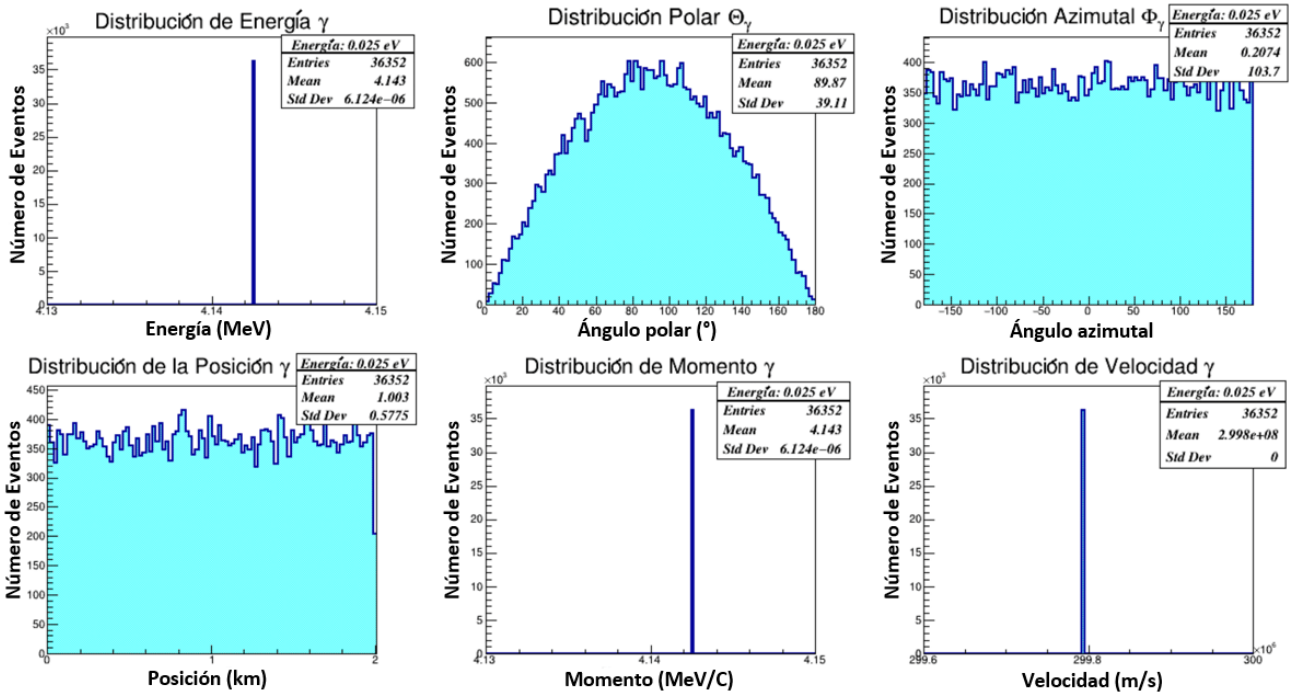


Figura 3.25: Distribuciones γ obtenidas con una forma energética gaussiana de haz de neutrones que chocan con un blanco puro de O^{16}. **Fuente:** [Autor].

A continuación, se muestra las gráficas de valor Q obtenidas y se puede ver que esta cantidad aún se mantienen inalterable ante el cambio energético del haz de neutrones.

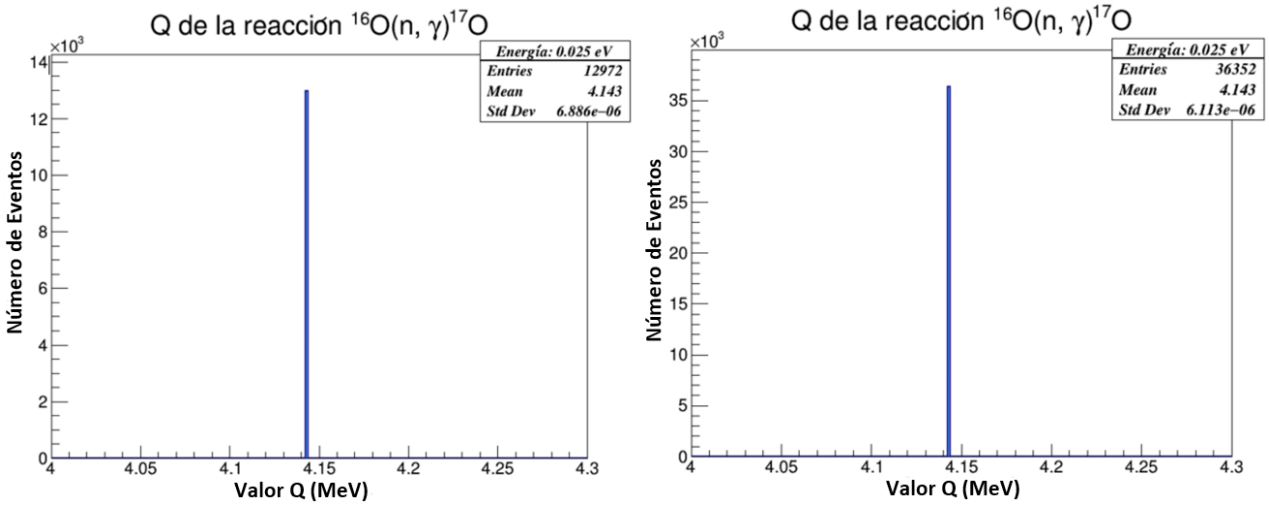


Figura 3.26: Valor Q obtenido para las distribuciones energéticas del haz de neutrones: distribución uniforme (izquierda) y distribución gaussiana (derecha). **Fuente:** [Autor].

3.4.3. Cambio en la forma geométrica del blanco de O^{16}

El objetivo de esta parte, es demostrar que la cantidad de capturas neutrónicas es independiente de la geometría del blanco de O^{16}, lo que conlleva a que las cantidades cinemáticas tampoco cambien; se hará uso de las siguientes geometrías: cónica, cilíndrica y esférica. La figura 3.27 muestra las diferentes geométricas utilizadas. La fuente de neutrones incidente es puntual, monoenergético y unidireccional (sobre el eje z) con energía de 0,025 eV.

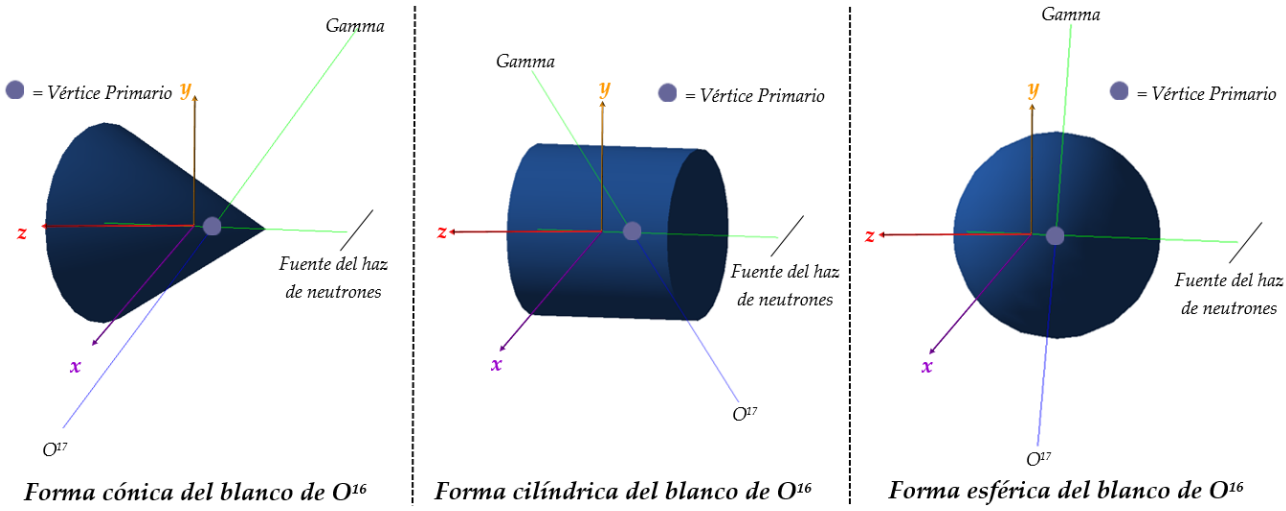


Figura 3.27: Diferentes geometrías utilizadas para el blanco de O^{16}: cónica (izquierda), cilíndrica (centro) y esférica (derecha). **Fuente:** [Autor].

A continuación se presenta los resultados obtenidos con un blanco puro de O^{16} que tiene forma cónica (ver figura 3.27 izquierda).

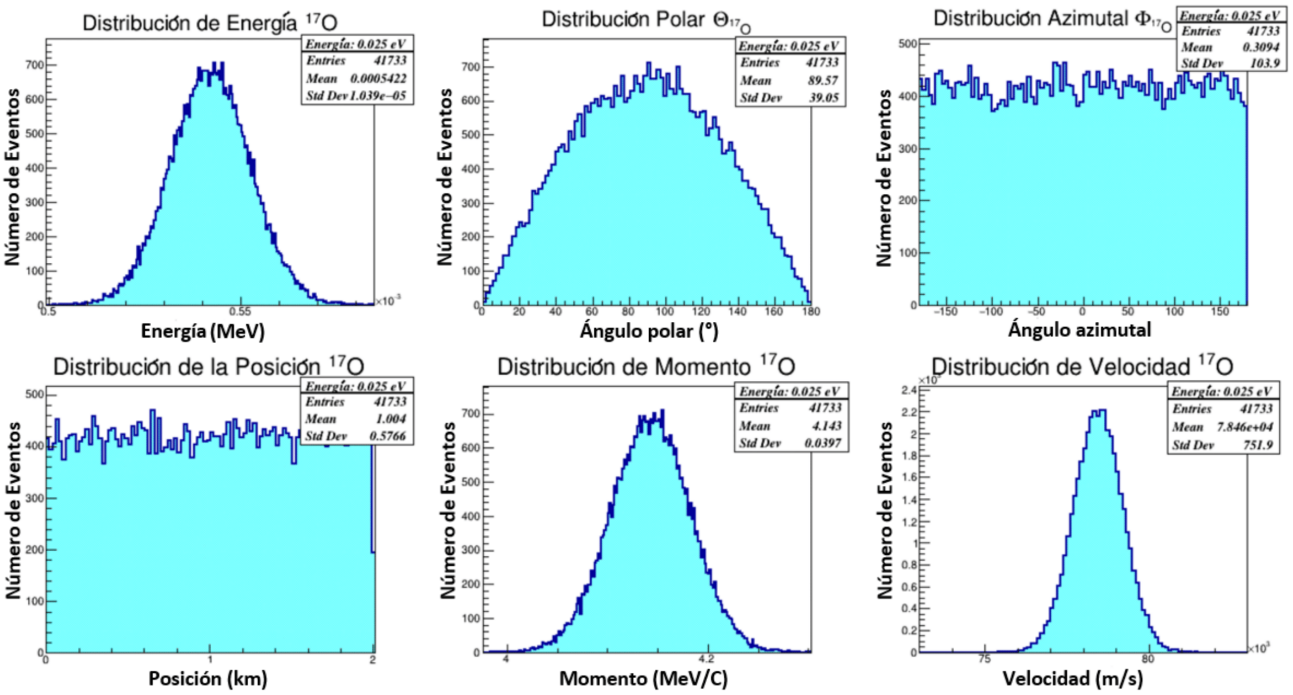


Figura 3.28: Distribuciones de O^{17} obtenidas con un blanco de O^{16} que tiene forma cónica, con un haz de neutrones de 0,025 eV de energía. **Fuente:** [Autor].

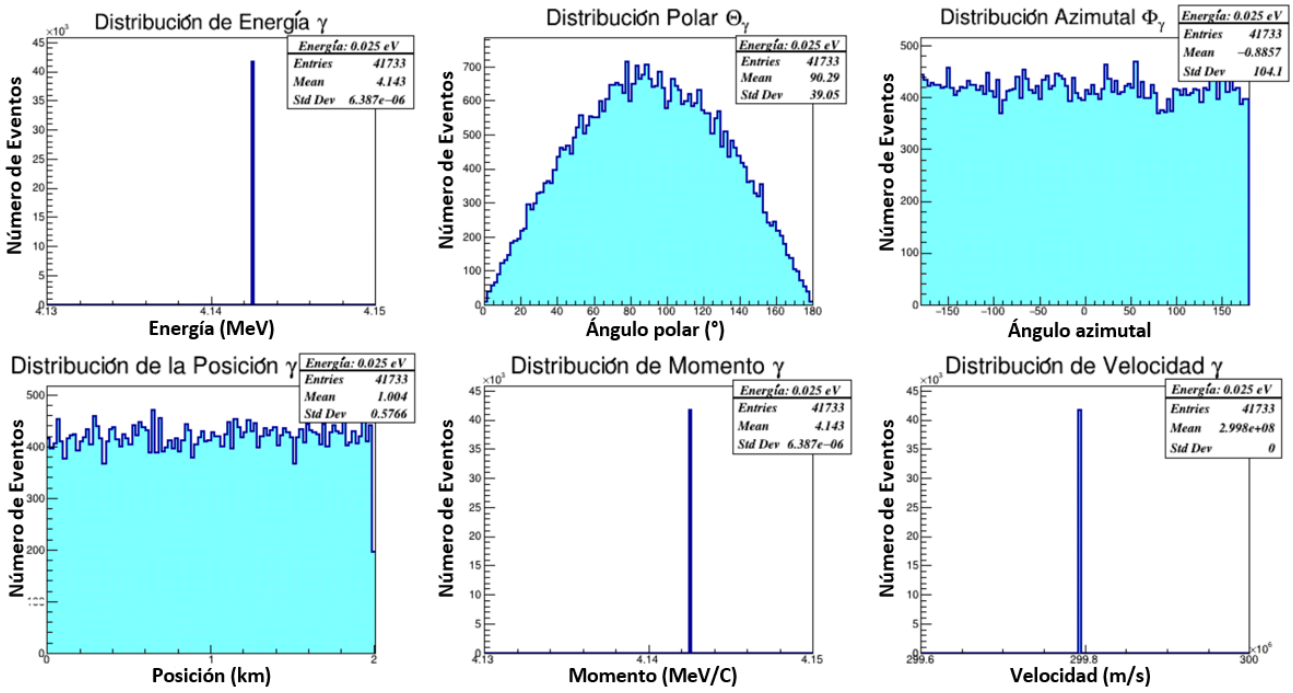


Figura 3.29: Distribuciones γ obtenidas con un blanco de O^{16} que tiene forma cónica, con un haz de neutrones de 0,025 eV de energía. **Fuente:** [Autor].

Ahora, se presenta las distribuciones cinemáticas conseguidas con un blanco de O^{16} el cual tiene forma cilíndrica (ver figura 3.27 centro).

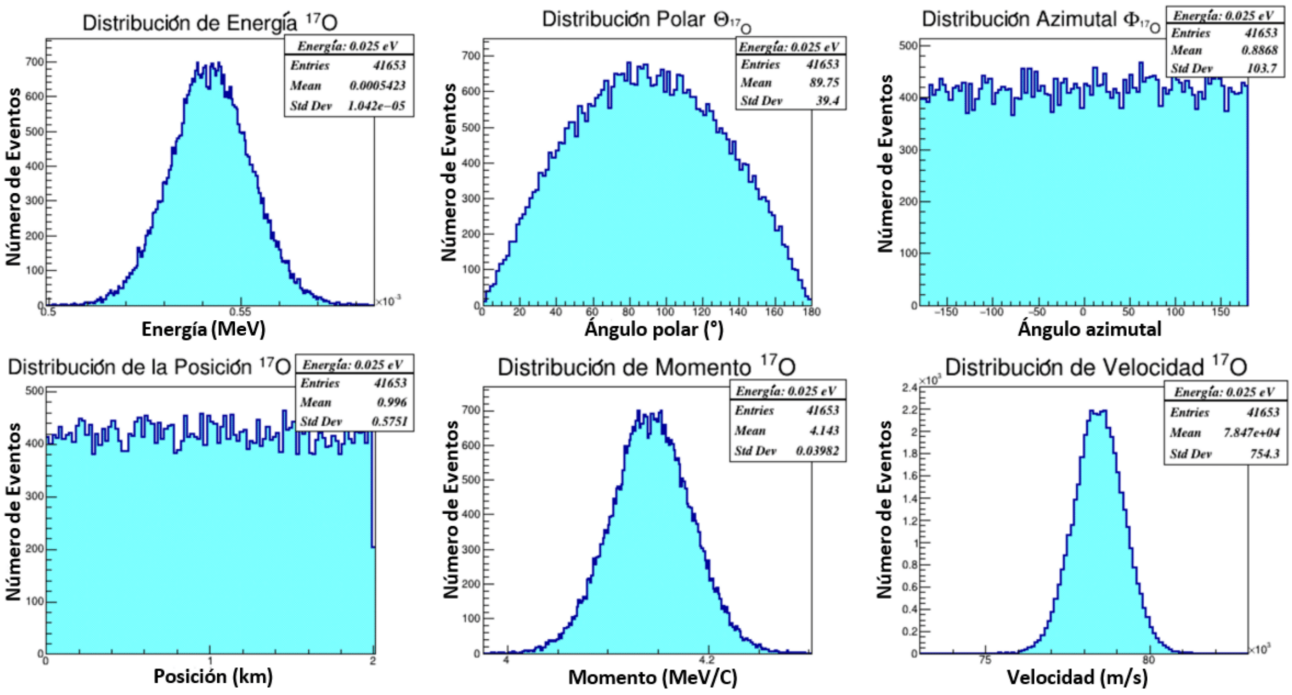


Figura 3.30: Distribuciones de O^{17} obtenidas con un blanco de O^{16} que tiene forma cilíndrica, con un haz de neutrones de 0,025 eV de energía. **Fuente:** [Autor].

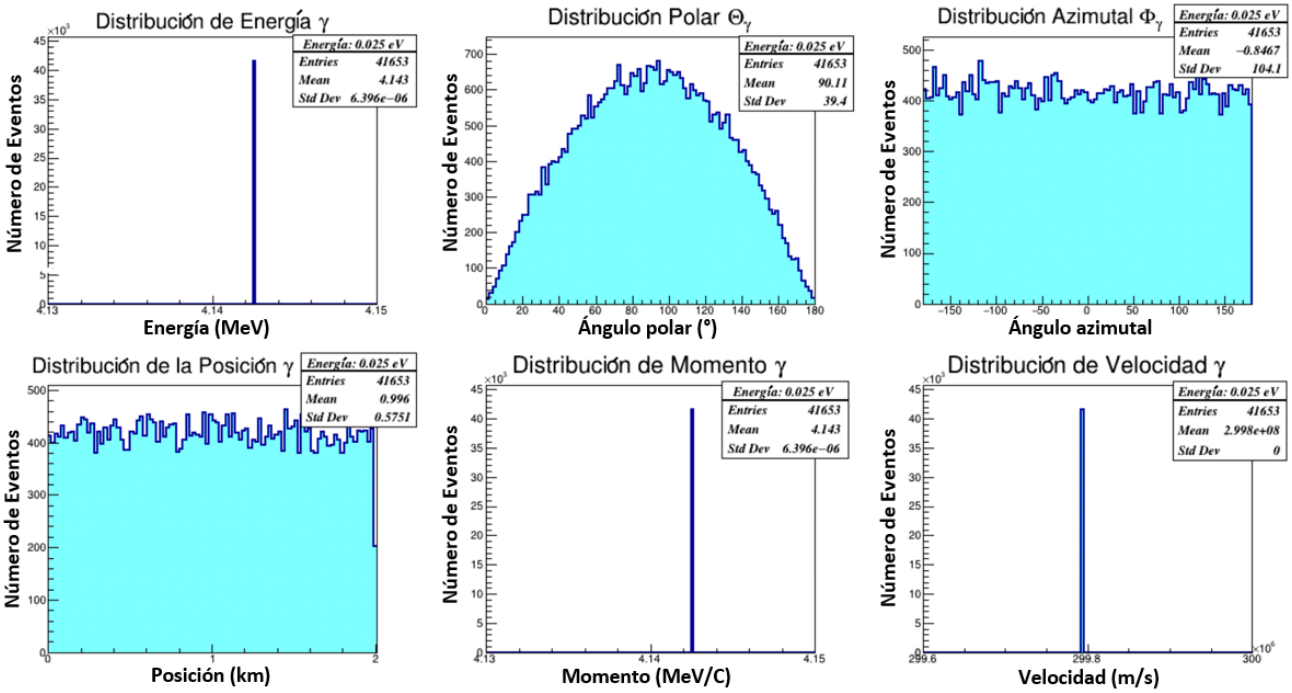


Figura 3.31: Distribuciones γ obtenidas con un blanco de O^{16} que tiene forma cilíndrica, con un haz de neutrones de 0,025 eV de energía. **Fuente:** [Autor].

Finalmente, se exponen las distribuciones encontradas con un blanco de O^{16} el cual posee forma esférica (ver figura 3.27 derecha).

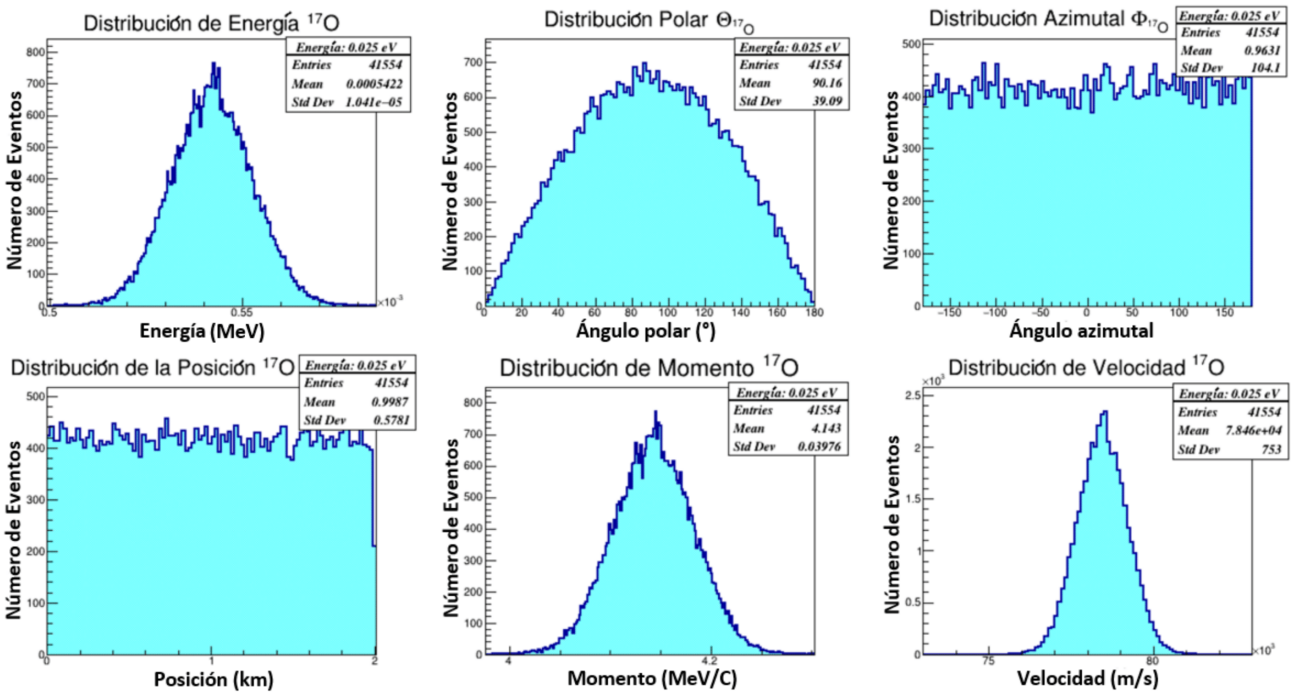


Figura 3.32: Distribuciones de O^{17} obtenidas con un blanco de O^{16} que tiene forma esférica, con un haz de neutrones de 0,025 eV de energía. **Fuente:** [Autor].

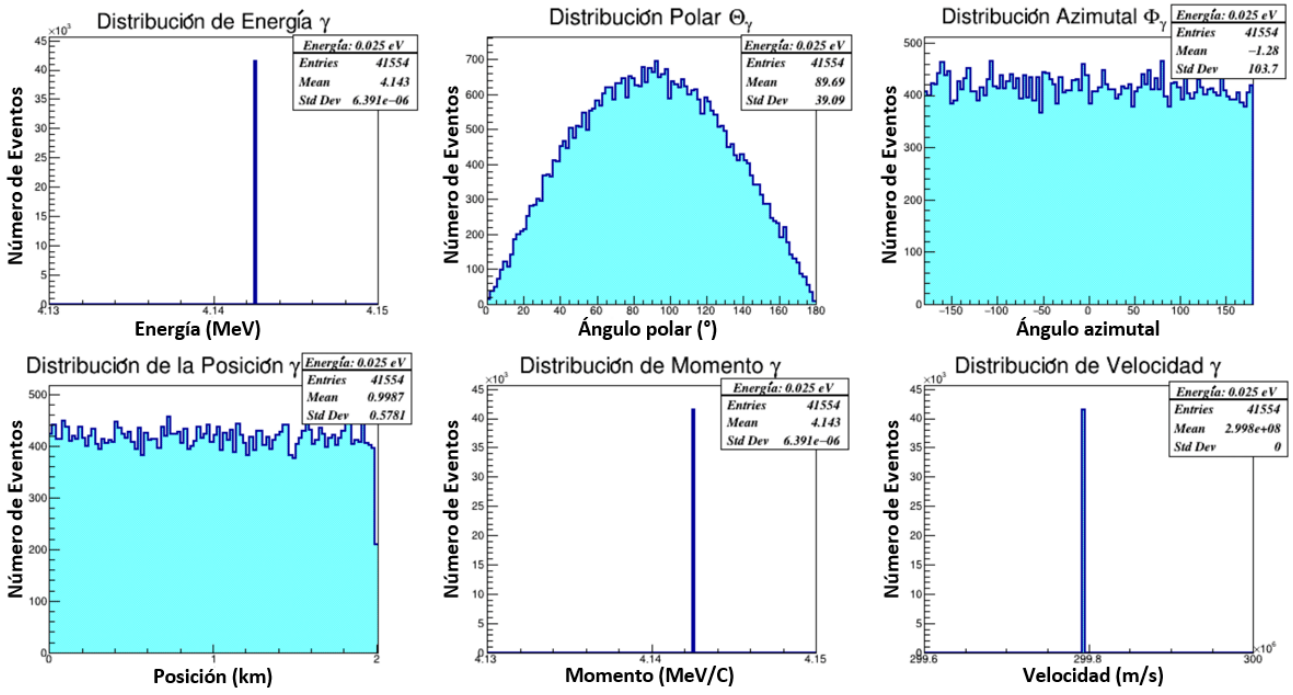


Figura 3.33: Distribuciones γ obtenidas con un blanco de O^{16} que tiene forma esférica, con un haz de neutrones de 0,025 eV de energía. **Fuente:** [Autor].

Las figuras 3.28, 3.29, 3.30, 3.31, 3.32 y 3.33 muestran que las cantidades cinemáticas de interés no varían cuando la geometría del blanco cambia y la cantidad de capturas se encuentran entre los 41.550 y los 41.740, un cambio insignificante en comparación con la cantidad de eventos generados (20'000.000), esto se debe a que hay una cierta dependencia al volumen del blanco, como se ve en las figuras mencionadas. Además, en la figura 3.34 se observa que el valor Q es independiente a la geometría del blanco dado que no se ve alterado su valor.

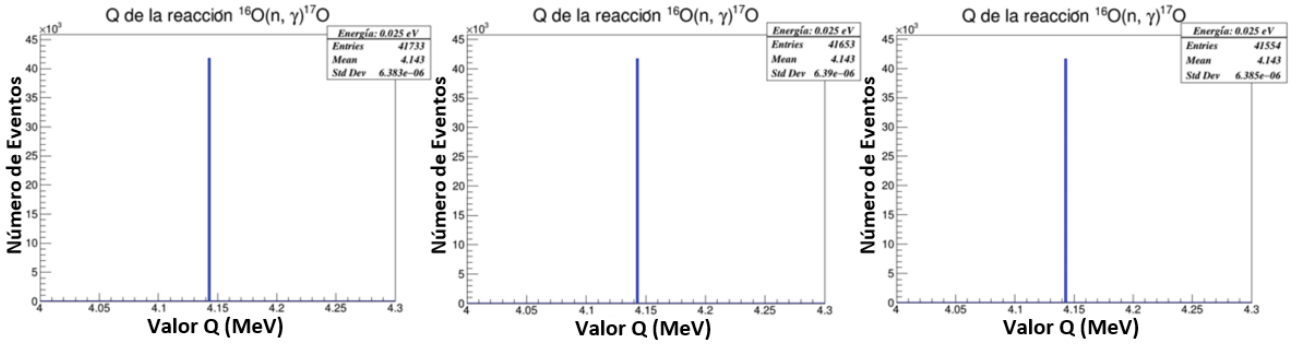


Figura 3.34: Valor Q para las diferentes formas geométricas del blanco de O^{16}: cónica (izquierda), cilíndrica (centro) y esférica (derecha). **Fuente:** [Autor].

3.4.4. Cambio en el tamaño del blanco de O^{16}

Al inicio de este capítulo, se explicó los aspectos generales de la geometría que se implementó en la simulación, uno de esos aspectos consistía en las dimensiones que tendría el blanco de O^{16} (ver figura 3.1), que resultan ser exageradas teniendo en cuenta el tamaño de un cuerpo humano, por este motivo es necesario entender por qué se tomaron estas dimensiones en vez de tomar unas acorde a los tejidos del cuerpo humano. Esto se debe a la cantidad de neutrones capturados, ya que mientras más pequeño el blanco, menor será el número de neutrones capturados, como se ve en la figura 3.35, cuanto más grande el cubo de O^{16} más captura neutrónica se tendrá, a esta gráfica se le hace un ajuste con un polinomio de grado 1 (línea roja) el cual tiene la forma: $y = mx + b$.

Esta gráfica se obtuvo disminuyendo el blanco hasta los 5 metros con una energía del haz incidente de 0,025 eV. Posteriormente se aumentó el tamaño del cubo 10 m y de 10 en 10 hasta los 100 m, luego de 100 en 100 hasta llegar a 2.000 m, cada vez que se modificaba el tamaño del blanco se ejecutaba la simulación para obtener los puntos que

se observan en la figura, este proceso se hizo con 20.000.000 de eventos en cada caso.

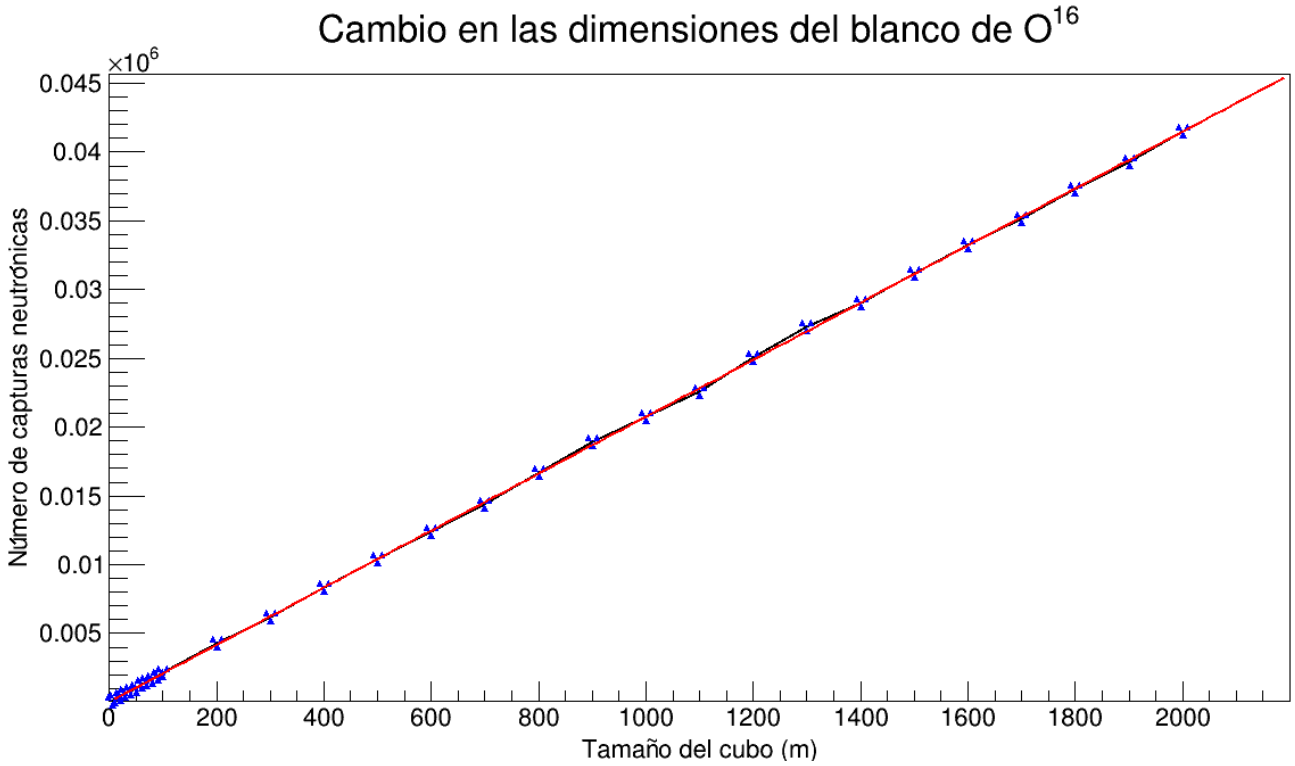


Figura 3.35: Número de neutrones capturados con energía de 0,025 eV en función del tamaño del cubo de O^{16} (blanco) para 20'000.000 de eventos. **Fuente:** [Autor].

Para llevar a cabo la caracterización de la captura neutrónica por O^{16}, fue necesario tomar unas dimensiones que no fueran acordes a la realidad, esto simplemente para obtener las distribuciones de las cantidades de interés de la reacción y de esta manera obtener valores numéricos para analizar.

3.4.5. Cambios generales tanto en el haz incidente como en el blanco de O^{16}

El propósito de este apartado es mostrar que con un haz incidente en condiciones más reales, las cantidades cinemáticas no varían. El haz de neutrones cambia en su forma espacial ya que tiene forma cilíndrica así como también en su forma energética debido a que se utilizó un haz de neutrones gaussiano, donde se dio más intensidad a las energías de 0,025 y 0,610 eV, estos cambios se pueden ver en la figura 3.36.

Además el blanco de O^{16}cambia en su forma geométrica dado que para este caso es una esfera maciza (ver figura 3.27 derecha).

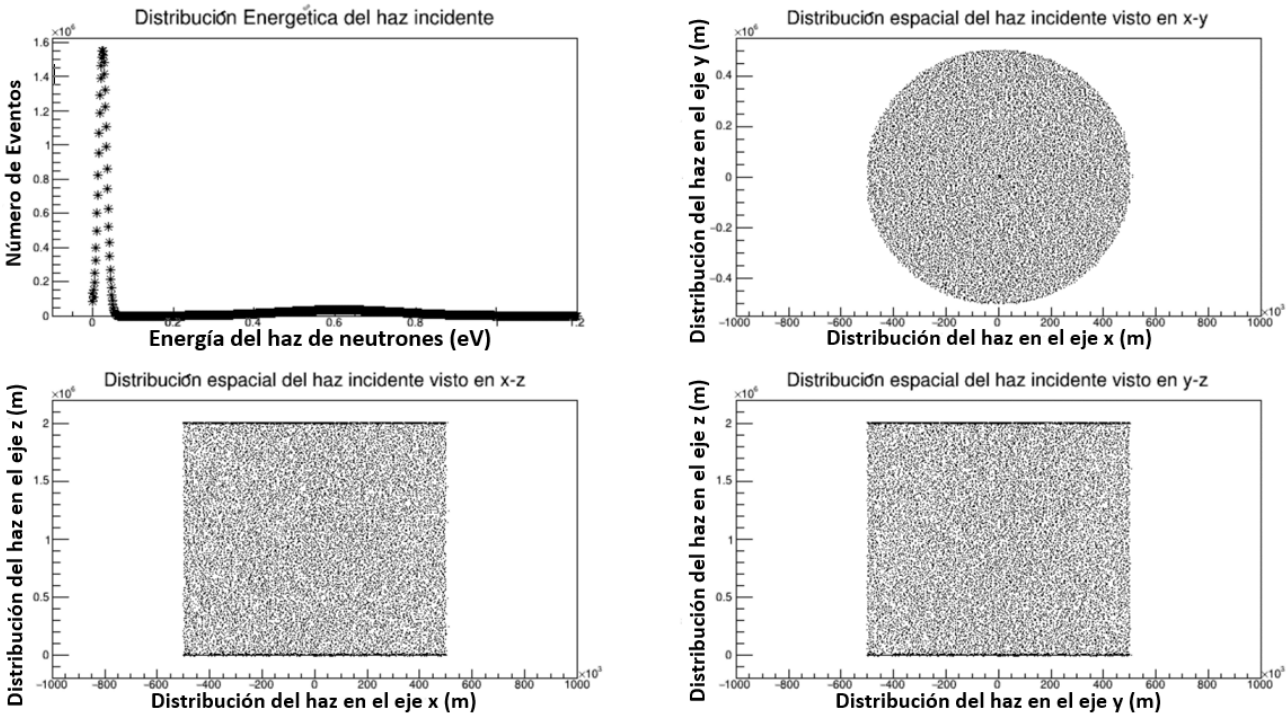


Figura 3.36: Cambios generales del haz de neutrones incidente, primero en la forma energética "gaussiana"(parte superior izquierda) y cambio en la forma espacial "cilíndrica" (parte superior derecha, inferior izquierda e inferior derecha). **Fuente:** [Autor].

En las figuras 3.37, 3.38 y 3.39, se muestra que las cantidades cinemáticas no se ven alteradas por estos cambios, tanto en el haz como en la forma geométrica del blanco O^{16}.

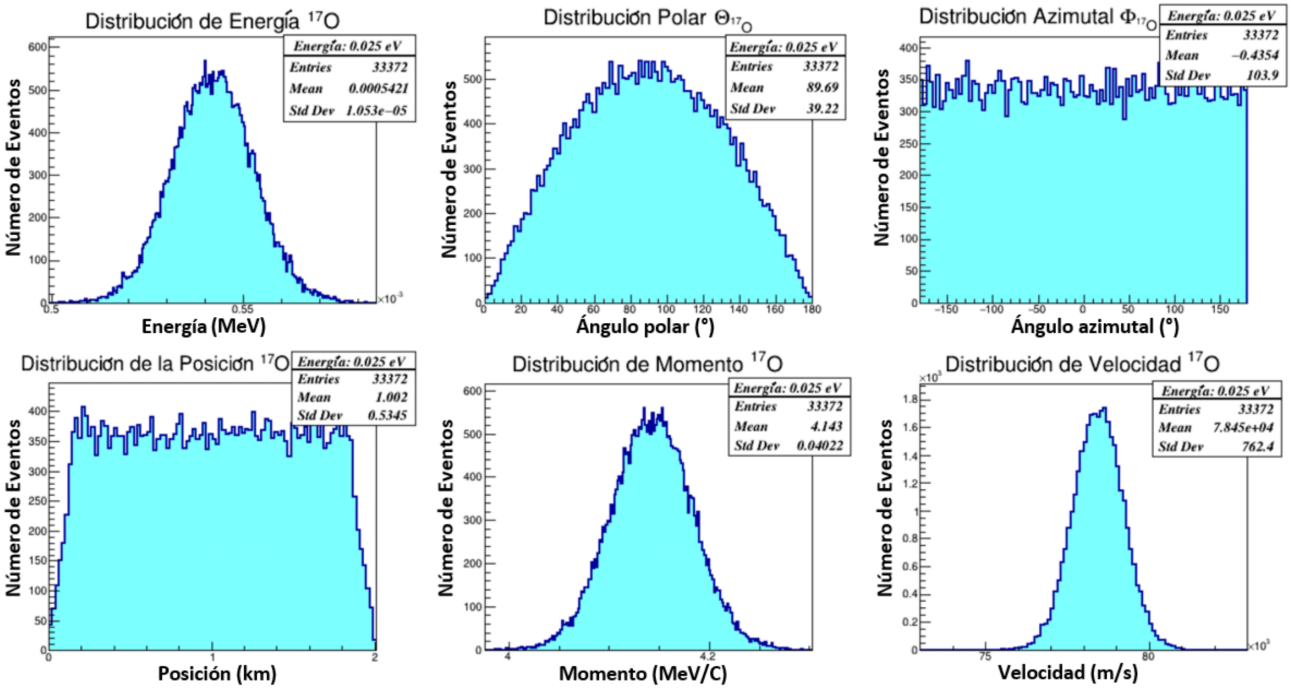


Figura 3.37: Distribuciones de O^{17} obtenidas con el cambio espacial y energético del haz y con un blanco de O^{16} con forma cilíndrica. **Fuente:** [Autor].

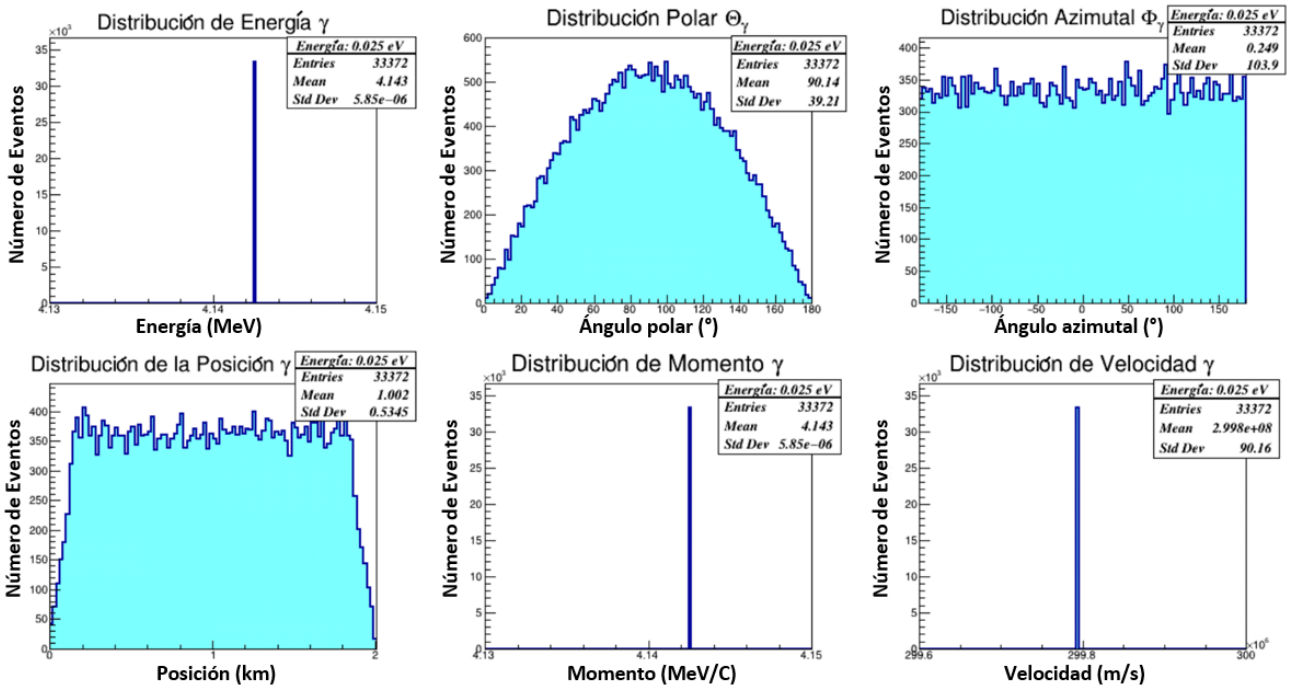


Figura 3.38: Distribuciones de γ obtenidas con el cambio espacial y energético del haz y con un blanco de O^{16} con forma cilíndrica. **Fuente:** [Autor].

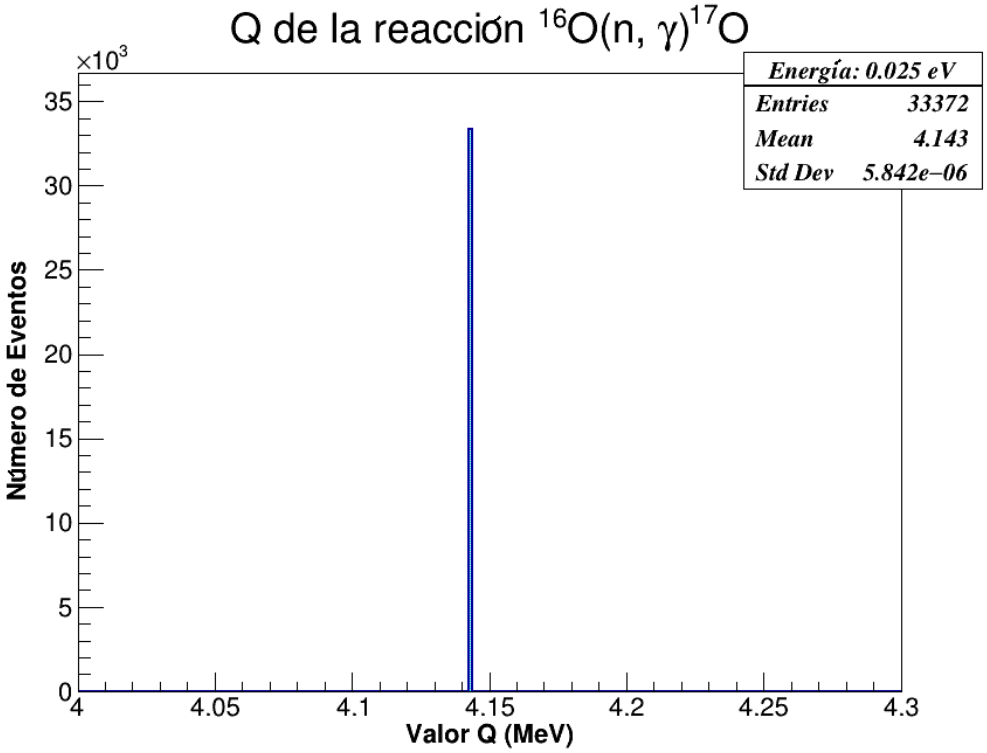


Figura 3.39: Valor Q obtenido con el cambio espacial y energético del haz y con un blanco de O^{16} con forma cilíndrica. **Fuente:** [Autor].

También se puede ver que la cantidad de capturas no cambia significativamente, ya que, para 20.000.000 millones de eventos generados, son capturados 33.372 neutrones,

esto se debe en especial a la forma energética del haz, debido a que los neutrones que son generados con diferentes energías recorren el blanco sin interactuar. Si bien la gráfica de posición cambia un poco en los extremos, aún sigue manteniendo su uniformidad ya que esta pequeña alteración se debe a la distribución espacial (cilíndrica) que se le asigna al haz de neutrones y a la geometría esférica del blanco. Debido a que el haz cuando impacta el blanco, no lo hace inmediatamente en las partes cercanas a los polos de la esfera, por lo que el haz en estas secciones debe recorrer aproximadamente 200 metros para encontrar el blanco y empezar la interacción, lo mismo pasa cuando salen de este, hay algunos que dejan el blanco en las partes más cercas a los polos y lo hacen alrededor de los 1.800 metros.

Nota: *Las cantidades cinemáticas presentadas en este capítulo, fueron calculadas de manera teórica en el apéndice B dado que no se encontraron datos experimentales en la literatura para corroborar su veracidad.*

Capítulo 4

Simulación en agua y tejido con un haz de O^{17} y γ

La liberación de partículas cargadas pesadas de O^{17} y de partículas γ en la captura neutrónica por O^{16} puede ser o no perjudicial dado que pueden penetrar profundamente en el tejido causando daño en la médula ósea y en los pulmones, además de quemaduras profundas en la piel [33], por lo que es importante obtener los valores de energía depositada y LET asociados con estas partículas en su recorrido por el cuerpo humano. Con las cantidades cinemáticas encontradas en el capítulo 3, se harán ajustes en las dimensiones de la geometría de la simulación, el material y tamaño del blanco, así como el tipo de haz que incidirá sobre el blanco. Esto se hace con el fin de mejorar el número de partículas capturadas por el blanco en la obtención de las cantidades de interés, ya que la sección eficaz del O^{16} es muy pequeña (ver subsección1.3.4) en comparación con otros materiales.

4.1. Cambio en la Geometría implementada

Dado el tamaño del tejido humano y las energías cinéticas de las partículas del estado final encontradas en la caracterización cinemática, las cuales difieren aproximadamente en un factor de 1000 (0.0005422 MeV para los O^{17} y de 4.143 MeV para los γ), se utilizarán dimensiones diferentes en la captura de O^{17} y γ para la construcción del blanco. La geometría establecida en la simulación consiste en un volumen principal (world volumen), el cual tiene forma de paralelepípedo que contiene vacío con dimensiones de (25, 25, 25) cm en sus tres ejes coordenados (x, y, z) respectivamente. En su interior contiene un volumen cúbico hecho de agua o tejido con dimensiones de (10, 10, 10) cm, la cara lateral

izquierda del blanco se encuentra ubicada en el centro geométrico del volumen principal, como se observa en la figura 4.1. Se tomaron estas dimensiones para tener condiciones más cercanas a la realidad y visualizar de mejor manera la captura de O^{17} y de las partículas γ.

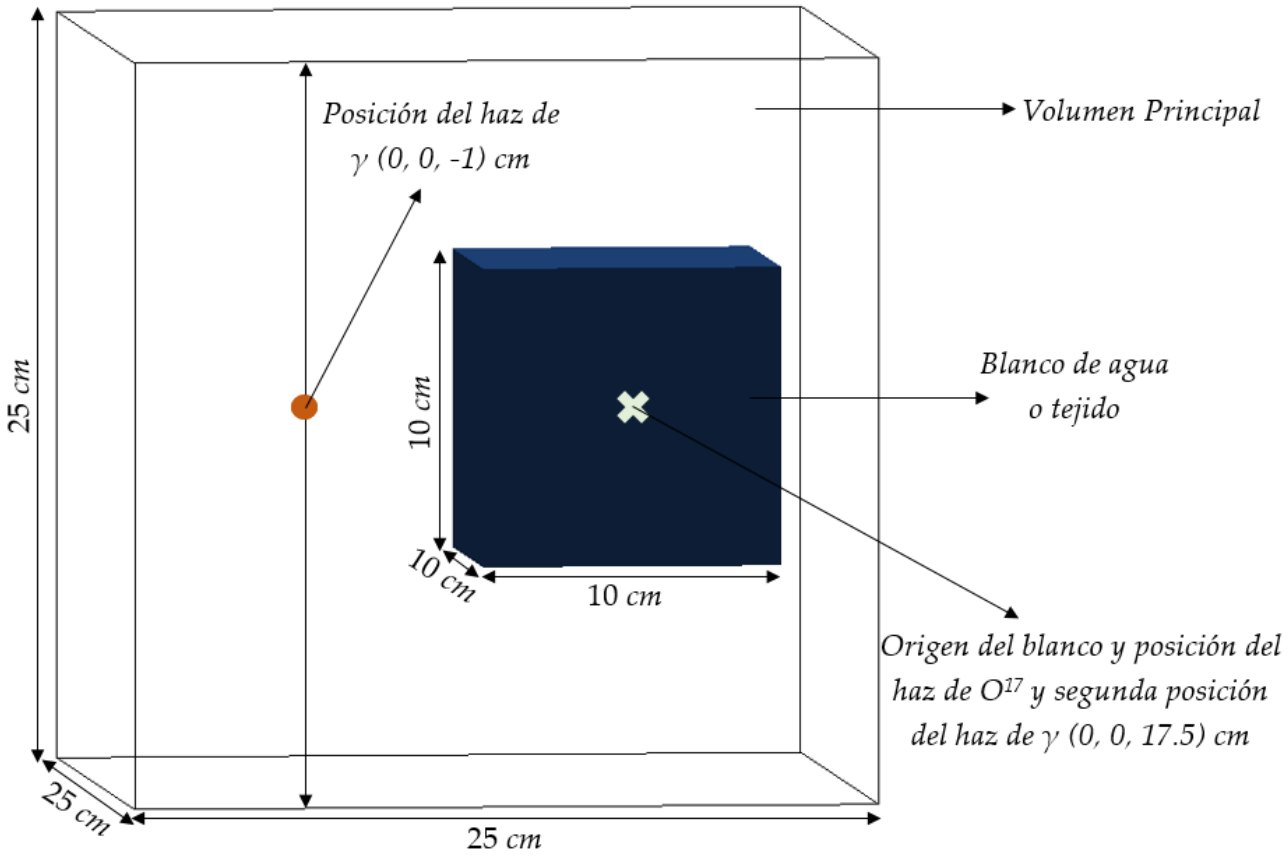


Figura 4.1: Geometría utilizada para un haz de partículas de O^{17} y γ. **Fuente:** [Autor].

4.2. Evento Primario y Lista de Física

El haz incidente (tanto para los O^{17} como para los γ) que se utilizará para encontrar la energía depositada, así como el LET, estará ubicado primero en la posición (0, 0, -1) cm y posteriormente, en el centro geométrico del blanco. El haz estará caracterizado por ser lineal, monoenergético y unidireccional, incidiendo sobre el eje +Z e isotrópico con una energía de 0,0005422 MeV para el O^{17} y una energía de 4,143 MeV para el γ. La física que se implementará en la simulación estará definidas en las librerías: *G4EmStandardPhysics* que cuenta con una variedad de herramientas y modelos de interacción electromagnética para distintas partículas y procesos de interacción como dispersión Compton, efecto foto-

eléctrico, producción de pares, entre otros y *G4HadronPhysicsFTFP_BERT_HP* la cual emplea los modelos de las secciones transversales para describir la dispersión elástica e inelástica, la captura y la fisión nuclear [34] y [25].

4.3. Resultados obtenidos en agua y tejido con haces de O^{17} y γ

Inicialmente, se iba a colocar un bloque sólido de O^{16} en el centro de un segundo bloque más grande hecho de agua, que posteriormente iba a ser irradiado por un haz de neutrones, pero los resultados de la caracterización cinemática y la poca sección eficaz del O^{16} en comparación con la del agua mostraron que elaborar una simulación con esas características no mostraría resultados concisos y suficientes a los cuales se les pudiera realizar un análisis satisfactorio de energía depositada y LET. Por este motivo, se decidió utilizar un blanco puro de agua y otro de tejido, además de sustituir el haz de neutrones por un haz de O^{17} y γ con el fin de realizar mediciones directas sobre los efectos biológicos que podrían causar estas dos partículas resultantes de la interacción del haz de neutrones con iones de O^{16}. En la figura 4.2 se muestra la configuración para el haz lineal utilizado para ambas partículas.

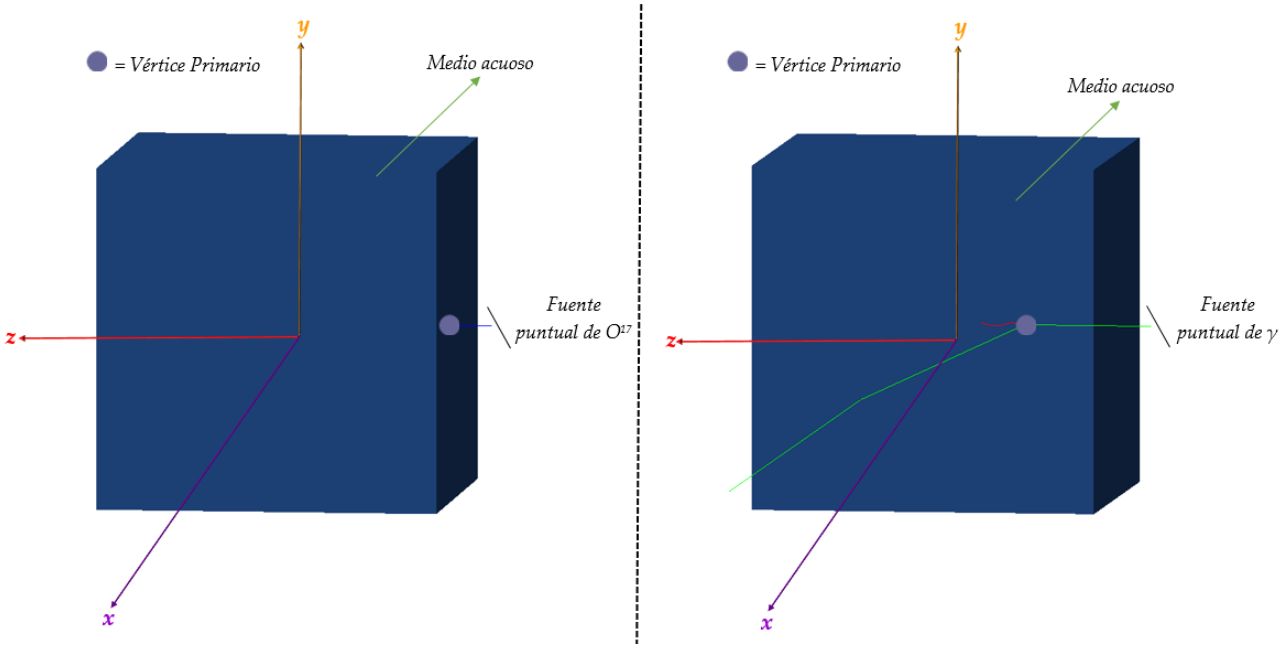


Figura 4.2: Vista del haz incidente de O^{17} (izquierda) y γ (derecha) con forma lineal, además de la interacción resultante en el medio acuoso (derecha). **Fuente:** [Autor].

Ahora, cuando se utiliza una fuente isotrópica de O^{17} en el blanco de agua, está no se puede apreciar y esto se debe a que la interacción de los O^{17} se da en una región tan pequeña del blanco que no se puede observar. En la figura 4.3 se puede observar una fuente isotrópica de γ interactúan y liberando electrones (líneas rojas).

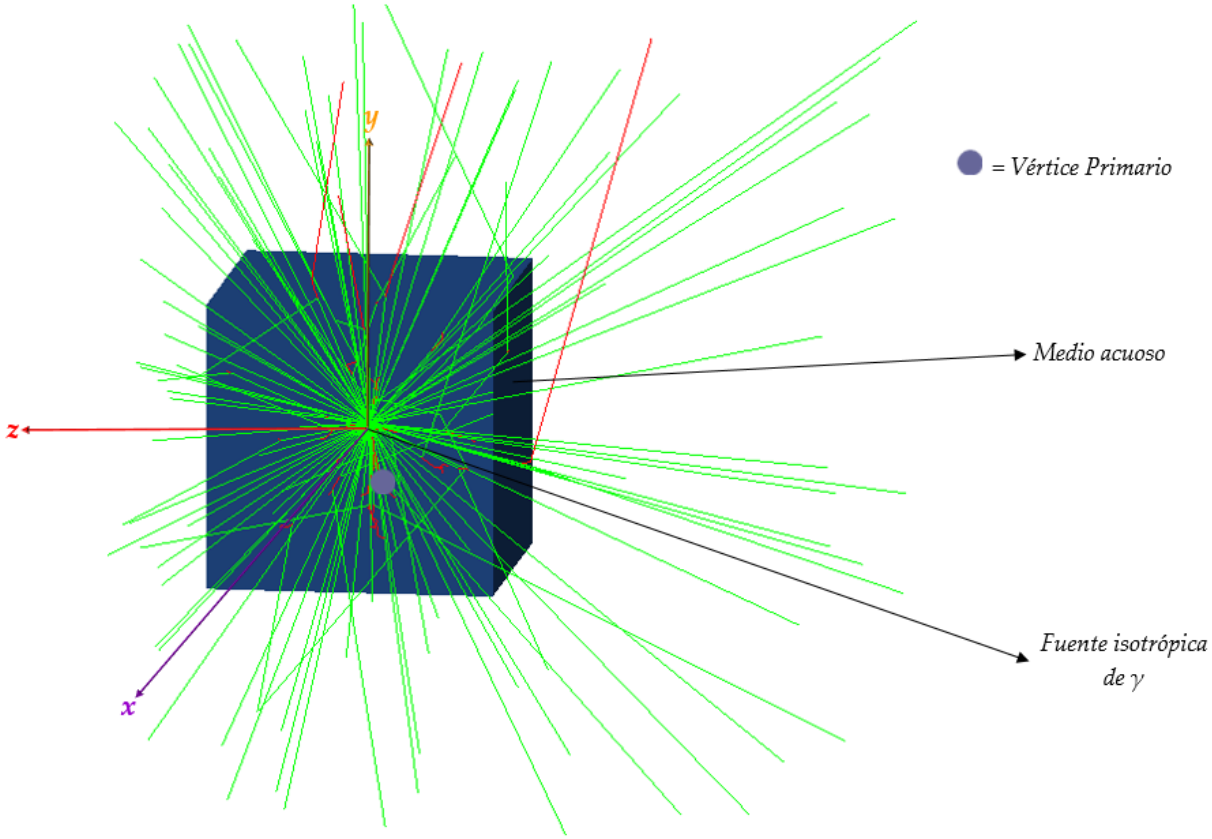


Figura 4.3: Distribución isotrópica de un haz de partículas γ interactúando dentro de un medio acuoso. **Fuente:** [Autor].

4.3.1. Energía depositada en agua por O^{17}

En la figura 4.4 se presenta la energía depositada en agua por parte de un haz lineal de iones de O^{17} con energía de 0.000542 MeV interactuando en el centro del blanco, como se puede observar la energía que se deposita, se distribuye en un punto a lo largo de 0,05 cm del centro del blanco, esto se debe a la poca energía que posee el haz de O^{17} que en consecuencia no permite un recorrido prolongado en el agua.

La energía depositada por los O^{17} es de $10{,}84 \times 10^6\ keV$. Si este valor se divide por la cantidad de O^{17} que componen el haz incidente, se puede observar que en promedio cada O^{17} está depositando aproximadamente 0,542 keV, esto indica que toda la energía

del haz se está depositando en el medio acuoso y además esta deposición ocurre en aproximadamente 5,05 cm.

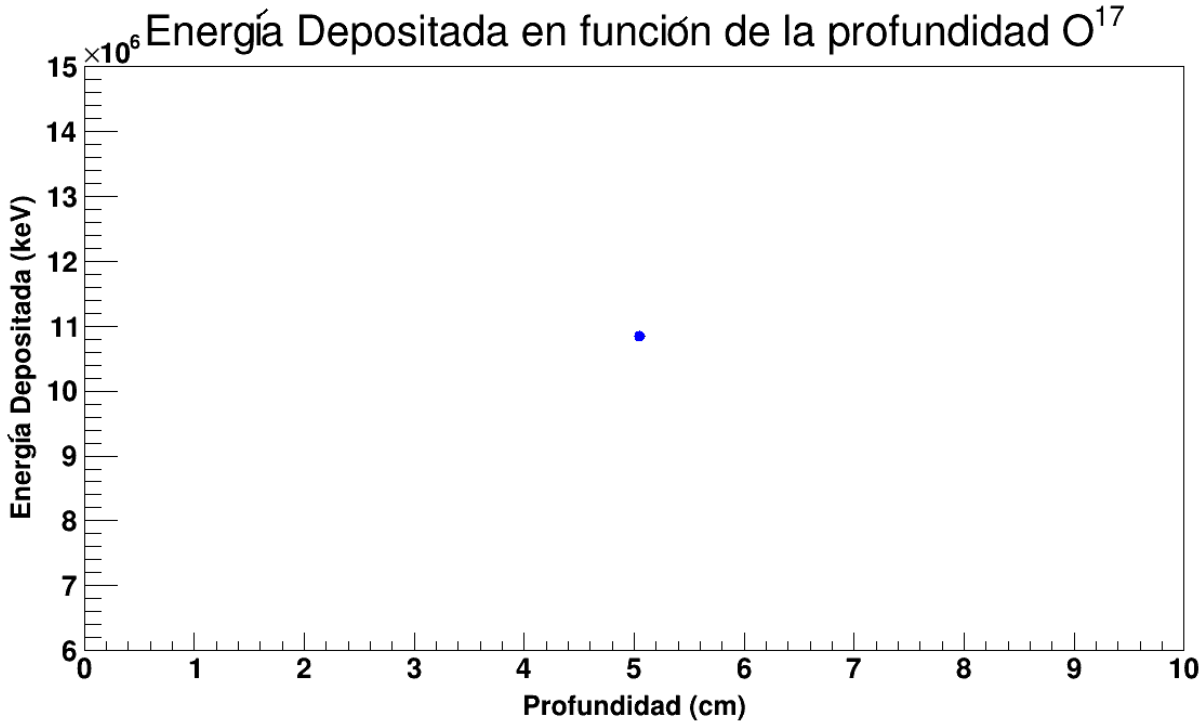


Figura 4.4: Energía depositada por un haz lineal de O^{17}, compuesto por un total de 20.000.000 de eventos con energía de 0.000542 MeV. **Fuente:** [Autor].

Sin embargo, cuando se genera un haz isotrópico de O^{17} con las mismas condiciones que las del haz lineal, se puede observar que la energía depositada en el blanco es $54,21 \times 10^5\ keV$, que en comparación con la encontrada con el haz lineal, disminuye a la mitad, esto se debe a la forma en que los iones de O^{17} son generados, ya que si bien salen en todas las direcciones solo se tienen en cuenta los que vayan a lo largo del eje Z, esto muestra que si el haz va hacia la derecha o a la izquierda la energía se deposita en un punto para cada dirección como se ve en la figura 4.5.

Si se divide la energía depositada total entre la cantidad de partículas generadas, se encuentra que cada O^{17} deposita 0,27105 keV cada 0,025 cm en promedio dentro del blanco, esto muestra que cuando se envían O^{17} en diferentes direcciones, las partículas interactúan en el instante en que son generadas y al igual que en el haz lineal, depositan toda su energía en el blanco, por este motivo es que no se puede apreciar la distribución isotrópica como si se pudo ver para las partículas γ. En la figura 4.5 se puede observar

que la energía depositada tiene el mismo valor, pero se distribuye en partes del blanco bastante cercanas una del otro.

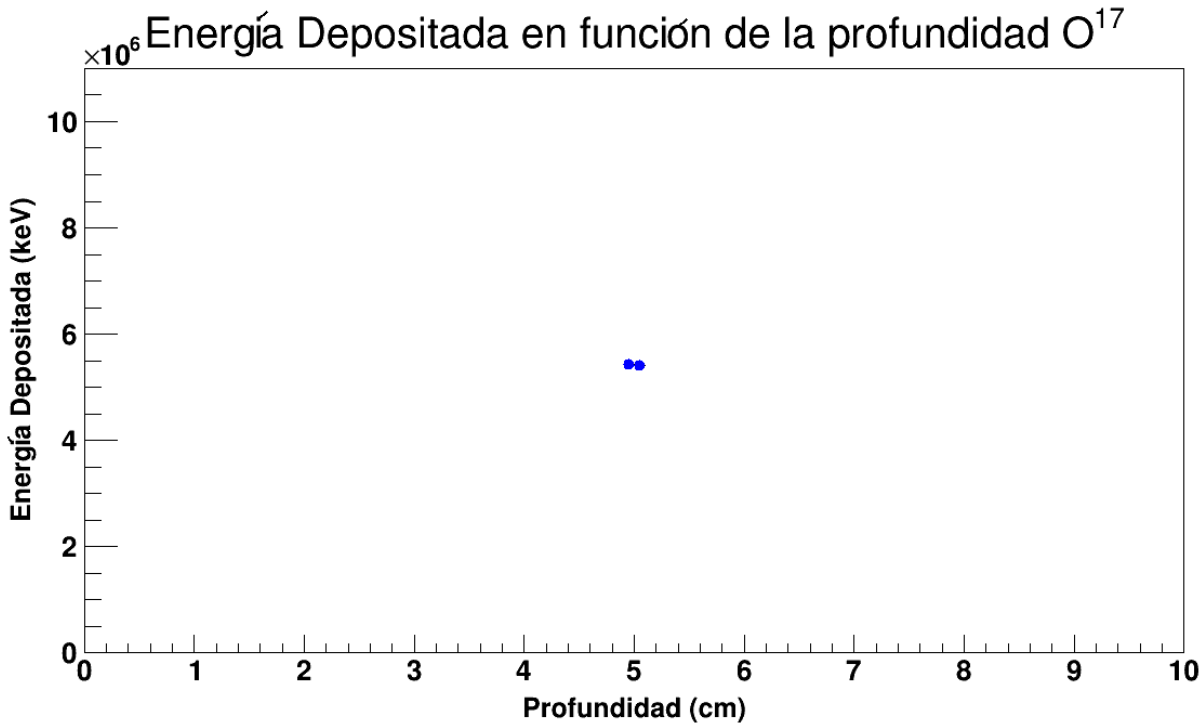


Figura 4.5: Energía depositada por un haz isotrópico de O^{17}, compuesto por un total de 20.000.000 de eventos con energía de 0.000542 MeV. **Fuente:** [Autor].

No se utiliza el haz de O^{17} afuera del blanco porque la deposición de energía se da justo cuando el haz pasa del vacío al material, por lo que la energía depositada queda registrada por fuera del blanco y no es tenida en cuenta por la simulación.

4.3.2. Energía depositada en agua por γ

La figura 4.6 muestra como se distribuye la energía depositada en agua con un haz lineal tanto afuera (panel derecho) como adentro (panel izquierdo) del blanco, con un haz de 20.000.000 de partículas γ que tiene una energía total de 4,143 MeV. La gráfica de la derecha cambia su distribución a partir de los 5 cm y esto se debe a que el haz, cuando se ubica adentro del blanco, solo interactúa con la mitad del mismo, pero cuando está afuera del blanco, interactúa con todo el medio como se ve en la gráfica de la izquierda. La energía depositada en el blanco de agua por parte del haz de γ cuando está afuera es de $1{,}68051 \times 10^8\ keV$ por lo que una sola partícula γ deposita 8,4026 keV en el blanco y lo hace en promedio cada 5,124 cm y cuando está adentro es de $1,67748 \times 10^8\ keV$

con un solo γ depositando 8,3874 keV haciéndolo en promedio cada 7,726 cm; la pequeña diferencia entre los totales de la deposición de energía se debe a la posición del haz. El valor total de energía depositada en el blanco no concuerda con el valor inicial de energía con el que se emitió el haz, ya que si se restringe el recorrido del γ en el blanco, este deposita su energía, pero los pocos γ que logran salir del medio delimitado por la geometría salen con poca energía. La energía depositada por las partículas γ no se da de manera directa, porque al interactuar con el blanco liberan electrones por efecto Compton, estos electrones depositan la energía que tenía el γ, el cual es absorbido por el átomo que compone el tejido y que es con el que está interactuando.

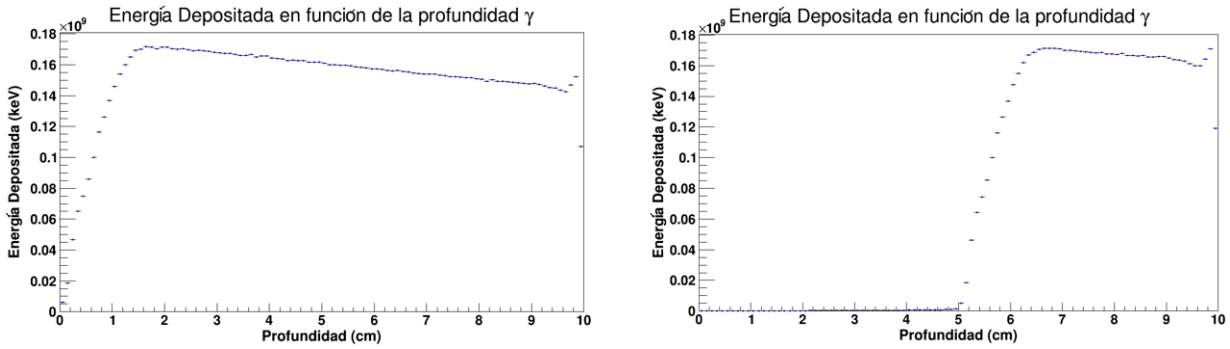


Figura 4.6: Energía depositada por un haz lineal de γ generado afuera (izquierda) y adentro (derecha) del blanco, compuesto por un total de 20.000.000 de eventos con energía de 4,4143 MeV. **Fuente:** [Autor].

Las distribuciones de energía depositada en un blanco hecho de agua por parte de un haz de partículas γ ubicado en diferentes posiciones (ver figura 4.6) concuerdan con las reportadas en la literatura: [35], [36], [37] y [38].

Ahora, utilizando un haz isotrópico con las mismas condiciones que para el haz lineal de γ, se evidencia que la cantidad de energía depositada cambia dependiendo si el haz está afuera o adentro del blanco. Si el haz se encuentra afuera del blanco, la deposición de energía de los γ es de $8{,}5587 \times 10^7\ keV$ en total y un solo γ deposita en 4,27935 keV en aproximadamente 3,099 cm en el blanco; en cambio, si se dispara el haz de γ adentro, hay una deposición de $2{,}01798 \times 10^8\ keV$ e individualmente de 10,089 keV alrededor de 5,002 cm. La diferencia de la energía depositada cuando el haz está afuera y adentro del blanco, es debido a que en el primero, un porcentaje de las partículas γ no interactúa con el blanco y en el segundo si lo hace, por lo que abra más anergía depositada cuando

el haz se encuentra dentro el blanco (ver figura 4.3) y además la profundidad en que lo hacen difieren porque el haz que está adentro puede interactuar instantanemanete con el blanco. En la figura 4.7 se presenta como se da la distribución de energía depositada cuando el haz está afuera (panel izquierdo) y cuando está adentro (panel derecho).

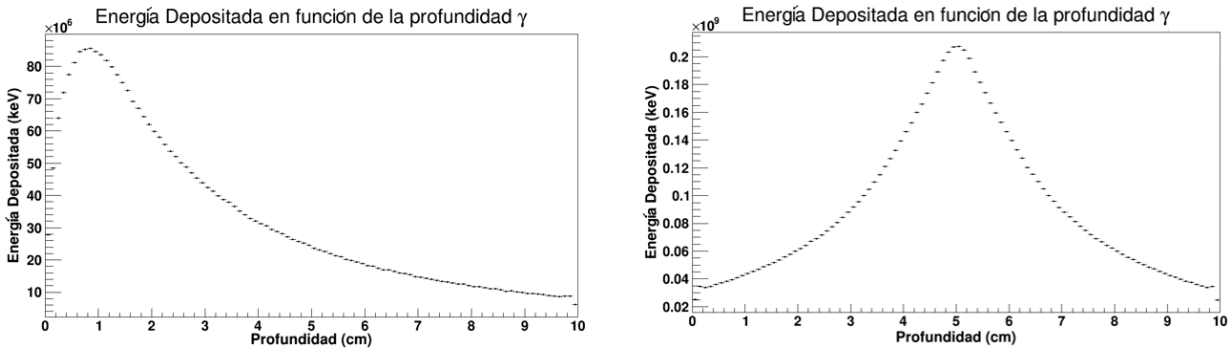


Figura 4.7: Energía depositada por un haz isotrópico de γ generado afuera (izquierda) y adentro (derecha) del blanco, compuesto por un total de 20.000.000 de eventos con energía de 4,4143 MeV. **Fuente:** [Autor].

La distribución de energía depositada que se muestra en la figura 4.7 panel derecho, es distinta a la lineal, ya que el haz, por ser isotrópico, genera partículas en todas las direcciones, pero solo se tendrán en cuenta las que se dirijan a lo largo del eje Z como ya se ha mencionado y este es el motivo de la forma que se muestra en la gráfica. El panel izquierdo de la figura se ajusta a las gráficas encontradas en [39] y [40].

4.3.3. LET en agua de O^{17}

Se determinó el LET, siguiendo lo estándar a nivel Monte Carlo por dos métodos: el LET_t se encuentra ponderando respecto a la fluencia y el LET_d se estima ponderando respecto a la dosis. Si bien, el objetivo no es hacer un estudio exhaustivo de los valores de LET, se observa que hay una similitud entre uno y otro (para más detalles de estas dos cantidades y conocer la forma en que se calculó con Geant4, remitirse al apéndice C, sección C.4).

La figura 4.8 muestra el LET_t, el LET_d y la diferencia entre los dos "$LET_t - LET_d$", obtenidos con un haz lineal de O^{17} ubicado en el centro del blanco con energía de 0,000542 MeV. Se puede observar que los valores de LET son iguales y que se distribuyen en un punto, el LET_t como el LET_d tienen un valor de 11,8285 keV/μm, esto muestra que el

O^{17} posee un LET alto, aunque no tendría efectos secundarios, ya que este es pequeño en comparación con el LET de los litios liberados en BNCT el cual es de 150 keV/μm [22]. La diferencia de los LET (panel derecho) muestra que tienen el mismo valor, pues la distribución está ubicada alrededor de cero, demostrando que los dos LET son iguales.

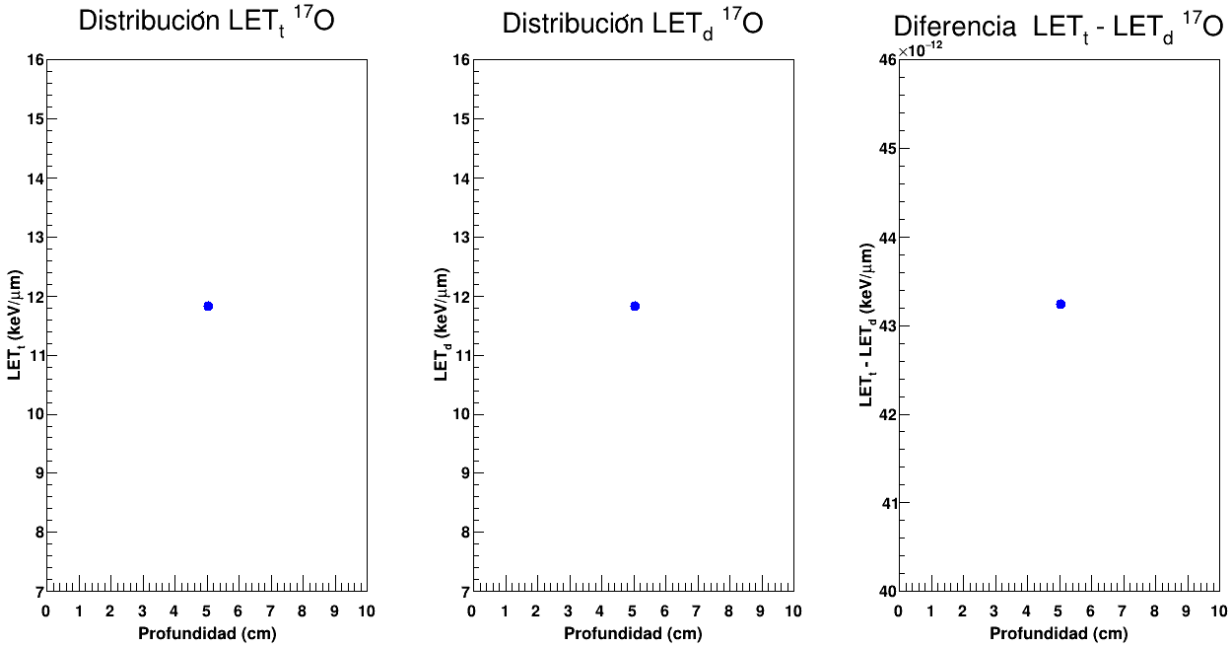


Figura 4.8: LET obtenidos con un haz lineal de O^{17} con energía de 0,000542 MeV: LET_t (derecha), LET_d (centro) y la diferencia entre los LET (izquierda). **Fuente:** [Autor].

A continuación, se presenta la figura 4.10, en donde se puede ver que no hay cambios en los valores de los LET siendo este de 11,8285 keV/μm, ni en sus respectivas restas, manteniéndose esta última alrededor de cero, cuando se utiliza un haz isotrópico de O^{17} con la misma energía y ubicación que para el haz lineal. La única diferencia es la distribución espacial tanto del LET_t como del LET_d, ya que no se distribuye en solo un punto si no en dos y esto se debe a la forma espacial que se le dio al haz, debido a que las partículas salen en todas las direcciones, pero solo se tienen en cuenta aquellas que vayan a lo largo de Z.

Estos resultados del LET concuerdan con lo mencionado en la literatura, ya que entre más pequeña la energía que tenga el ion pesado, en este caso el O^{17}, más LET va a tener este mismo [41]. Pero como ya se mencionó antes, en comparación con otras partículas, este LET es bastante pequeño, por lo que no habrá daño a las células sanas circundantes y las partículas malignas.

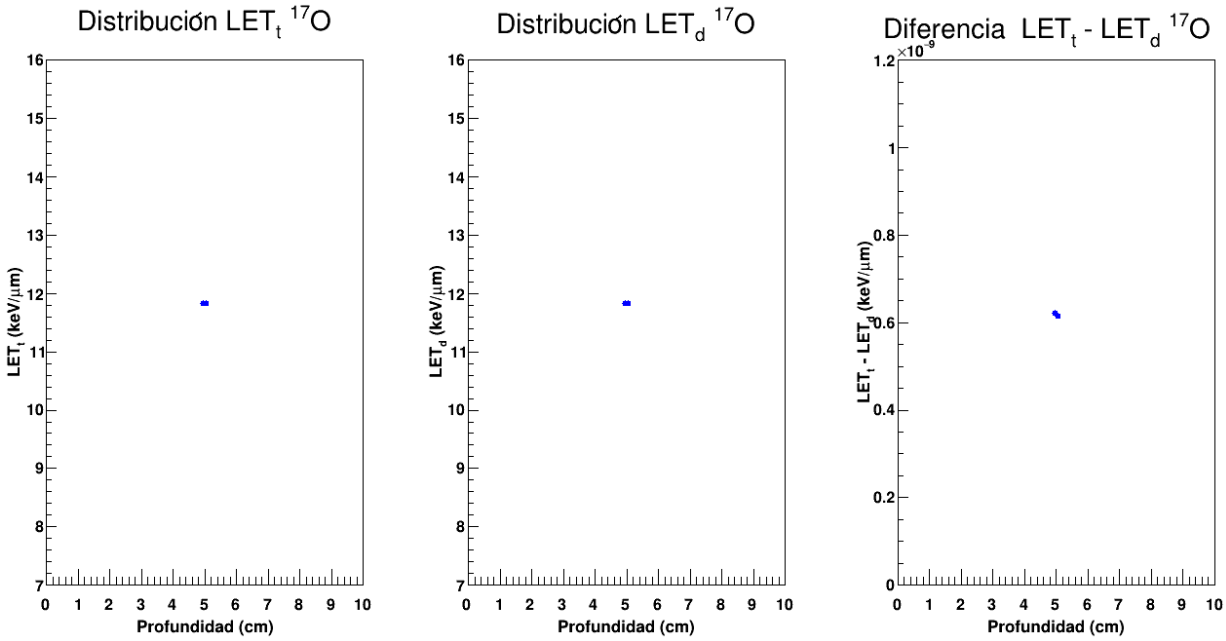


Figura 4.9: LET obtenidos por un haz isotrópico de O^{17} con energía de 0,000542 MeV: LET_t (derecha), LET_d (centro) y la diferencia entre los LET (izquierda). **Fuente:** [Autor].

4.3.4. LET en agua de γ

A continuación, en las figuras 4.10 y 4.11 se muestran las distribuciones LET que se obtuvieron con un haz lineal de γ de energía de 4,143 MeV, incidiendo fuera y dentro del blanco.

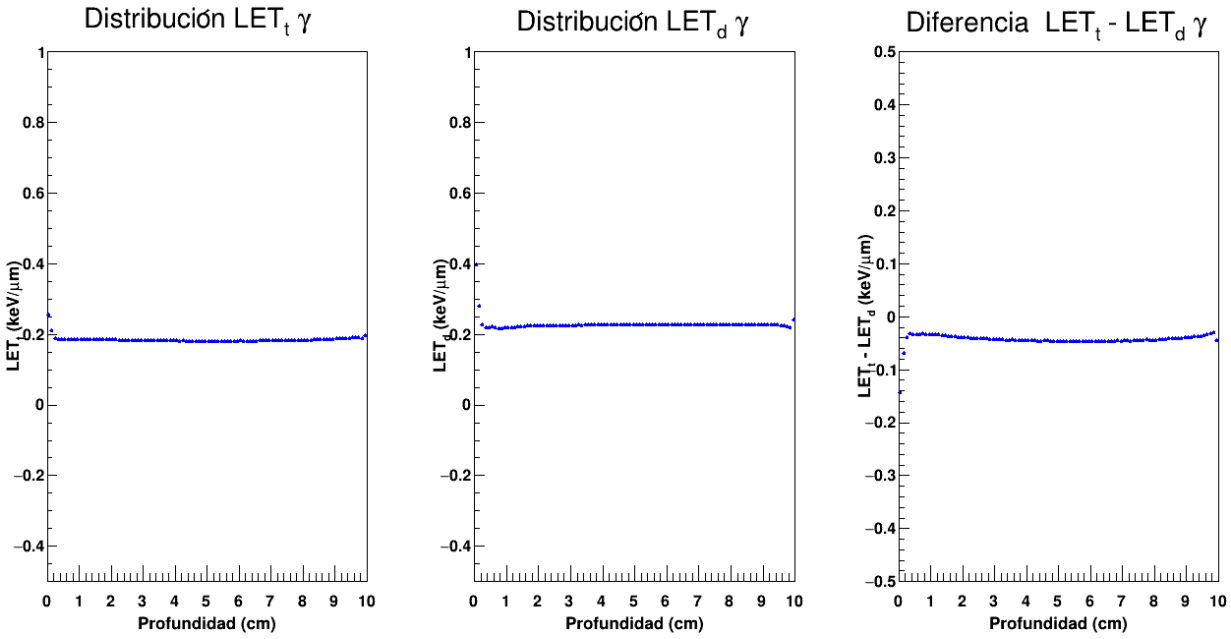


Figura 4.10: LET obtenidos por un haz lineal de γ generado afuera del blanco con energía de 4,4143 MeV: LET_t (derecha), LET_d (centro) y la diferencia entre los LET (izquierda). **Fuente:** [Autor].

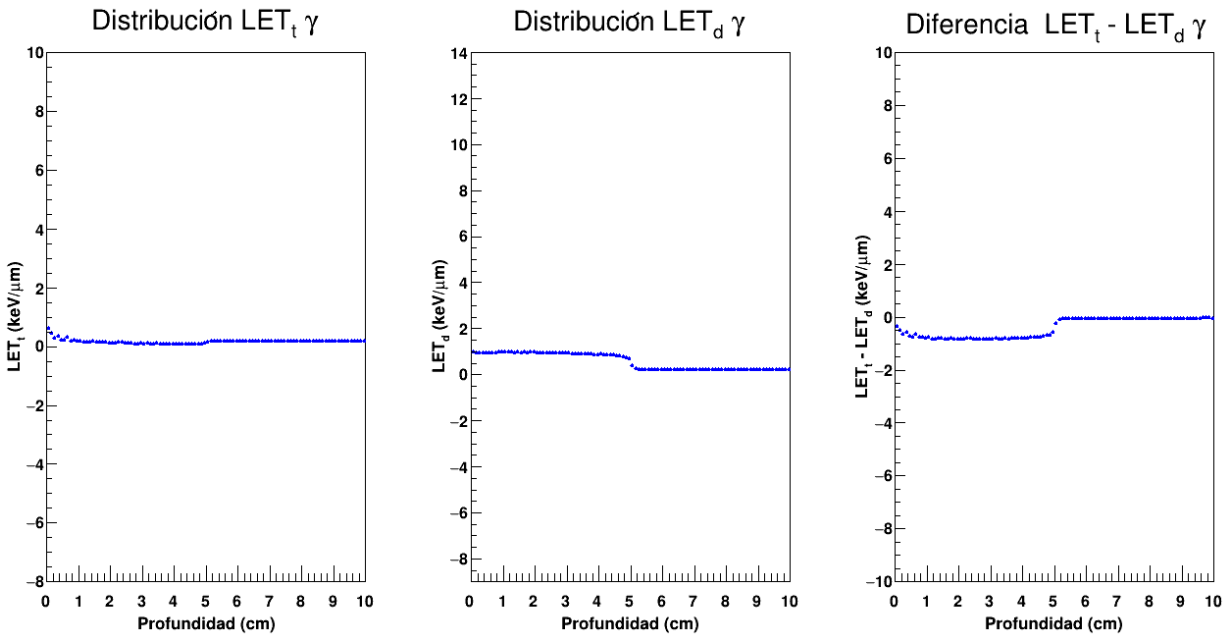


Figura 4.11: LET obtenidos por un haz lineal de γ generado adentro del blanco con energía de 4,4143 MeV: LET_t (derecha), LET_d (centro) y la diferencia entre los LET (izquierda). **Fuente:** [Autor].

Las gráficas muestran que la distribución de los dos LET tienen una tendencia a ser constantes, si bien para la figura 4.10 se ve completamente esta constancia, para la figura 4.11 no se ve esta constancia. Los LET de la figura 4.11 son muy similares entre sí, por lo las ligeras diferencias se pueden deber a diversos factores, entre ellos el paso máximo que puede dar las partículas γ en su recorrido por el blanco; sin embargo, un estudio de la dependencia del LET con el tamaño del paso máximo se sale de los objetivos del trabajo, pero sus valores son del mismo orden, ya que en la gráfica de la parte derecha muestra que su diferencia se encuentra alrededor de cero.

La diferencia entre los LET (panel derecho en ambas figuras) se mantienen cerca al cero, ya que para la figura 4.10 el valor del LET_t es de 0,184403 keV/μm y el LET_d es 0,22772 keV/μm y para la figura 4.11, los valores LET son: 0,169644 keV/μm y 0,57408 keV/μm respectivamente. Los valores encontrados del LET concuerdan con los reportados con la literatura (ver tabla 2.1) [22] y [23]. Como los LET obtenidos son conocidos como *radiación LET baja* (ver subsección 2.1.2), para la radiación de bajo LET, se relaciona una cantidad conocida como: relación de aumento de oxígeno (OER por sus siglas en inglés) el cual para este tipo de radiación tiene un valor de 2,5 y 3, lo que quiere decir que puede

eliminar células que cuentan con presencia de oxígeno, pero no afectaría significativamente a las células de tejido circundante, ya que se producen 0,022 eventos por cada micra (se toma el LET y se divide por la energía depositada [7]), que en comparación con radiación LET alta, es muy pequeña, porque en esta se podrían dar 2.000 eventos por cada micra aproximadamente, por lo tanto, puede haber poca o ninguna interacción entre estos eventos que produzcan daños a la molécula de ADN. Además, según se tiene establecido en la literatura, valores por encima de 95 keV/μm para partículas α [22] o 250 keV/μm para rayos X [42], hacen referencia a partículas con alto potencial para destruir células cancerosas, por lo que las partículas γ poseen un LET despreciable.

Por último, en las figuras 4.12 y 4.13 se observa que los valores LET no cambian significativamente usando un haz isotrópico de γ de 4,143 MeV y 20.000.000 de eventos, que se ubica afuera y adentro del blanco, ya que su distribución espacial no cambia. Los valores LET_tt y LET_d cuando el haz está afuera del blanco son: 0,18485 keV/μm y 0,226103 keV/μm respectivamente y cuando el haz está adentro del blanco son: 0,185475 keV/μm y 0,225874 keV/μm, los valores son diferentes a partir de la diezmilésima cifra decimal por lo que son aproximadamente iguales. En ambos casos la diferencia está cerca de cero, por lo que ambos LET son similares y no influye la manera en que se halla.

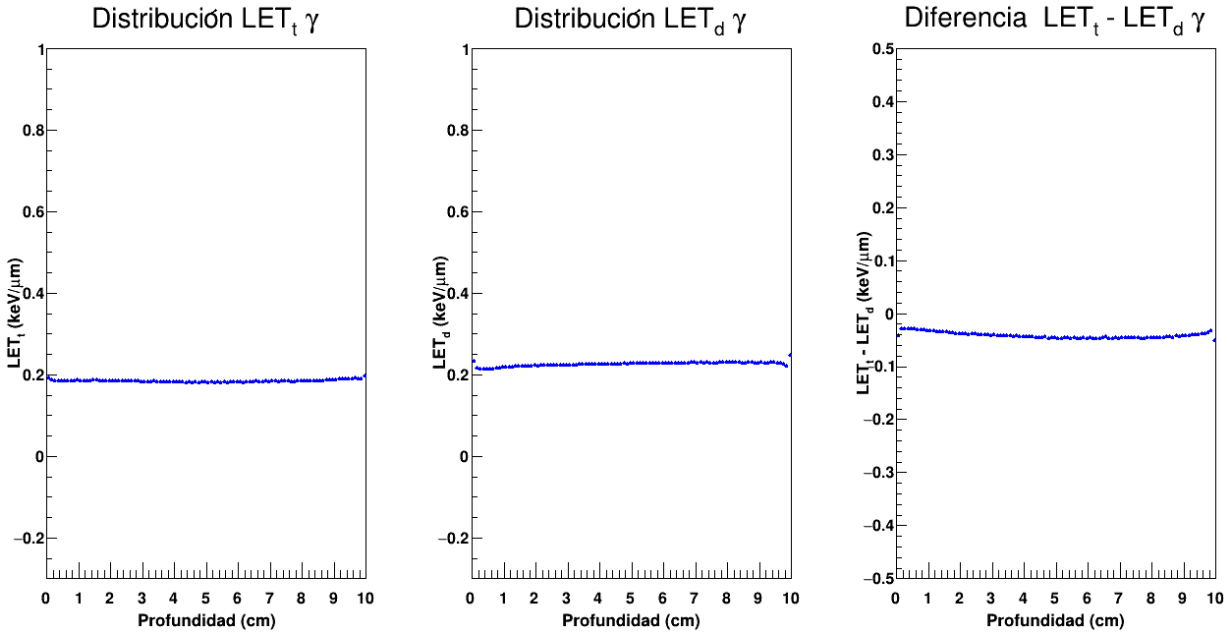


Figura 4.12: LET obtenidos por un haz isotrópico de γ generado afuera del blanco con energía de 4,4143 MeV: LET_t (derecha), LET_d (centro) y la diferencia entre los LET (izquierda). **Fuente:** [Autor].

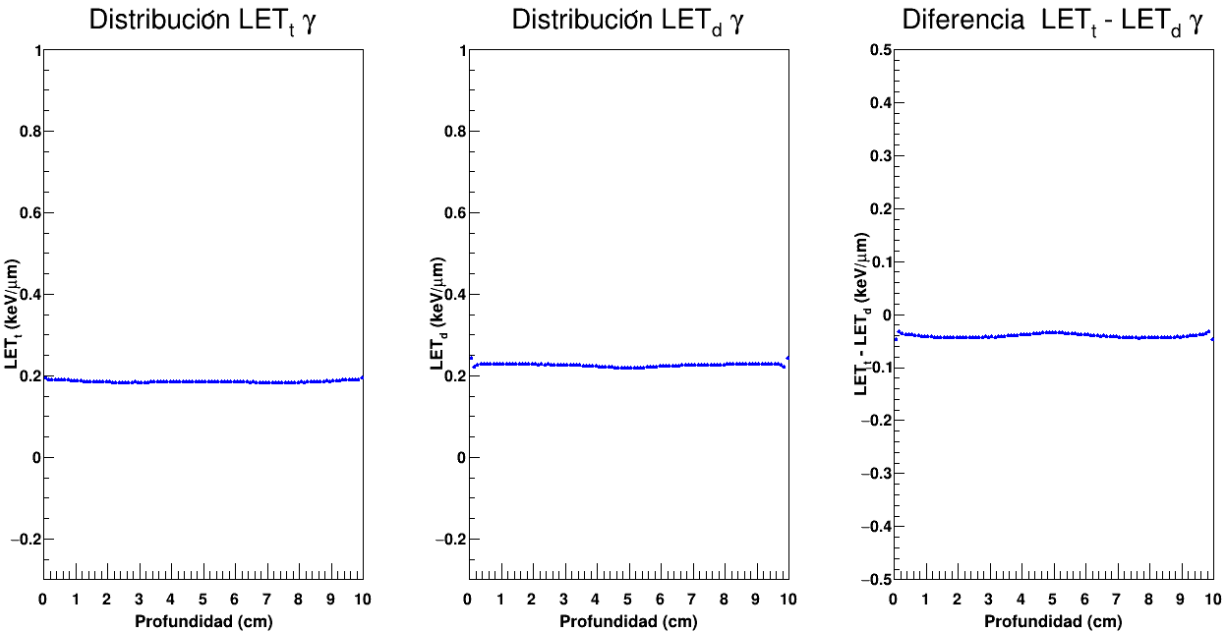


Figura 4.13: LET obtenidos por un haz isotrópico de γ generado adentro del blanco con energía de 4,4143 MeV: LET_t (derecha), LET_d (centro) y la diferencia entre los LET (izquierda). **Fuente:** [Autor].

4.3.5. Energía depositada en tejido por O^{17}

La idea principal en este apartado, es reproducir la simulación, pero en condiciones cercanas a las reales, por ende el material con el que está hecho el blanco será de tejido, con una concentración de B^{10} al 0,003 %, el haz de O^{17} tendrá una energía de 0,000542 MeV y 20.000.000 de eventos, será isotrópico y lanzado adentro del material dadas las condiciones ya mencionadas del O^{17}.

A continuación, se presentan los resultados obtenidos en la figura 4.14, en esta gráfica se presenta la distribución de energía depositada por parte de los O^{17} en el tejido, cuyo valor coincide con el obtenido en agua, por lo que cada ion de O^{17} deposita 0,27105 keV cada 0,025 cm en promedio dentro del blanco.

La energía depositada en tejido es igual que la que se depositó en agua, lo que indica que los iones de O^{17} reaccionan de la misma manera con las partículas que componen el tejido y con las que componen el agua, depositando la misma cantidad de energía en la misma profundidad del blanco al rededor de dos puntos por la forma isotrópica que se le da al haz incidente.

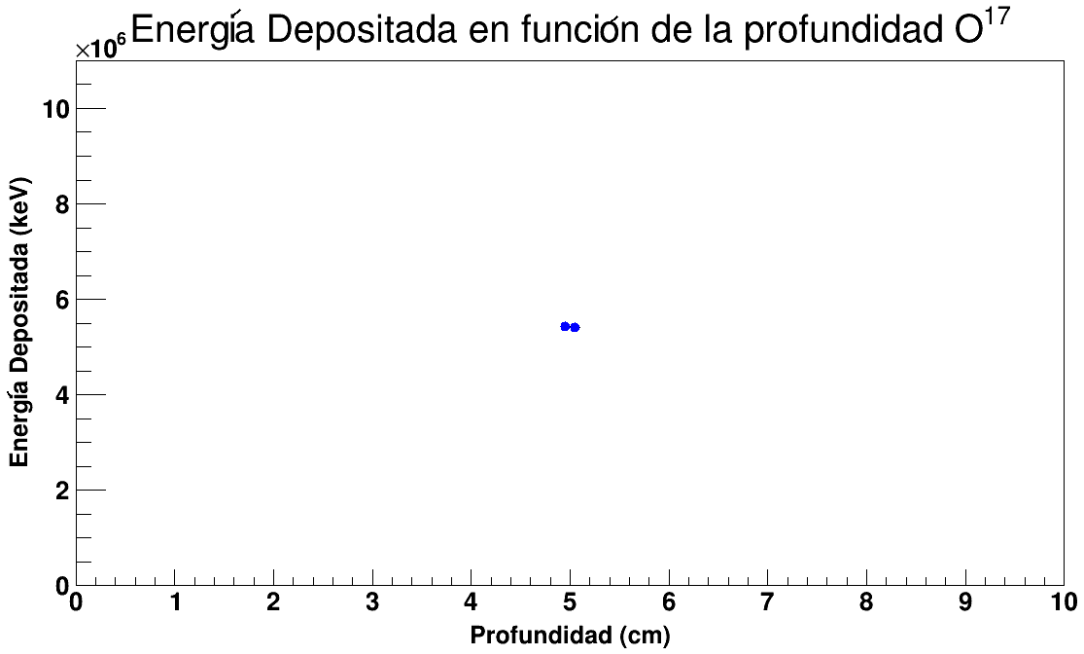


Figura 4.14: Energía depositada por un haz isotrópico de O^{17}, compuesto por un total de 20.000.000 de eventos con energía de 0.000542 MeV adentro de un blanco hecho de tejido con 0,003 % de B^{10}. **Fuente:** [Autor].

4.3.6. Energía depositada en tejido por γ

Ahora, la figura 4.15 expone la energía depositada por un haz de γ isotrópico, generado afuera del blanco compuesto de tejido con 0,003 % de B^{10} que tiene energía de 4,143 MeV.

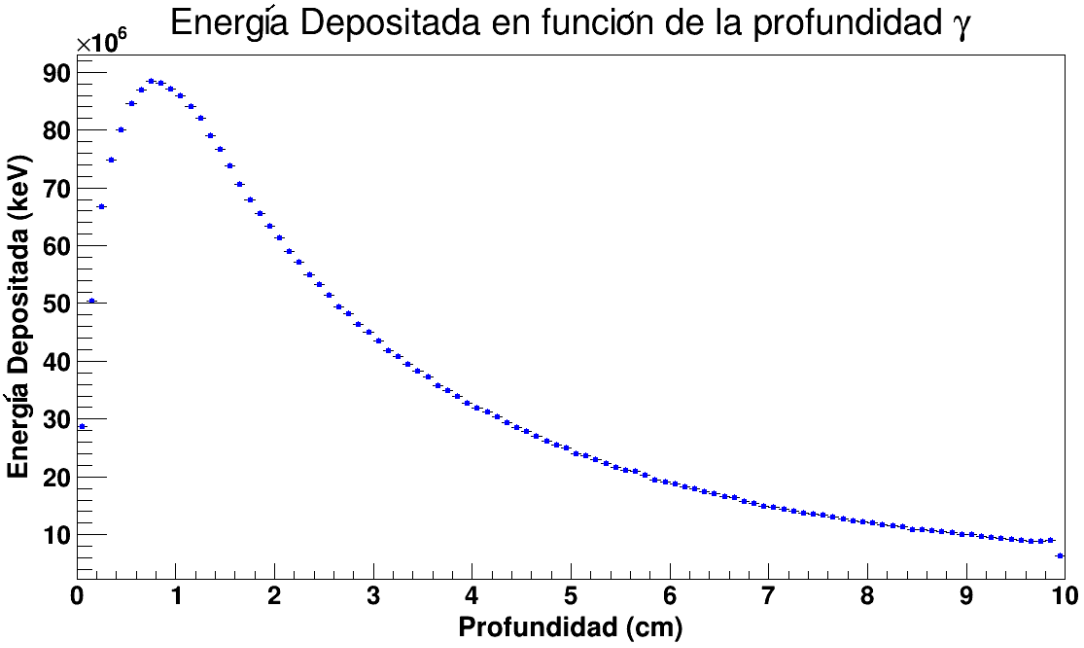


Figura 4.15: Energía depositada por un haz isotrópico de γ, compuesto por un total de 20.000.000 de eventos con energía de 4,143 MeV fuera de un blanco hecho de tejido con 0,003 % de B^{10}. **Fuente:** [Autor].

A partir de la gráfica de energía depositada por partículas γ, se puede evidenciar que no hay cambio en la distribución espacial. Pero hay un aumento de la deposición de energía, ya que su valor es de $8,84573 \times 10^7$ keV y cada γ deposita 4,423 keV en promedio cada 3.084 cm, esto se debe a las reacciones generadas por las partículas secundarias (electrones secundarios y fotones de dispersión) que se generan, dado que la cantidad de interacciones aumenta debido a la cantidad de elementos que componen al tejido, lo que ocasiona reacciones extras que contribuyen a la deposición de energía.

4.3.7. LET en tejido de O^{17}

En la figura 4.16 exhibe los LET de los iones de O^{17} con un haz isotrópico de 0,000542 MeV. Si bien el LET_t y el LET_d tienen el mismo valor, se puede evidenciar el aumento que tienen en el tejido con respecto al encontrado en agua, ya que tienen un valor de 16,5518 keV/μm cada uno, esto se debe a que las interacciones que aumentan debido al medio que se utiliza. Aunque, el LET es alto (ver subsección 2.1.2) no hay un riego biológico significativo porque hay 0,065 eventos por micrómetro [43], por ende las células y la estructura de ADN no se ven afectadas por el alto LET que tiene el O^{17} y en comparación con otro tipo de ración es pequeño. La diferencia entre los LET (panel derecho) muestra que los LET son muy cercanos, debido a que está alrededor de 0.

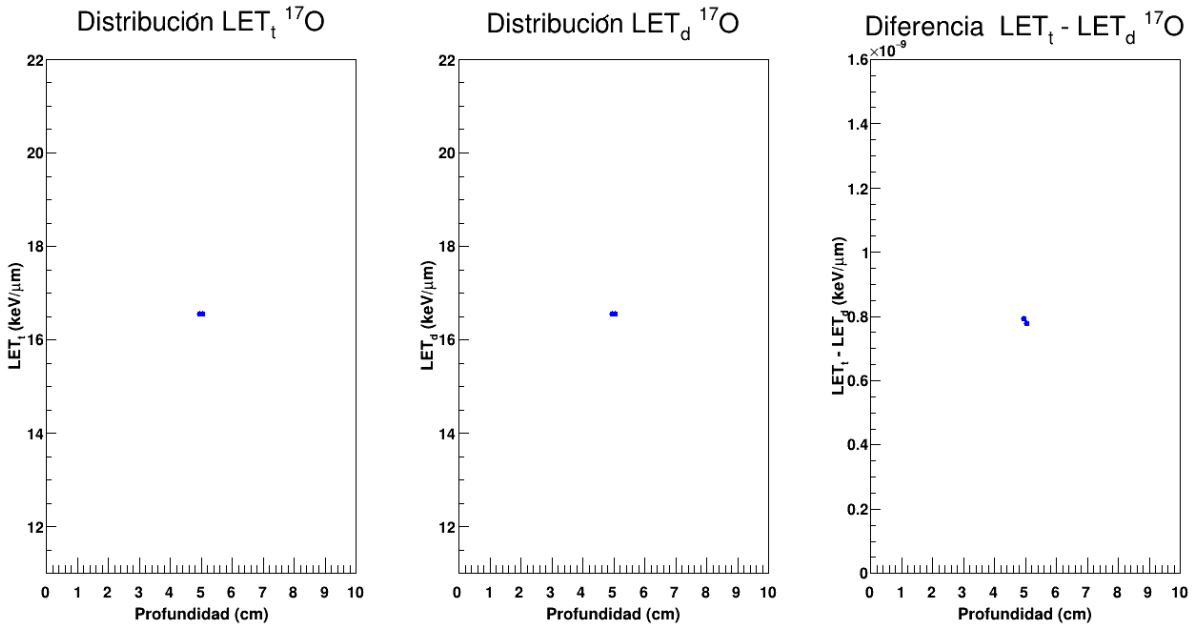


Figura 4.16: LET obtenidos por un haz isotrópico de O^{17} generado dentro del blanco de tejido con energía de 0,000542 MeV: LET_t (derecha), LET_d (centro) y la diferencia entre los LET (izquierda). **Fuente:** [Autor].

4.3.8. LET en tejido de γ

Finalmente, la figura 4.17 muestra los LET obtenidos con un haz isotrópico de γ que tiene energía de 4,143 MeV incidencidiendo desde afuera del blanco de tejido, como se puede apreciar, tanto el LET_t como el LET_d sufren un pequeño aumento con respecto a los LET obtenidos en agua, estos valores son: 0,19232 keV/μm y 0,23499 keV/μm respectivamente. Este aumento se debe a las nuevas interacciones que tienen los γ primarios con el blanco, no obstante el cambio no es considerable porque los LET siguen siendo bajos, por lo que no hay un riego biológico relevante [7].

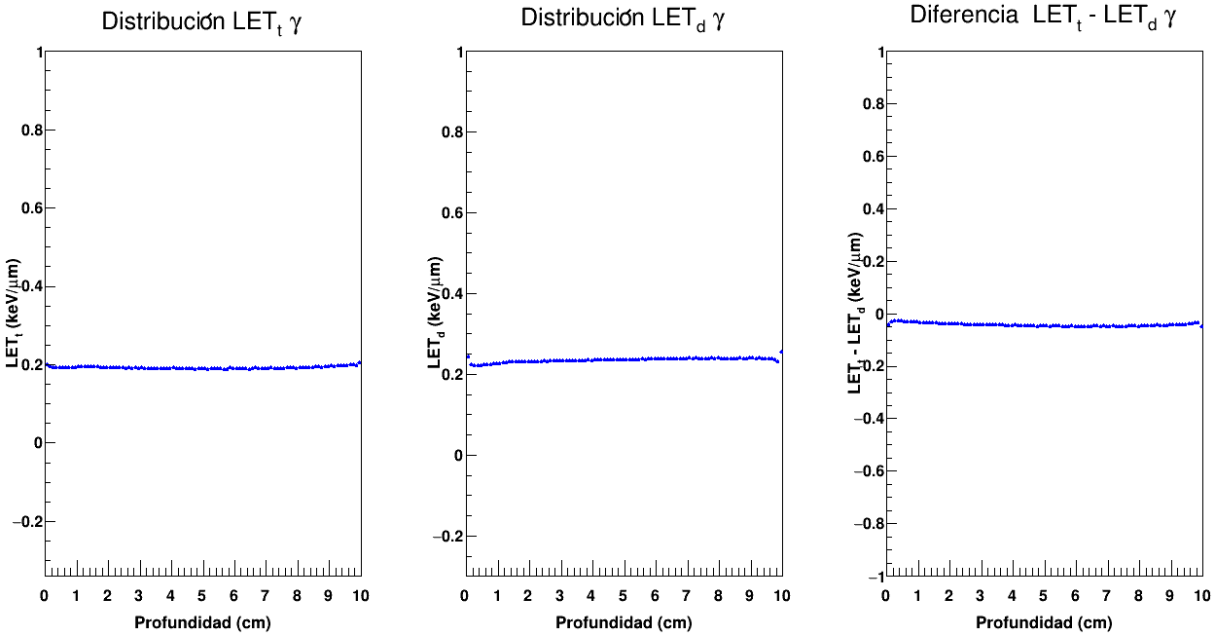


Figura 4.17: LET obtenidos por un haz isotrópico de γ generado afuera del blanco de tejido con energía de 4,143 MeV: LET_t (derecha), LET_d (centro) y la diferencia entre los LET (izquierda). **Fuente:** [Autor].

4.4. Aspectos adicionales en la simulación

A manera de validar el código elaborado para el cálculo de la energía depositada y LET, se utilizó una herramienta adicional que ofrece Geant4, estándar en el cálculo de deposición de energía conocida como *mesh* (malla), con la cual se cubre el material haciendo la detección de energía depositada más sensible a las reacciones que se puedan generar en el interior del objetivo cuando se envia el haz [27]. En aras de mostrar su efectividad, se encontrará la energía depositada para los O^{17} como para los γ. El haz de

O^{17} tendrá una distribución espacial isotrópica y se genera adentro del blanco, tiene una energía de 0,000542 MeV con 20.000.000 de eventos y el haz de γ también será isotrópico, pero este se genera fuera del blanco con energía de 4,143 MeV con 20.000.000 de eventos.

4.4.1. Energía depositada en tejido por O^{17} usando el *mesh*

En la figura 4.18, se muestra el *mesh*, el cual tiene una tonalidad blanca con una franja roja la cual indica donde está incidiendo e interactuando el haz. Entre las funciones del *mesh*, hay una que permite dividir el blanco en la cantidad que se desee, con el fin de hacer el paso de la partícula más fina y con esto hacer la detección de la energía depositada aún más sensible, por lo que se dividió el blanco en 1.000 partes iguales.

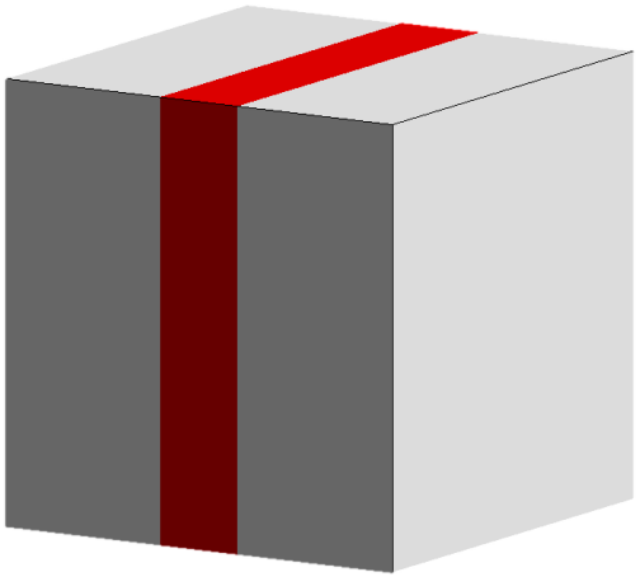


Figura 4.18: Ilustración del *mesh* (color blanco) e interacción de los O^{17} en el medio (franja roja) a lo largo del ejer Z. **Fuente:** [Autor].

Como se presenta en figura 4.19, se puede observar que la energía depositada por el haz de O^{17} se da alrededor de un punto y tiene un valor de $10{,}84 \times 10^6$ keV en promedio, lo cual coincide con los resultados obtenidos en la figura 4.4, si bien se utilizó un haz isotrópico, los cambios en la distribución espacial en la figura se deben a la sensibilidad que tiene la malla porque registran todo al rededor de un punto. Con este resultado se puede validar que los resultados obtenidos concuerdan, ya que por dos métodos diferentes se encontró que la energía depositada por los O^{17}, es la misma para un blanco hecho de tejido con 0,003 % de B^{10}.

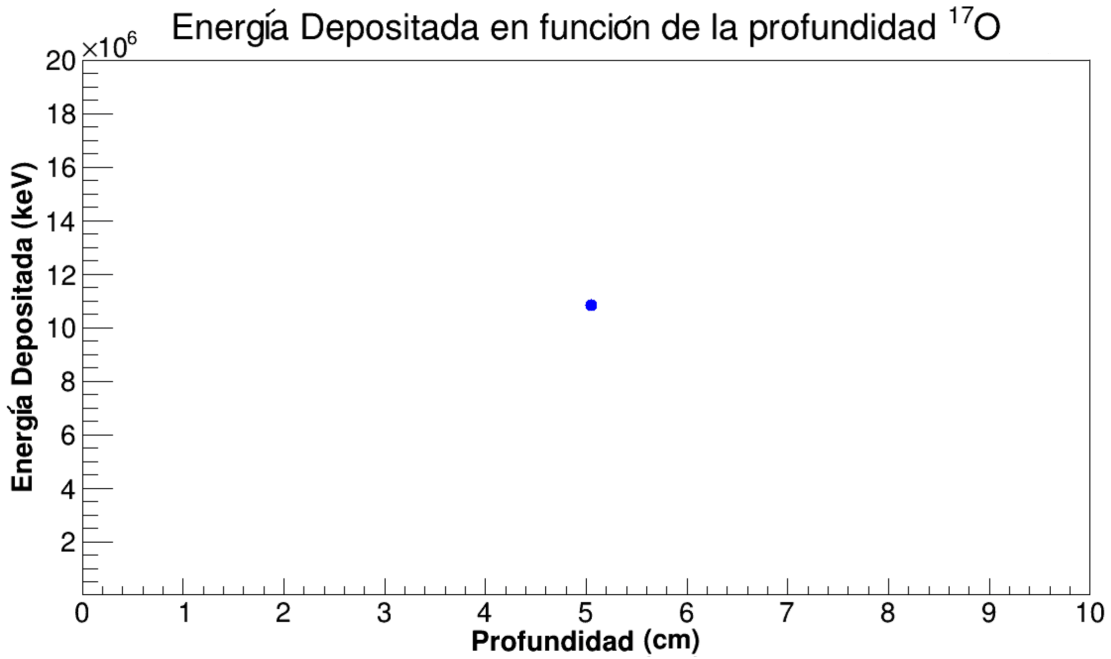


Figura 4.19: Energía depositada por un haz isotrópico de O^{17}, compuesto por 20.000.000 de eventos con energía de 0,000542 MeV implementando el *mesh*. **Fuente:** [Autor].

4.4.2. Energía depositada en tejido por γ usando el *mesh*

La figura 4.20, muestra al blanco recubierto por el *mesh*, se puede observar que hay franjas de diversos colores. El color rojo indica que en ese lugar se dan gran parte de las interacciones, las cuales son las responsables de la deposición de energía en el medio y entre menos intensidad en el color, menos energía depositada habrá en esas regiones.

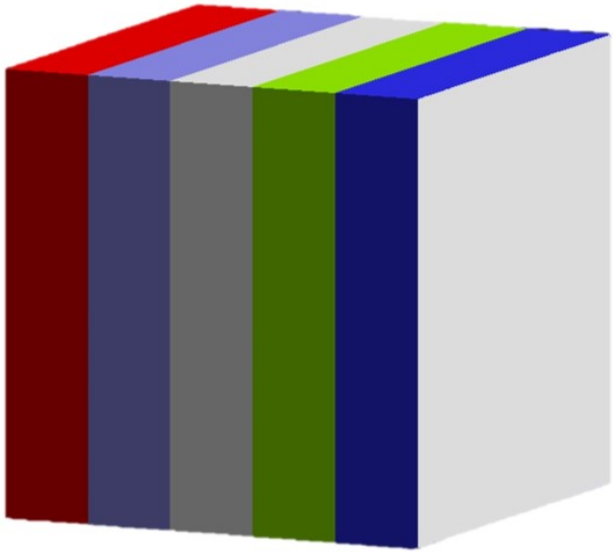


Figura 4.20: Ilustración del *mesh* (color blanco) e interacción de los γ en el medio (franja roja) a lo largo del ejer Z. **Fuente:** [Autor].

El blanco se dividió en 5 partes iguales, esto se hizo con el fin de mejorar la detección de la deposición de energía por parte de las partículas secundarias en el medio, obteniendo la figura 4.21, en ella se puede evidenciar que la energía depositada es liberada en su gran mayoría al inicio del blanco y va disminuyendo a lo largo del mismo, por eso se ve un pico y posteriormente decrece. Así mismo, se puede ver que la gráfica conserva su distribución espacial y coincide con la obtenida en la figura 4.15 y el valor de energía depositada son bastante cercanos, ya que bajo estas condiciones, la deposición de energía que se da en el tejido por parte de un haz isotrópico de γ es de $8,8116 \times 10^7$ keV.

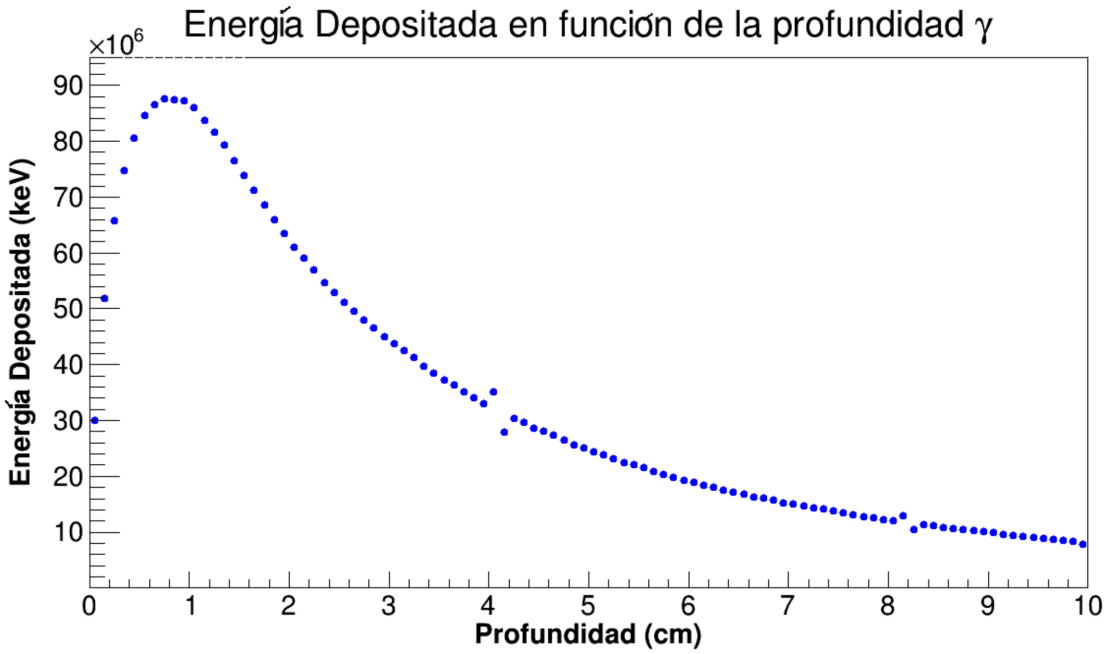


Figura 4.21: Energía depositada por un haz isotrópico de γ, compuesto por 20.000.000 de eventos con energía de 4,143 MeV implementando el *mesh*. **Fuente:** [Autor].

Con esto, se valida que por dos métodos: extrayendo información de la simulación y usando un método estándar como el *mesh*, se obtienen las mismas distribuciones espaciales en las gráficas y los mismos valores de energía depositada.

Conclusiones

A partir de los resultados obtenidos de la caracterización cinemática mostrados en el capítulo 3 y de la energía depositada y LET del capítulo 4, se concluye que:

- Dentro de la literatura obtenida de la reacción de captura neutrónica por O^{16}, no se encontró referencias específicas a los valores de energía cinética promedio de los iones de O^{17} y partículas γ. Sin embargo, a modo de verificar se realizó un cálculo analítico dos a dos en el que se encuentra que los valores obtenidos de la simulación concuerdan con los valores obtenidos en dicho cálculo (ver apéndice A.6, sección B.2). Adicionalmente, se realizó un cálculo de valor Q de la reacción utilizando las energías cinéticas que fueron halladas por Geant4 y este valor coincide con el obtenido de la simulación y con el que se encontró en la literatura (ver apéndice A.6, sección B.1 y [30]).

- Las partículas son emitidas de manera *back to back*, en otras palabras forman un ángulo de 180° cuando son emitidas.

- La velocidad con la que es emitido el O^{17}, demuestra que se puede hacer uso de modelos clásicos, debido a que está muy por debajo de la velocidad de la luz, lo que permite no considerar modelos relativistas.

- La colisión entre el neutrón y el O^{17} resulta ser exotérmica, ya que el valor Q de la reacción es mayor a cero; lo cual indica que la reacción puede darse sin importar la energía del haz, lo que implica un aumento en la energía cinética mientras hay una pérdida de energía potencial interna. El valor Q de la reacción coincide con el valor reportado en la literatura [30]

- La captura de los neutrones por parte de los O^{16} se distribuye uniformemente en el

bloque mostrando que la captura se da aproximadamente en la mitad del blanco.

- El tamaño del blanco y la energía del haz incidente influyen en la captura neutrónica. Por este motivo se elige un blanco con dimensiones de 2 km por cada lado, para obtener distribuciones cinemáticas acorde a la cantidad de neutrones capturados, ya que con 20.000.000 de eventos generados solo 41.777 neutrones interactúan con el blanco. Sería bastante difícil obtener las mismas distribuciones y el mismo número de capturas con dimensiones como las del tejido humano. En este caso, sería necesario emitir una cantidad enorme de neutrones en comparación con los 20.000.000 ya mencionados para lograr resultados similares a los expuestos en este trabajo.

- El cambio tanto en la forma espacial como en la forma energética del haz de neutrones y el cambio en la geometría del blanco, no influyen en las cantidades cinemáticas de interés.

- Toda la energía de los iones de O^{17} es depositada en el blanco de agua cuando se utiliza un haz lineal, dándose en un solo punto y hay mayor concentración en las zonas más cercanas a la fuente, lo cual indica que la deposición se da localmente. Cuando se usa un haz isotrópico, la energía se deposita en dos puntos muy cercanos a donde se genera el haz y coincide con el valor que la obtenida con el haz lineal. Utilizando tejido y un haz isotrópico de O^{17} la deposición de energía sigue siendo la misma y las distribuciones no cambian a lo largo del eje Z.

- Un alto porcentaje de partículas γ depositan su energía en el medio, ya que dependiendo el tipo de haz que se utilice y en la posición que se ubique, la energía depositada puede disminuir o no. Las gráficas de deposición de energía concuerdan con las encontradas en la literatura tanto para agua [35], [36], [37], [38], [39] y [40] como para tejido [44], [45] y [46].

- Las partículas γ poseen un valor bajo LET de aproximadamente 0,206061 keV/μm, dado que la cantidad de eventos que se pueden dar por micra son muy pocos en comparación con la radiación α [23] por lo que no causan daños significativos a nivel celular [22], [47] y [23].

- Los iones de O^{17} tienen un alto LET cercano a los 12 keV/μm [41], pero la cantidad

de eventos que se dan por micra son muy pocos, y en comparación con iones pesados que tienen un LET entre 100 y 2.000 keV/μm [42], su valor es local y despreciable.

- El valor LET se obtuvo de dos formas distintas y al comparar los resultados, se puede evidenciar que ambos rondan el mismo valor, esto se observó al realizar la diferencia entre los dos, ya que se encuentra cercana a cero, por lo que no importa porque método se obtenga, sus valores serán muy similares.

- Se pudo validar que los resultados obtenidos de energía depositada por la elaboración de código concuerdan por el método estándar integrado en Geant4 llamado *mesh*.

Apéndice A

Distribuciones cinemáticas restantes

En este anexo se encontraran las diferentes distribuciones de la caracterización cinemática de las partículas del estado final (γ y O^{17}) como: energía cinética, momento, ángulo polar y azimutal, posición (vértice primario), velocidad y valor Q, en los diferentes rangos de energía del haz de neutrones (0.025, 0.220, 0.415, 0.610, 0.805 y 1) eV que inciden en un *phantom* (maniquí) puro de O^{16}. Este anexo se hace con el fin de no saturar el documento con muchas gráficas, ya que el análisis de estas, es el mismo que se hace en el capítulo 3, por ende, carece de sentido colocarlas en el capítulo ya mencionado dado que en el capítulo de conclusiones se dan las deducciones que se encuentran de ellas.

Los cambios que en ellas se pueden observar no afectan a los análisis que se hacen en el capítulo 3 ya que el ancho de las gráficas no cambia significativamente. Los errores asociados a estas cantidades se encuentran de la misma manera que se hace en el capítulo de la caracterización cinemática.

En las gráficas de las diferentes distribuciones se pueden observar la cantidad de neutrones capturados, la energía media con la que son expulsadas tanto los O^{17} como de las partículas γ y el ancho que tienen las diferentes distribuciones llamada desviación estándar (Std Dev por sus siglas en inglés). A continuación, se muestran todas las distribuciones obtenidas en la caracterización cinemática.

A.1. Distribución de energía cinética del O^{17} y γ:

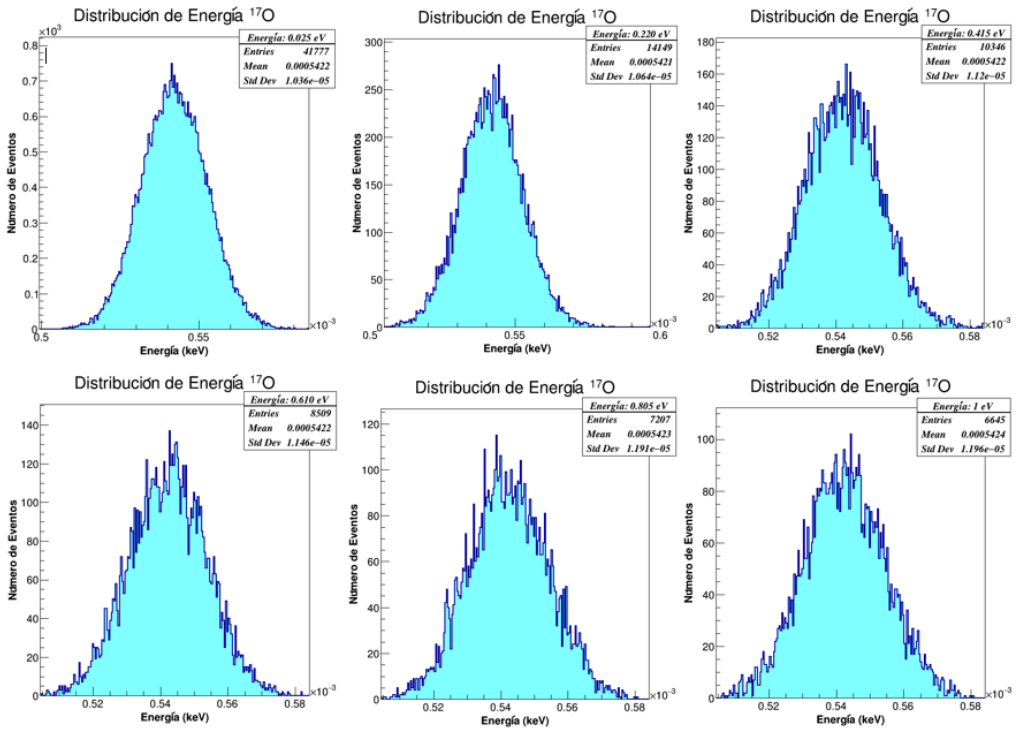


Figura A.1: Distribución de energía de los O^{17}, para neutrones incidentes con energía de: 0.025, 0.220, 0.415, 0.610, 0.805 y 1 eV (siguiendo el orden de derecha a izquierda de arriba hacia abajo). **Fuente:** [Autor].

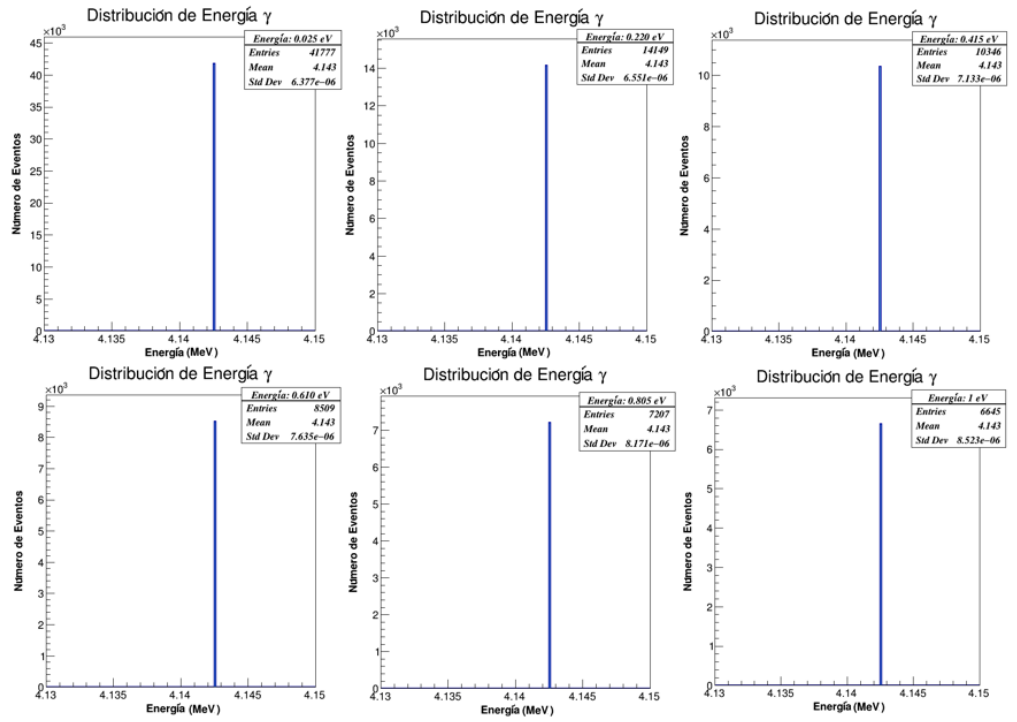


Figura A.2: Distribución de energía de los γ, para neutrones incidentes con energía de: 0.025, 0.220, 0.415, 0.610, 0.805 y 1 eV (siguiendo el orden de derecha a izquierda de arriba hacia abajo). **Fuente:** [Autor].

A.2. Distribución de momento del O^{17} y γ:

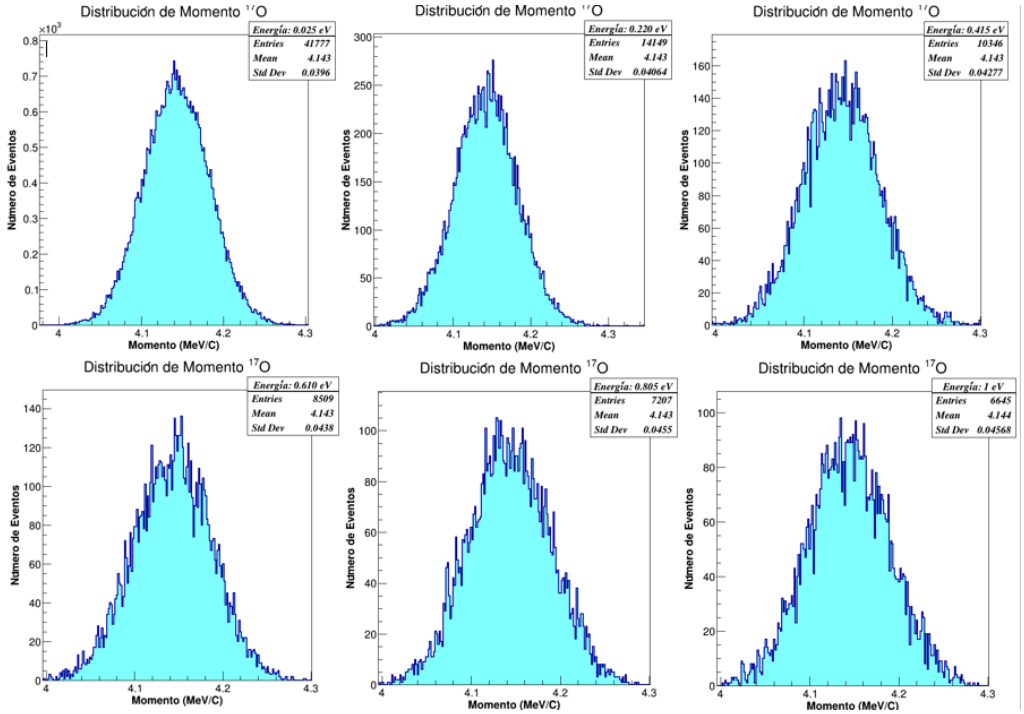


Figura A.3: Distribución de momento de los O^{17}, para neutrones incidentes con energía de: 0.025, 0.220, 0.415, 0.610, 0.805 y 1 eV (siguiendo el orden de derecha a izquierda de arriba hacia abajo). **Fuente:** [Autor].

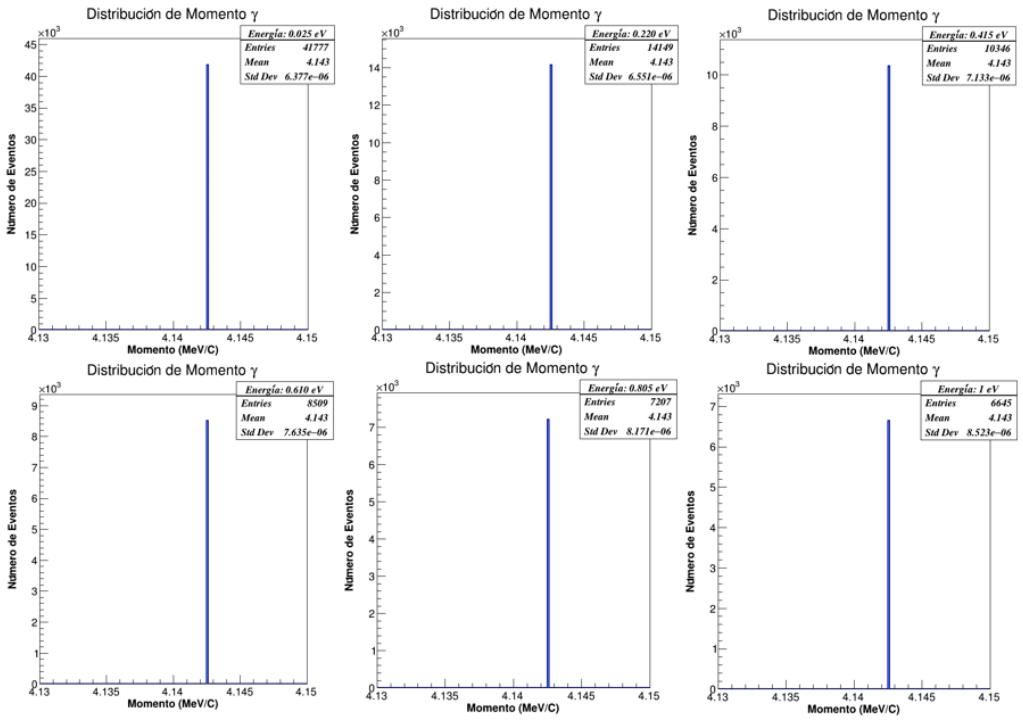


Figura A.4: Distribución de momento de los γ, para neutrones incidentes con energía de: 0.025, 0.220, 0.415, 0.610, 0.805 y 1 eV (siguiendo el orden de derecha a izquierda de arriba hacia abajo). **Fuente:** [Autor].

A.3. Distribuciones angulares (Φ y Θ) del O^{17} y γ:

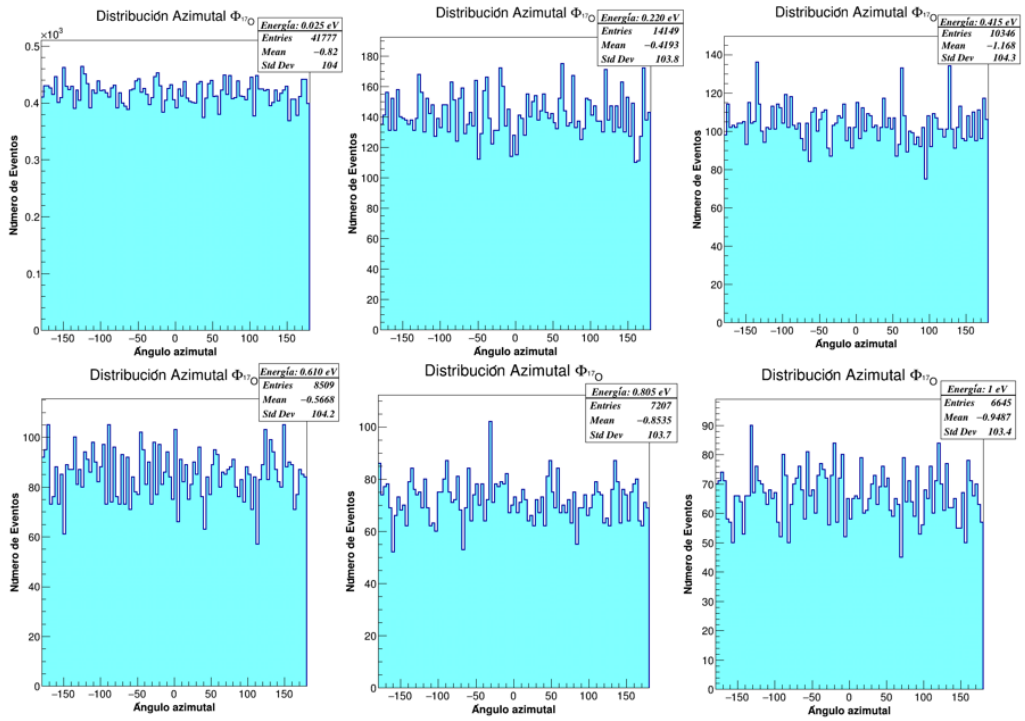


Figura A.5: Distribución azimutal Φ de los O^{17}, para neutrones incidentes con energía de: 0.025, 0.220, 0.415, 0.610, 0.805 y 1 eV (siguiendo el orden de derecha a izquierda de arriba hacia abajo). **Fuente:** [Autor].

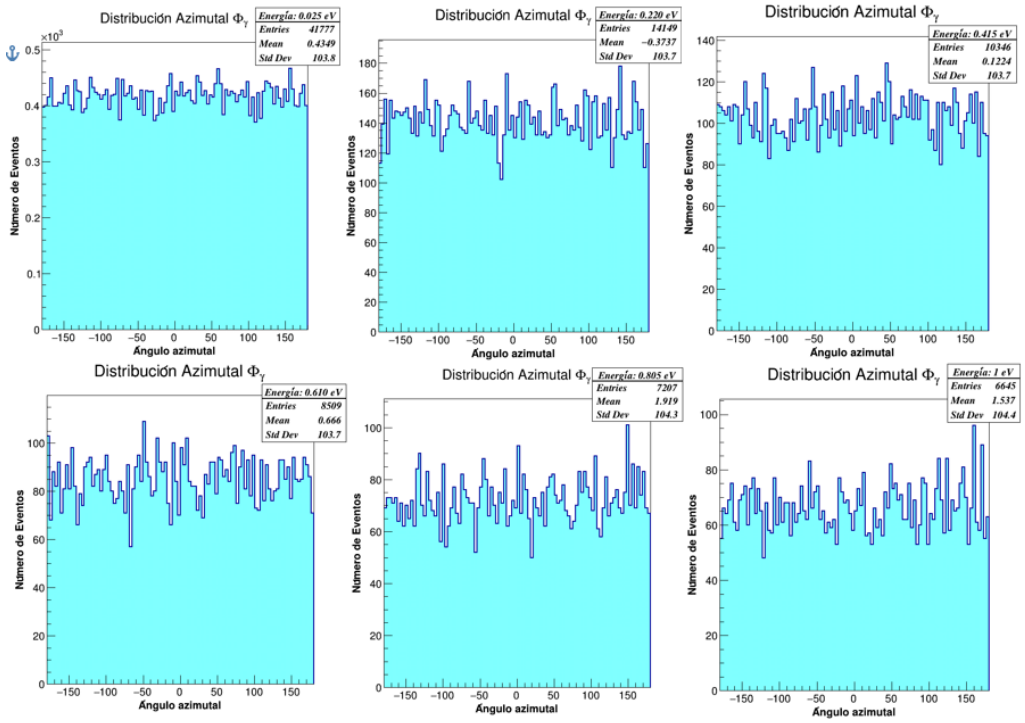


Figura A.6: Distribución azimutal Φ de los γ, para neutrones incidentes con energía de: 0.025, 0.220, 0.415, 0.610, 0.805 y 1 eV (siguiendo el orden de derecha a izquierda de arriba hacia abajo). **Fuente:** [Autor].

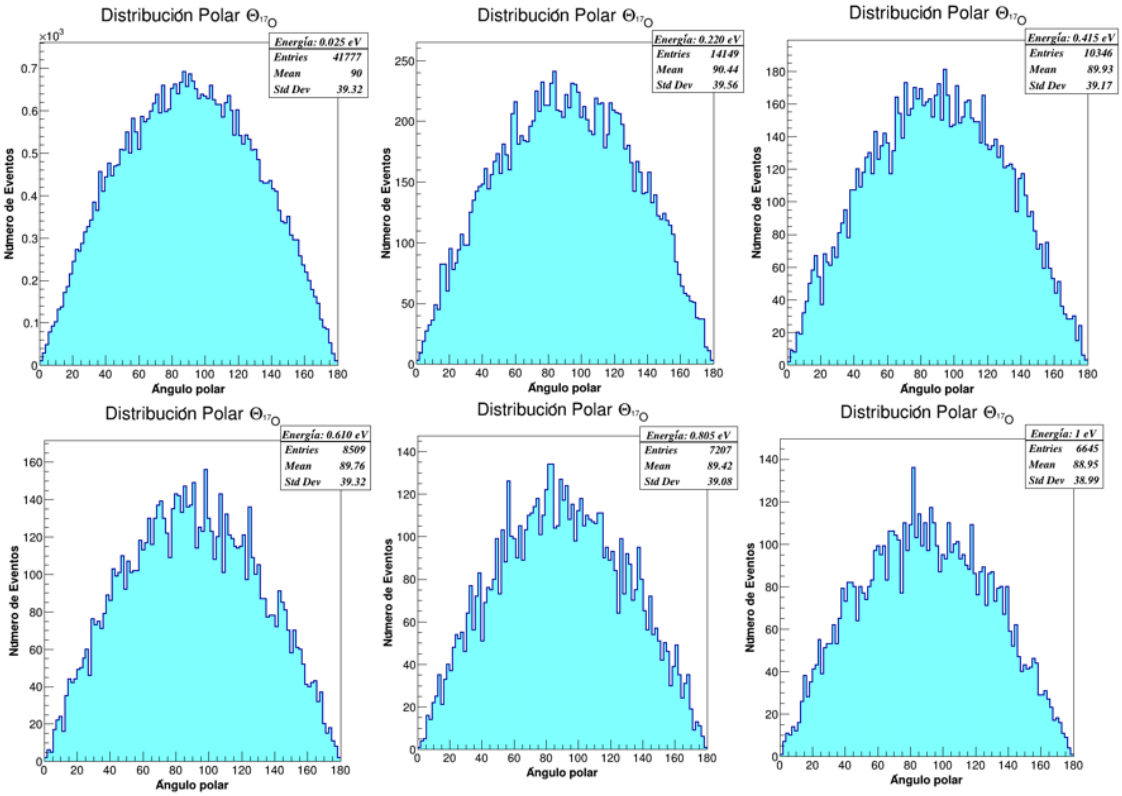


Figura A.7: Distribución polar Θ de los O^{17}, para neutrones incidentes con energía de: 0.025, 0.220, 0.415, 0.610, 0.805 y 1 eV (siguiendo el orden de derecha a izquierda de arriba hacia abajo). **Fuente:** [Autor].

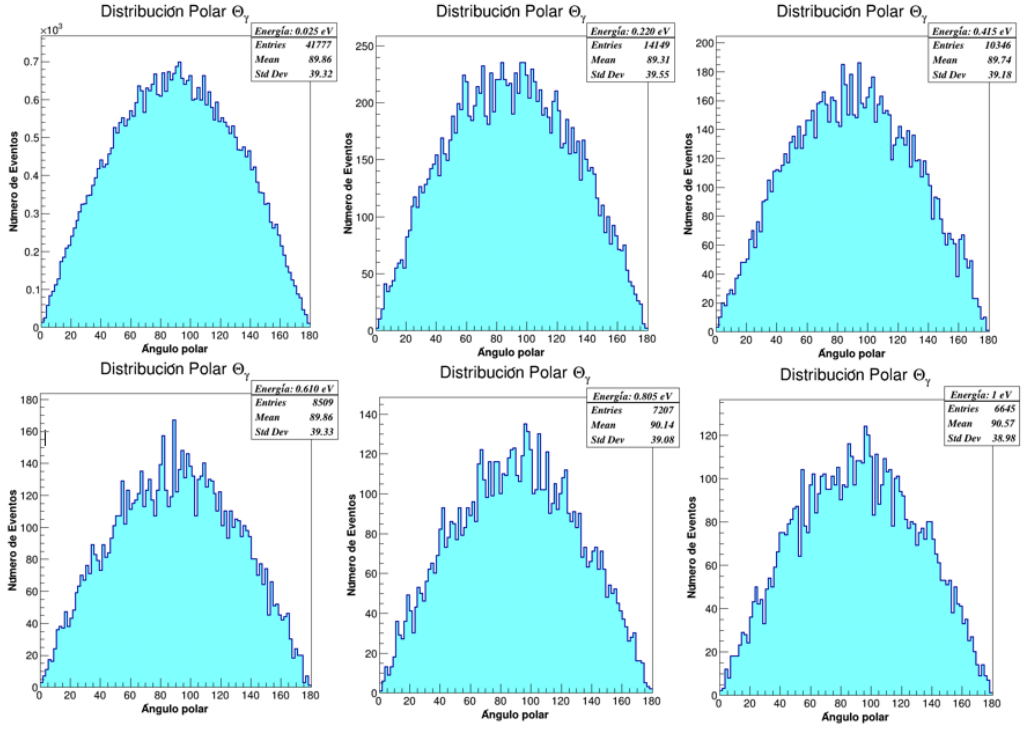


Figura A.8: Distribución polar Θ de los γ, para neutrones incidentes con energía de: 0.025, 0.220, 0.415, 0.610, 0.805 y 1 eV (siguiendo el orden de derecha a izquierda de arriba hacia abajo). **Fuente:** [Autor].

A.4. Distribuciones de posición (vértice) del O^{17} y γ:

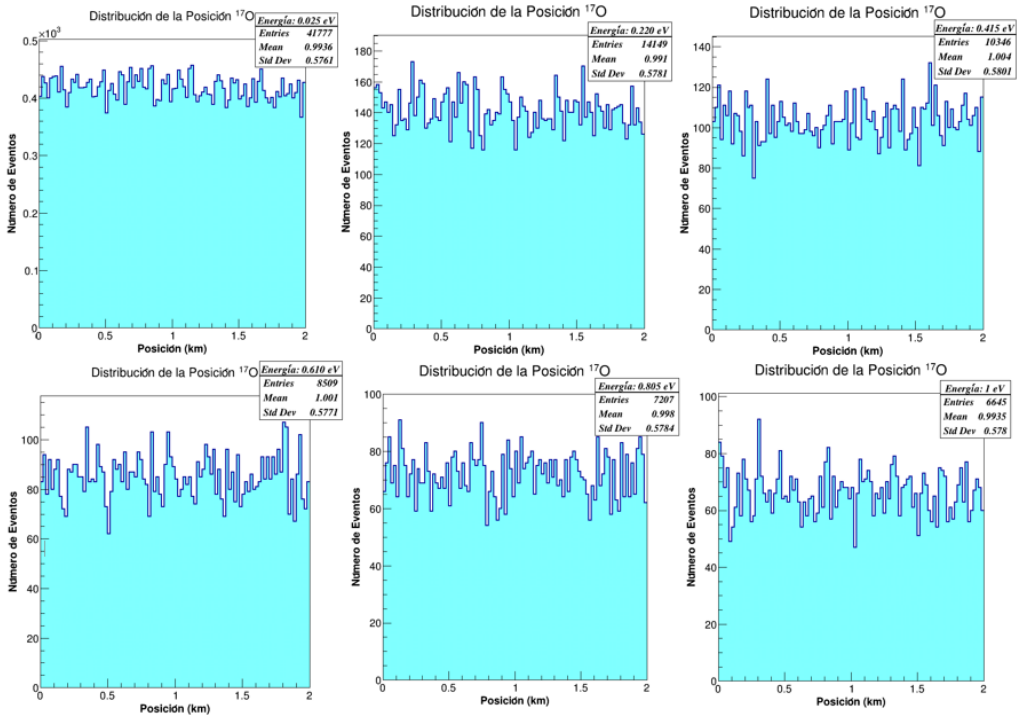


Figura A.9: Distribución de la posición (vértice) de los O^{17}, para neutrones incidentes con energía de: 0.025, 0.220, 0.415, 0.610, 0.805 y 1 eV (siguiendo el orden de derecha a izquierda de arriba hacia abajo). **Fuente:** [Autor].

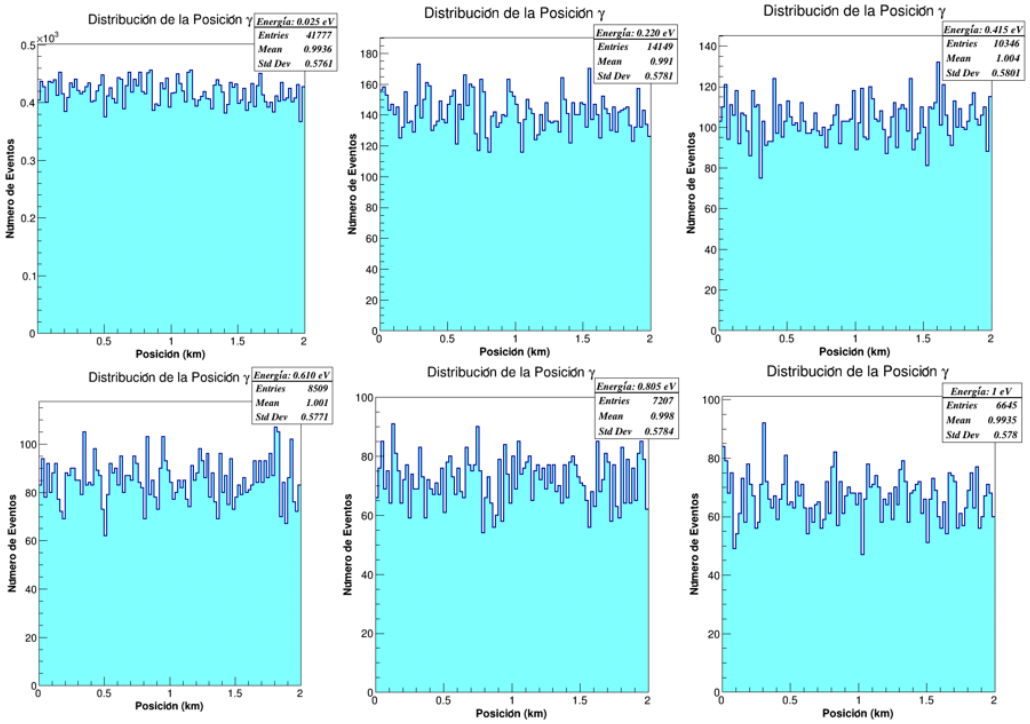


Figura A.10: Distribución de la posición (vértice) de los γ, para neutrones incidentes con energía de: 0.025, 0.220, 0.415, 0.610, 0.805 y 1 eV (siguiendo el orden de derecha a izquierda de arriba hacia abajo). **Fuente:** [Autor].

A.5. Distribuciones de velocidad del O^{17} y γ:

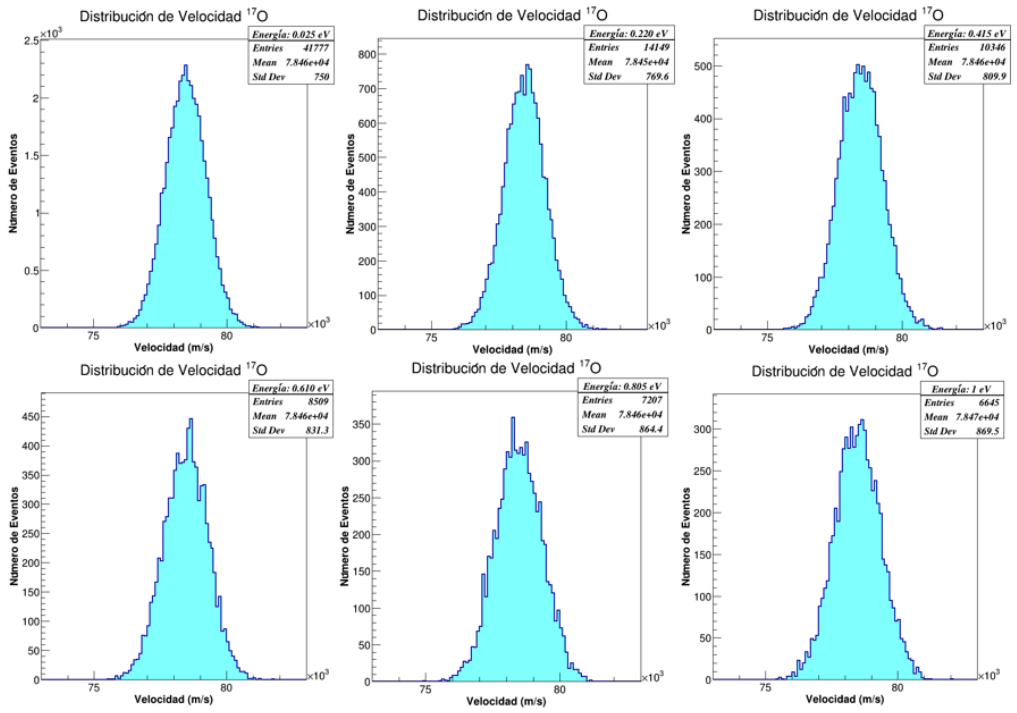


Figura A.11: Distribución de la velocidad de los O^{17}, para neutrones incidentes con energía de: 0.025, 0.220, 0.415, 0.610, 0.805 y 1 eV (siguiendo el orden de derecha a izquierda de arriba hacia abajo). **Fuente:** [Autor].

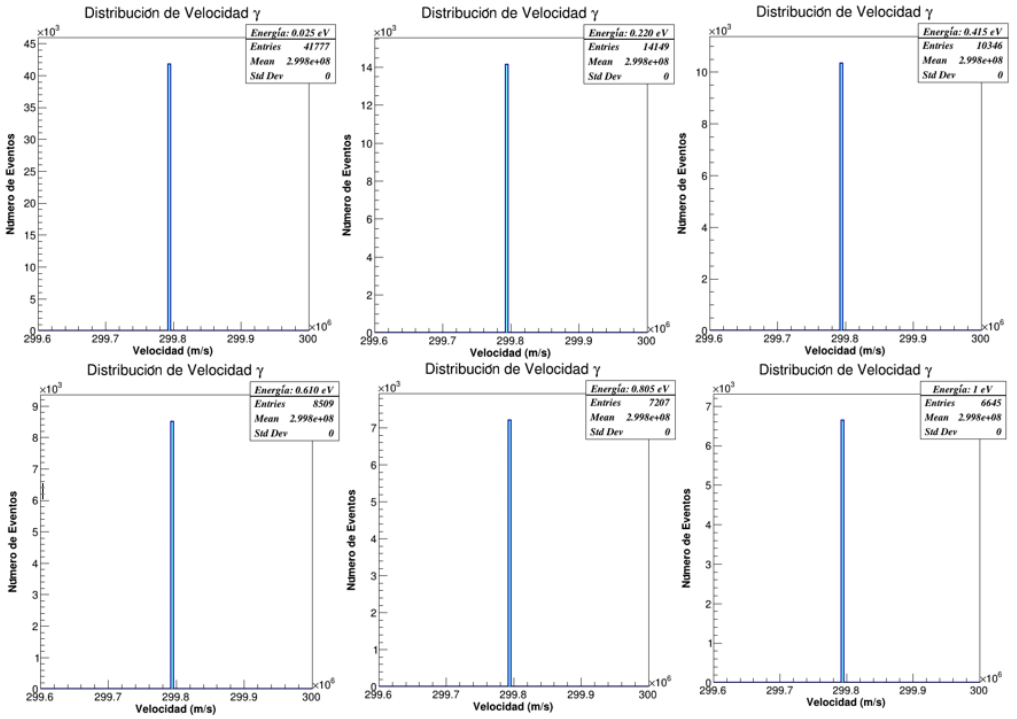


Figura A.12: Distribución de la velocidad de los γ, para neutrones incidentes con energía de: 0.025, 0.220, 0.415, 0.610, 0.805 y 1 eV (siguiendo el orden de derecha a izquierda de arriba hacia abajo). **Fuente:** [Autor].

A.6. Valor Q de la reacción con diferentes energías

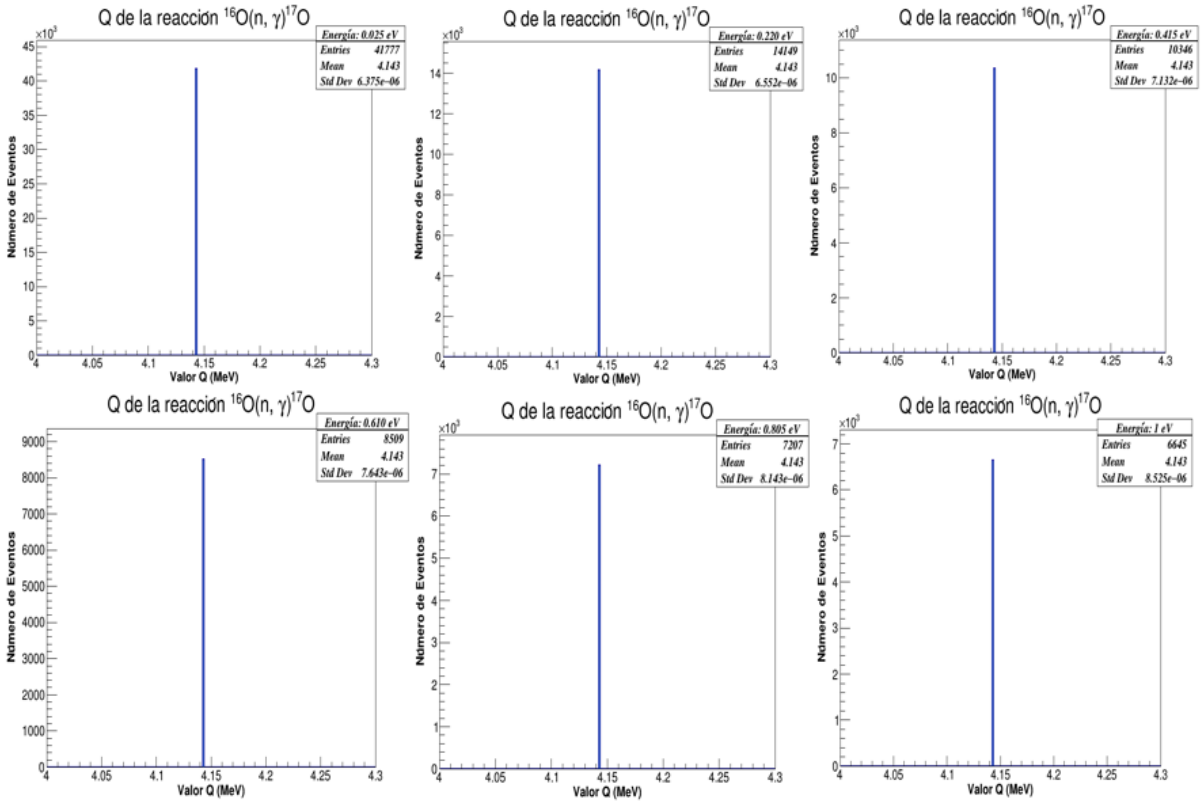


Figura A.13: Valor Q para neutrones incidentes con energía de: 0.025, 0.220, 0.415, 0.610, 0.805 y 1 eV (siguiendo el orden de derecha a izquierda de arriba hacia abajo). **Fuente:** [Autor].

Apéndice B

Cálculo analítico de las cantidades cinemáticas de los O^{17} y γ

Dado que no se encontraron datos experimentales reportados en la literatura sobre las energías cinéticas de las partículas del estado final (O^{17} y γ) obtenidas en la simulación, en este apartado se presentara de manera analítica dos formas distintas de comprobar que estos valores de E_k concuerdan con los obtenidos en la herramienta computacional Geat4.

B.1. Valor Q encontrado con las energías cinéticas

Una forma alternativa de comprobar que el valor de las energías cinéticas halladas es correcto, es encontrando el valor Q de la reacción, para este cálculo se emplea la ecuación (3.16), la cual representa la diferencia entre la energía cinética final y la inicial, donde: $T_X = 0,000542189\ MeV$ es la energía cinética del O^{17}, $T_a = 4,14255\ MeV$ es la energía del γ, $T_Y = 0\ MeV$ es la energía del O^{16} y $T_b = 2,5 \times 10^{-8}\ MeV$ es la energía del neutrón. Sustituyendo los valores de las energías cinéticas en la ecuación (3.16):

$$Q = \ 0,000542189\ MeV + 4,14255\ MeV - 2,5 \times 10^{-8}\ MeV$$

Resolviendo las operaciones, se encuentra que el valor Q de la reacción es:

$$\boxed{Q \ = \ 4,143092\ MeV} \tag{B.1}$$

La incertidumbre porcentual relacionada con el valor teórico y el valor encontrado en

la simulación es:

$$E_p \;=\; 0,01955\,\% \tag{B.2}$$

La incertidumbre porcentual muestra que las energías cinéticas obtenidas de la simulación son las correctas, ya que el valor que encontrado en esta sección muy cerca con el encontrado en la literatura (ver [30]).

B.2. Energías cinéticas de las partículas del estado final

Para deducir las energías cinéticas de las partículas del estado final, el análisis es el típico dos a dos y se hará desde el sistema centro de momento. Por conservación de la energía, se tiene que:

$$E_i \;=\; E_f \tag{B.3}$$

donde E_i es la energía incial y E_f es a energía final, reescribiendo (B.3):

$$E_n \;+\; E_{O^{16}} \;=\; E_{O^{17}} \;+\; E_\gamma \tag{B.4}$$

con: E_n es la energía total del neutrón, $E_{O^{16}}$ es la energía total del O^{16}, $E_{O^{17}}$ es la energía total del O^{16} y E_γ es la energía total del γ. Ahora, la energía total "E" es la suma de la energía en reposo "E_r" más la energía cinética "E_k", por lo que la parte izquierda de (B.4) queda:

$$E_{r_n} \;+\; E_{k_n} \;+\; E_{r_{O^{16}}} \;+\; E_{k_{O^{16}}} \;=\; E_{O^{17}} \;+\; E_\gamma \tag{B.5}$$

como la energía cinética del neutrón es bastante pequeña, se considera despreciable y el núcleo de O^{16} es estacionario por lo que su energía cinética es cero, entonces (B.5) queda:

$$E_{r_n} \;+\; E_{r_{O^{16}}} \;=\; E_{O^{17}} \;+\; E_\gamma \tag{B.6}$$

ahora, por conservación del momento, se sabe que:

$$P_i \;=\; P_f \tag{B.7}$$

donde P_i es el momento incial y P_f es el momento final, por lo que (B.7) queda:

$$P_n \;+\; P_{O^{16}} \;=\; P_{O^{17}} \;+\; P_\gamma \tag{B.8}$$

como ya se mencionó, la energía cinética del neutrón es despreciable y el núcleo estacionario, bajo estas consideraciones, la ecuación (B.8) queda expresada de la siguiente manera:

$$0 \;=\; P_{O^{17}} \;+\; P_\gamma \;\rightarrow\; P_\gamma^2 \;=\; P_{O^{17}}^2 \tag{B.9}$$

despejando el momento del O^{17} de la siguiente ecuación:

$$E_{O^{17}}^2 \;=\; m_{r_{O^{17}}}^2 c^4 \;+\; P_{O^{17}}^2 c^2 \;\rightarrow\; P_{O^{17}}^2 \;=\; \frac{E_{O^{17}}^2}{c^2} \;-\; \frac{E_{r_{O^{17}}}^2}{c^2} \tag{B.10}$$

y se sabe que el momento del γ se escribe:

$$P_\gamma^2 \;=\; \frac{E_\gamma^2}{c^2} \tag{B.11}$$

reemplazando la parte derecha de las ecuaciones (B.10) y (B.11) en la parte derecha de (B.8), se llega a:

$$E_{r_{O^{17}}}^2 \;=\; E_{O^{17}}^2 \;-\; E_\gamma^2 \tag{B.12}$$

despejando de (B.6) $E_{O^{17}}$ y reemplazándola en (B.12), se llega a la siguiente expresión:

$$E_{r_{O^{17}}}^2 \;=\; E_{r_n}^2 \;+\; 2E_{r_n}E_{r_{O^{16}}} \;-\; 2E_{r_n}E_\gamma \;+\; E_{r_{O^{16}}}^2 \;-\; 2E_{r_{O^{16}}}E_\gamma \;+\; E_\gamma^2 \;-\; E_\gamma^2 \tag{B.13}$$

eliminando términos semejantes, factorizando y despejando E_γ de (B.13) se obtiene:

$$E_\gamma \;=\; \frac{E_{r_n}^2 \;+\; 2E_{r_n}E_{r_{O^{16}}} \;+\; E_{r_{O^{16}}}^2 \;-\; E_{r_{O^{17}}}^2}{2\left(E_{r_n} \;+\; E_{r_{O^{16}}}\right)} \tag{B.14}$$

pero la energía en reposo se escribe como: $E_r \;=\; m_r c^2$, por lo que (B.14) queda:

$$E_\gamma \;=\; \frac{m_{r_n}^2 \;+\; 2m_{r_n}m_{r_{O^{16}}} \;+\; m_{r_{O^{16}}}^2 \;-\; m_{r_{O^{17}}}^2}{2\left(m_{r_n} \;+\; m_{r_{O^{16}}}\right)} \cdot c^2 \tag{B.15}$$

el valor de las masas en reposo son: $m_{r_n} \;=\; 939,5656\ MeV/c^2$, $m_{r_{O^{16}}} \;=\; 14899,16\ MeV/c^2$ y $m_{r_{O^{17}}} \;=\; 15834,58\ MeV/c^2$, al reemplazar y operar los valores de las masas en reposo en (B.15) ese llega a que la energía cinética del γ es:

$$\boxed{E_\gamma \;=\; 4{,}145057\ MeV} \tag{B.16}$$

Cabe mencionar que el valor de energía que se encontró para el γ es el valor de energía cinética, ya que como está partícula no tiene masa, no posee energía en reposo, por lo que solo tiene energía cinética.

Ahora, para encontrar la energía cinética del O^{17}, se hará el siguiente reemplazo: $E_{O^{17}} \;=\; E_{r_{O^{17}}} \;+\; E_{k_{O^{17}}}$, en (B.6) y se despeja con lo que se obtiene:

$$E_{k_{O^{17}}} \;=\; E_{r_n} \;+\; E_{k_{O^{16}}} \;-\; E_{k_{O^{17}}} \;-\; E_\gamma \tag{B.17}$$

dejando (B.22) en términos de las masas en reposo:

$$E_{k_{O^{17}}} \;=\; \left(m_{r_n} \;+\; m_{r_{O^{16}}} \;-\; m_{r_{O^{17}}}\right)c^2 \;-\; E_\gamma \tag{B.18}$$

reemplazando el valor de las masas en reposo y el de la energía cinética del γ en (B.23) da que el valor de la energía cinética del O^{17} es:

$$\boxed{E_{O^{17}} \;=\; 0{,}000543\ MeV} \tag{B.19}$$

Ahora, para comparar entre el valor teórico y el valor obtenido de la simulación de la energía cinética del O^{17}, se encontrara el error porcentual, el cual indicara en cuanto difieren los cálculos en ambas situaciones. Se utiliza la ecuación 3.19, donde: V_T es el valor teórico encontrado de $E_{K_{O^{17}}}$ y V_E es el valor obtenido de la simulación. Teniendo en cuenta lo anterior y los valores obtenidos, el error porcentual es:

$$E\,\%_{O17} = 0,14656\,\% \tag{B.20}$$

Conforme al error porcentual encontrado, se puede observar que la diferencia es relativamente pequeña, esto muestra que el valor obtenido de manera analítica resulta ser muy aproximado al valor obtenido de Geant4.

De manera similar se encuentra el error porcentual asociado a la energía cinética de las partículas γ, el cual es:

$$E\,\%_{\gamma} = 0,06055\,\% \tag{B.21}$$

Lo que indica que el valor obtenido en Geant4 está próximo al valor teórico encontrado.

B.3. Momentos de las partículas del estado final

Ahora, para calcular el momento, se utilizaran las ecuaciones B.6 y B.9 y operando se encuentra que el momento de los γ y de los O^{17} es:

$$P_{\gamma} \;=\; P_{O^{17}} \;=\; \frac{m_{r_n}^2 + 2m_{r_n}m_{r_{O^{16}}} + m_{r_{O^{16}}}^2 - m_{r_{O^{17}}}^2}{2\left(m_{r_n} + m_{r_{O^{16}}}\right)} \cdot c \;=\; \boxed{4,1451\ MeV/c} \tag{B.22}$$

Los resultados de la ecuación B.22, concuerdan con los obtenidos de la figura 3.6 y difieren en un porcentaje de 0,061 %.

B.4. Velocidad de las partículas O^{17} y γ

Para calcular la velocidad con la que salen las partículas del estado final de la reacción, en el caso de los O^{17}, se utilizara la definición de momento relativista:

$$\mathbf{P} \;=\; \frac{m_0\mathbf{v}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \tag{B.23}$$

Elevando ambas partes de la ecuación B.23 y despejando la velocidad "v", se obtiene:

$$v \;=\; \sqrt{\frac{P^2}{P^2 + m_0^2c^2}}\; c \tag{B.24}$$

Al reemplazar los valores de $P = 4,1451\ MeV/c$, $m_0 = m_{r_{O^{17}}} = 15834,58\ MeV/c^2$ y $c = 3 \times 10^8\ m/s$ en la ecuación B.25, se encuentra que el valor de a velocidad de los O^{17} es:

$$\boxed{v_{O^{17}} = 78532,55\ m/s} \tag{B.25}$$

Los resultados de la ecuación B.25, concuerdan con los obtenidos de la figura 3.13 y difieren en un porcentaje de 4,7 %. Ahora, para encontrar la velocidad de las partículas γ, se sabe que $E = \gamma mc^2$ y $P = \gamma m\mathbf{v}$, al dividir estas dos expresiones y despejar v:

$$\frac{P}{E} = \frac{v}{c^2} \rightarrow v = \frac{P}{E}\, c^2 \tag{B.26}$$

Al reemplazar el valor de $P\ 4,1451\ MeV/c$ y $E = 4,145057\ MeV$, se obtiene que la velocidad de las partículas γ es la misma que la velocidad de la luz:

$$\boxed{v = c} \tag{B.27}$$

La velocidad γ difiere con la obtenida en la gráfica 3.13 panel derecho, en 0,067 %.

B.5. Ángulos de emisión θ y ϕ para los O^{17} y γ

Los ángulos de emisión de las partículas resultantes del estado final de reacción, se encuentran utilizando la conservación del momento a lo largo del eje Z e Y, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$P_n = P_\gamma \cos\theta + P_{O^{17}} \cos\phi \tag{B.28}$$

$$0 = P_\gamma \sin\theta - P_{O^{17}} \sin\phi \tag{B.29}$$

pero como la energía incidente del neutrón es despreciable, la conservación del momento queda:

$$0 \;=\; P_\gamma \cos\theta \;+\; P_{O^{17}} \cos\phi \tag{B.30}$$

$$0 \;=\; P_\gamma \sin\theta \;-\; P_{O^{17}} \sin\phi \tag{B.31}$$

despejando de B.30 $P_{O^{17}}$:

$$P_{O^{17}} \;=\; -\frac{P_\gamma \cos\theta}{\cos\phi} \tag{B.32}$$

ahora, reemplazando B.32 en B.31, se obtiene:

$$0 \;=\; P_\gamma \sin\theta \;+\; P_\gamma \cos\theta \tan\phi \tag{B.33}$$

factorizando P_γ en B.33:

$$0 \;=\; P_\gamma \left(\sin\theta \;+\; \cos\theta \tan\phi\right) \tag{B.34}$$

la solución trivial de B.34, es tomar P_γ igual cero, por lo que se tomara los paréntesis y se igualaran a cero, además en la parte derecha de la igualdad están los ángulos polares y en la izquierda los ángulos azimutales como sigue:

$$\tan\phi \;=\; -\tan\theta \tag{B.35}$$

de B.35 se encuentra la relación:

$$\phi \;=\; -\theta \tag{B.36}$$

Ahora, reemplazando B.36 en la ecuación B.30 y factorizando términos semejantes, se llega a:

$$0 \;=\; \cos\theta \left(P_\gamma \;+\; P_{O^{17}}\right) \tag{B.37}$$

se toma la solución $\cos\theta \;=\; 0$, ya que al tomarla suma de los momentos e igualarla a cero, solo se estaría indicando que los momentos son iguales en magnitud, por lo que se

obtiene que:

$$\theta \;=\; \cos^{-1} 0 \;\rightarrow\; \boxed{\theta \;=\; 90^{\circ}} \tag{B.38}$$

El resultado obtenido para los ángulos polares concuerda con el obtenido en la simulación, aunque con una variación del 0,077 %. Para encontrar los ángulos polares y azimutales respecto a Z y X, el procedimiento es idéntico y los valores serán los mismos.

Apéndice C

Procesos de perdida de energía y estimación LET

Para calcular la deposición de energía y el LET de las partículas del estado final, estas dos cantidades dependen de la perdida de energía y está a su vez depende del tipo de partícula con la cual se esté trabajando, para este caso son iones pesados "O^{17}" y partículas ligeras "γ".

C.1. Perdida de energía de partículas cargadas pesadas

En general, la perdida de energía de las partículas e iones pesados cuando interactúan con la materia, se da por colisiones inelásticas. La cantidad transferida en cada colisión es generalmente una fracción muy pequeña de la energía cinética total de la partícula. Las colisiones inelásticas son de carácter estadísticos y suceden con cierta probabilidad; está pérdida de energía, también llamada potencia de frenado o $\frac{dE}{dx}$, fue calculada primero por Bohr usando argumentos clásicos y luego por Bethe, Bloch y otros usando la mecánica cuántica [3].

C.1.1. Caso clásico, cálculo de Bohr

La fórmula clásica de Bohr proporciona una descripción de la pérdida de energía para partículas muy pesadas. Sin embargo, para partículas ligeras como el protón, la fórmula se deje de funcionar debido a los efectos cuánticos. Sin embargo, contiene todas las características esenciales de la pérdida por colisión electrónica por partículas cargadas. La expresión deducida por Bohr es:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi z^2 e^4}{m_e v^2} N_e ln\left(\frac{\gamma^2 m v^3}{z e^2 \bar{\nu}}\right) \tag{C.1}$$

donde:

- z: es la carga de partícula incidente en unidades de e.
- e: es la carga del electrón.
- m_e: es la masa del electrón.
- v: es la velocidad de la partícula incidente.
- N_e: es la densidad de electrones en el material.
- $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$ con $\beta = \frac{v}{c}$ de la partícula incidente.
- m: es la masa de la partícula incidente.
- $\bar{\nu}$: es la frecuencia media promediada sobre todos los estados ligados.

C.1.2. Ecuación de Bethe - Bloch

La deducción correcta de la perdida de energía fue realizada por primera vez por Hans Bethe y Felix Bloch. En el cálculo, la transferencia de energía se parametriza en términos de transferencia de momento en lugar del parámetro de impacto. Esto, por supuesto, es más realista dado que la transferencia de impulso es una cantidad medible, mientras que el parámetro de impacto no lo es. La fórmula se conoce comúnmente como la fórmula de Bethe - Bloch y es la expresión básica utilizada para los cálculos de pérdida de energía. En la práctica, se añaden dos correcciones: la corrección del efecto de densidad δ y la corrección de capa C , por lo cual la ecuación de la perdida de energía se escribe:

$$-\frac{dE}{dx} = 2\pi N_a r_e^2 m_e c^2 \rho \frac{Z}{A}\frac{z^2}{\beta^2}\left[ln\left(\frac{2m_e\gamma^2 v^2 W_{max}}{I^2}\right) - 2\beta^2 - \delta - 2\frac{C}{Z}\right] \tag{C.2}$$

sabiendo que:

- N_a: es el número de Avogadro $= 6,022 \times 10^{23} mol^{-1}$.

- r_e: es el radio clásico del electrón. electrón.
- c: es la velocidad de la luz en el vacío.
- ρ: es la densidad del material absorbente.
- Z: es el número atómico del material absorbente.
- A: es el peso atómico del material absorbente.
- W_{max}: es la máxima transferencia de energía en una sola colisión.
- I: es el potencial de excitación medio.
- δ: es la corrección de densidad.
- C: es la corrección de capa.

La corrección de densidad (δ) se origina por la interacción del proyectil con el medio, ya que a su paso polariza los átomos del medio con su campo eléctrico, disminuyendo el campo eléctrico que perciben electrones más lejanos, lo que genera una disminución en las colisiones con dichos electrones. Por otro lado, la corrección por capas (C), tiene en cuenta cuando la velocidad de la partícula incidente es menor o comparable a la de los electrones atómicos del medio, ya que se asume al electrón en reposo respecto al haz incidente. Además de las anteriores cantidades, el potencial de ionización (I) es otro factor de importancia, ya que hace referencia a la frecuencia orbital promedio de los electrones atómicos del medio, por la constante de Planck [20].

Para $\beta \leq$ 0,05, muchas de las suposiciones hechas en la fórmula de Bethe - Bloch ya no son válidas entre ellas las correcciones. Entre $0,01 \leq \beta \leq 0,05$, de hecho, todavía no existe una teoría satisfactoria para los protones. Por debajo de $\beta \simeq 0,01$, la teoría de Lindhard [48] da una explicación exitosa de la pérdida de energía.

En general, para energías por debajo de los 2 MeV, la corrección de capa se vuelve muy grande y la precisión de la fórmula de Bethe - Bloch disminuye, por lo que se requiere la parametrización de los datos para las potencias de frenado a bajas energías. Geant4, con el fin de proporcionar una transición suave entre los modelos de baja energía y alta energía,

introduce una versión modificada de perdida de energía para la ecuación C.2 [49]. Con base en lo anterior y dado que la simulación preliminar en Geant4, indica que el máximo rango de energía promedio del O^{17} es 0,0005422 keV, por lo cual su correspondiente $\beta \simeq 0,00085$, esto indica que el modelo a utilizar en Geant4 es la ecuación de Bethe – Bloch modificada.

C.2. Perdida de energía de fotones

El comportamiento de los fotones en la materia (partículas γ) es bastante diferente al de las partículas cargadas. La falta de carga eléctrica del fotón imposibilita numerosas colisiones inelásticas, por lo cual, los principales procesos de interacción de las partículas gamma con la materia son: efecto fotoeléctrico, efecto Compton y producción de pares.

C.2.1. Efecto fotoeléctrico

El efecto fotoeléctrico es un proceso de colisión inelástico entre un fotón y un electrón ligado, que resulta en la expulsión del electrón después de que el fotón ha sido absorbido por el material.

C.2.2. Efecto Compton

La dispersión de Compton es uno de los procesos mejor comprendidos en las interacciones de fotones. Esta es la dispersión de fotones sobre electrones libres, los cuales se asumen que están inicialmente en reposo. En la materia, por supuesto, los electrones están ligados; sin embargo, si la energía del fotón es alta con respecto a la energía de enlace, esta última energía puede ignorarse y los electrones pueden considerarse esencialmente libres [3].

C.2.3. Producción de pares

En este proceso, un fotón de alta energía pierde toda su energía en una colisión con un núcleo creando un par electrón – positrón. Para crear el par, el fotón debe tener al menos una energía de 1.022 MeV [49]. En la producción de pares la energía que toma el retroceso del núcleo es despreciable debido a que es muy masivo.

En los procesos mencionados anteriormente, se observa en cada uno la presencia de un electrón en el estado final (y en algunas ocasiones un positrón como en el caso de producción de pares). Esto indica que al final, la deposición de energía de los fotones termina dándose en términos de la interacción de los electrones con la materia.

C.3. Perdida de energía de electrones

Al igual que las partículas con carga pesada, los electrones y positrones también sufren una pérdida de energía, ($\frac{dE}{dx}_{por\ colisin}$) cuando atraviesan la materia. Sin embargo, debido a su pequeña masa entra en juego un mecanismo adicional de pérdida de energía: la emisión de radiación electromagnética ($\frac{dE}{dx}_{por\ radiacin}$) que surge de la dispersión con el campo eléctrico de un núcleo conocida como Bremsstrahlung. Por lo anterior, para el caso de electrones, la pérdida total de energía se evalúa como:

$$\left(\frac{dE}{de}\right)_{total} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_{por\ colisión} + \left(\frac{dE}{dx}\right)_{por\ radiación} \tag{C.3}$$

Para detalles adicionales, se puede remitir a [3].

C.4. Estimación de LET

LET no es una cantidad física que se pueda medir fácilmente y, por lo tanto, los valores generalmente se estiman calculando el poder de frenado usando herramientas computacionales, basadas en la ecuación de Bethe corregida [50]. Si bien, hay varios tipos de LET, se definirán dos que son importantes en este trabajo, los cuales son:

1. El LET_t que debe su nombre al paso de las partículas en el medio (track en inglés) y se calcula ponderando de acuerdo a la fluencia (ver subsección 2.1.7).

2. El LET_d se determina de acuerdo a la dosis relativa (relative dose en inglés), ya que se utiliza como factor de ponderación para ser calculada.

C.4.1. Algoritmos para calcular el LET: usando la definición

Dos autores, Wilkens y Oelfke han definido un método basado en el "poder de frenado" para calcular las distribuciones espaciales de LET_t y LET_d [50]. Una fórmula de estimación que ha sido modificada para LET_t se muestra en la siguiente ecuación.

$$LET_t\left(z\right) \;=\; \frac{\int_0^\infty S_{el}\left(E\right)\Phi\left(E,z\right)dE}{\int_0^\infty \Phi\left(E,z\right)dE} \tag{C.4}$$

donde $S_{el}\left(E\right)$ es el poder de frenado electrónico de partículas cargadas primarias con energía cinética E y $\Phi\left(E,z\right)$ es la fluencia de partículas cargadas primarias con energía cinética E en la ubicación z.

Y el LET_d se encuentra con la siguiente expresión:

$$LET_t\left(z\right) \;=\; \frac{\int_0^\infty S_{el}\left(E\right)D\left(E,z\right)dE}{\int_0^\infty D\left(E,z\right)dE} \tag{C.5}$$

donde $S_{el}\left(E\right)$ es el poder de frenado electrónico de partículas cargadas primarias con energía cinética E y $D\left(E,z\right)$ es la dosis absorbida aportada por las partículas cargadas primarias con energía cinética E en la ubicación z. La dosis se puede estimar usando el poder de frenado electrónico y la fluencia, basándose en la suposición de la pérdida de energía de aproximación por desaceleración continua (CSDA por sus siglas en inglés) y despreciando el poder de frenado nuclear y el escape de los rayos δ [51], por lo que la dosis se puede reescribir como:

$$D\left(E,z\right) \;=\; \frac{S_{el}\left(E\right)\Phi\left(E,z\right)}{\rho\left(z\right)} \tag{C.6}$$

donde $\rho\left(z\right)$ es la densidad de masa del medio donde se deposita energía. Reemplazando la ecuación C.6 en C.5, se obtiene:

$$LET_t\left(z\right) \;=\; \frac{\int_0^\infty S_{el}^2\left(E\right)\Phi\left(E,z\right)dE}{\int_0^\infty S_{el}\left(E\right)\Phi\left(E,z\right)dE} \tag{C.7}$$

C.4.2. Algoritmos para calcular el LET: forma Analítica

Para calcular el LET_t y el LET_d en este trabajo, se utilizó el método Monte Carlo en

la herramienta computacional Geant4, ya que al utilizar solo la definición, se encuentran limitaciones para resolver problemas prácticos en volúmenes finitos. El uso del LET en un punto dentro del objetivo puede no vincular con precisión el efecto biológico en el blanco, especialmente cerca del final del rango de penetración del haz, donde LET varía considerablemente.

En el algoritmo de Geant4, la energía de enlace de los electrones se trata como una deposición de energía "local" (en un punto espacial); por lo tanto, con base en la conservación de la energía y la definición de LET, la energía transferida durante un paso de seguimiento por el haz se simplifica para que sea igual a la energía total depositada (a lo largo del paso y en el punto de inicio de un paso) por el haz.

Tanto la deposición de energía total ε_i, durante un paso de seguimiento discreto, como la longitud real del paso, l (teniendo en cuenta cualquier diferencia entre la trayectoria de las partículas y la longitud de una línea recta), se pueden obtener usando Geant4 construido con funciones en el proceso de seguimiento de partículas. Por lo tanto, en este trabajo, se definio el cociente $\frac{\varepsilon}{l}$ como "deposición de energía entre paso" en un volumen objetivo [51]. Si la contribución de la longitud del paso se utiliza como factor de ponderación para cada paso dentro de la geometría del blanco, el LET_t se puede expresar como:

$$LET_t \;=\; \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\varepsilon_i}{l_i}\right) \omega_{i,t} \tag{C.8}$$

donde ε_i es la deposición de energía por la i-ésima, l_i es la longitud del paso de la partícula, n es el número total de partículas y $\omega_{i,t}$ es el factor de ponderación de longitud del paso de seguimiento para el i-ésimo evento, expresado en la siguiente ecuación:

$$\omega_{i,t} \;=\; \frac{l_i}{\sum_{i=1}^{n} l_i} \tag{C.9}$$

Sustituyendo la ecuación C.9 en C.8, se obtiene la expresión para encontrar el LET_t utilizada en este trabajo:

$$LET_t = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\varepsilon_i}{l_i}\right) \omega_{i,t} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\varepsilon_i}{l_i}\right) l_i}{\sum_{i=1}^{n} l_i} \rightarrow \boxed{LET_t = \frac{\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i}{\sum_{i=1}^{n} l_i}} \tag{C.10}$$

La ecuación C.10 muestra que LET_t es la relación de las deposiciones de energía totales y las longitudes de paso totales de todas las partículas primarias especificadas. La longitud del paso de seguimiento de la partícula l_i se muestrea aleatoriamente y está influenciada por factores, como la sección eficaz, el límite geométrico y el límite de tamaño de paso definido por el usuario. Tanto ε_i y l_i no son variables independientes. En el algoritmo de seguimiento de Geant4, l_i se determina primero mediante un muestreo aleatorio y ε_i se determina con base en la longitud de l_i y el algoritmo de muestreo aleatorio de deposición de energía [27] y [51].

Ahora, para calcular el LET_d se utiliza la contribución de dosis relativa como factor de ponderación para cada evento (ε_i/l_i)

$$LET_d = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\varepsilon_i}{l_i}\right) \omega_{i,d} \tag{C.11}$$

donde $\omega_{i,d}$ es el factor de ponderación de la dosis para el i-ésimo evento y se puede expresar como:

$$\omega_{i,d} = \frac{D_i}{\sum_{i=1}^{n} l_i} = \frac{\varepsilon_i/m}{\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i/m} = \frac{\varepsilon_i}{\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i} \tag{C.12}$$

donde D_i es la dosis depositada por la i-ésima partícula y m la masa de la misma. Reemplazando la C.12 en la ecuación C.11 se obtiene la expresión utilizada para encontrar el LET_d en este trabajo:

$$LET_d = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\varepsilon_i}{l_i}\right) \omega_{i,d} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\varepsilon_i}{l_i}\right) \varepsilon_i}{\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i} \rightarrow \boxed{LET_d = \frac{\sum_{i=1}^{n} \frac{\varepsilon_i^2}{l_i}}{\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i}} \tag{C.13}$$

Haciendo uso de las ecuaciones C.10 y C.13, se puede calcular el LET_t como el LET_d

en cualquier volumen blanco después de localizar todas las partículas del haz en una simulación en Monte Carlo [51] como la que se construyo en este trabajo.

Apéndice D

Aspectos básicos de Geant4

El avance de la ciencia, depende en gran medida a la obtención de grandes cantidades de datos y a su posterior análisis, en tiempos bastantes cortos y de manera efectiva. Esto ha motivado a los científicos e ingenieros a desarrollar herramientas computacionales que ayuden a obtener, simular, analizar y a procesar estas grandes cantidades de datos a bajos precios; entre ellas se encuentra Geant4, el cual emplea un amplio espectro energético, basándose en diversos modelos físicos, provenientes de la experiencia de muchos colaboradores en el campo de la simulación por Monte Carlo, detectores de partículas y de procesos físicos.

D.1. Geant4

Geant4 es el acrónimo de Geometry and Tracking (Geometría y Seguimiento) [52], es un conjunto de herramientas para simular la interacción de partículas en la materia. Incluye una gama completa de funciones que incluyen el seguimiento de partículas, la geometría del detector y modelos físicos. Los procesos físicos con los que se cuentan cubren una amplia gama, entre ellos: los procesos electromagnéticos, hadrónicos y ópticos, un gran conjunto de partículas, materiales y elementos de larga vida, en un rango de energía que comienza, en algunos casos, desde 250 eV y se extiende hasta el rango de energía de los TeV. Ha sido diseñado y construido para exponer los modelos físicos utilizados, manejar geometrías complejas y permitir su fácil adaptación para un uso óptimo en diferentes conjuntos de aplicaciones.

El conjunto de herramientas es el resultado de una colaboración mundial de físicos e ingenieros de software. Ha sido creado aprovechando la ingeniería de software y la tecnología orientada a objetos, implementado el lenguaje de programación C ++. Se ha utilizado en aplicaciones en física de partículas, física nuclear, diseño de aceleradores, ingeniería espacial y física médica [43]

D.2. Aplicaciones de Geant4

En sus inicios Geant4 era un código que se utilizaba como soporte a los experimentos en física de altas energías, pero también ha sido utilizado en la construcción de réplicas de fenómenos y experimentos de astrofísica de altas energías. El rango de valides de Geant4 ha sigo extendido a energías más bajas, gracias a la implementación de los modelos físicos requeridos para tal fin, gracias a esto existen grupos de investigación en el mundo que utilizan Geant4 para otros tipos de aplicaciones. Por ejemplo, en aplicaciones aeroespaciales en los que Geant4 es un fundamental. Asimismo se puede encontrar programas basados en Geant4 que han sido desarrollados específicamente para aplicaciones médicas, algunos ejemplos son: GAMOS (*Geant4-based Architecture for Medicine-Oriented Simulations*) [53] y GATE (*Geant4 Application for Tomographic Emission*) [54].

Otra aplicación de Geant4 en medicina se encuentra en la *hadronterapia*. Por otra parte, hay grupos que utilizan Geant4 para simular la respuesta de detectores, tanto de centello como de estado sólido. Finalmente se debe resaltar que Geant4 a implementado modelos de muy bajas energías, buscando la aplicación de Geant4 en campos como la radiobiología o la microdosimetría, esto se logra en colaboración con Geant4-DNA.

D.3. Aspectos que componen una simulación en Geant4

Geant4 es un paquete de software gratuito compuesto por herramientas que se pueden utilizar para simular con precisión el paso de partículas a través de la materia. Todos los aspectos importantes que se deben tener en cuenta en el proceso de una simulación en Geant4 son:

1. Geometría del sistema.
2. Materiales involucrados.
3. Partículas de interés.
4. Generación de eventos.
5. Seguimiento de las partículas a través de la materia y de los campos.
6. Procesos físicos que rigen las interacciones de las partículas.
7. Respuesta de los detectores.
8. Generación de datos de los eventos.
9. Almacenamiento de eventos y de trayectorias.
10. Visualización de detectores y de las trayectorias de las partículas.
11. Captura y análisis de datos de la simulación.

Los usuarios pueden construir aplicaciones independientes o aplicaciones basadas en otro lenguaje orientado a objetos. En cualquier caso, la caja de herramientas los apoyará desde la definición inicial del problema hasta la producción de resultados y de gráficos. En el corazón de Geant4 hay un abundante conjunto de modelos físicos para manejar las interacciones de las partículas con la materia en un rango de energía muy amplio. Los datos y la experiencia se han extraído de muchas fuentes en todo el mundo y, en este sentido, Geant4 actúa como un repositorio que incorpora una gran parte de todo lo que se conoce sobre las interacciones de partículas. [55].

Para construir una simulación en Geant4, se requiere de las clases que provee el conjunto de herramientas y como mínimo tres aspectos importantes para construir la simulación: La construcción de un detector (definida en el archivo *DetectorConstruction*), un generador primario (fuente primaria, establecida en el *PrimaryGeneratorAction*) y definir la física necesaria para la ejecución (descrita en el archivo *Physicslists)*) [43].

1. **Construcción de la geometría del detector:** En la creación del detector, se deben tener en cuenta las dimensiones e igualmente el material del cual va a estar

hecho. Para esta construcción existen específicamente un volumen que sostiene toda la simulación conocido como *Mundo*, este volumen está constituido por vacío para que de esta manera no haya interferencia entre la fuente (radiación) y la materia conocido como *volumen blanco*, el cual está compuesto del material que se desea estudiar cuando interactúan. Para llevar a cabo la creación de estos volúmenes es necesario definir tres [43]:

- Volumen Sólido: Acá se define el tipo de geometría (forma) y las dimensiones que tendrá el blanco (maniquí).
- Volumen Lógico: Se define mediante la clase *G4LogicalVolume* y permite asignar el material a la geometría creada en el volumen sólido.
- Volumen Físico: Con este volumen se define los parámetros de posición espacial para el volumen lógico referente a otras geometrías. Esto solo es posible con la definición de las clases *G4VPhysicalVolume* y *G4PVPlacement*.

2. **Evento Primario:** Mediante la definición de la clase *G4UserPrimaryGeneratorAction* es posible: definir el tipo de partícula que será utilizada como proyectil, la energía con la que es emitida, la posición de la fuente y la distribución espacial (puede ser una fuente tipo lineal, cilíndrica, esférica, etc) como energética de la misma (se pueden definir fuentes gaussianas, uniformes, isotrópicas, etc)).

3. **Lista de Física:** En esta parte se definen los procesos de interacción de las partículas generadas en cada evento que incidirán con el blanco. En este caso Geant4 proporciona siete categorías de procesos [43], de las cuales tenemos: La física Electromagnética, hadronica, de decaimientos, ópticos y transporte.

Bibliografía

[1] E. Segrè, «Nuclei e particelle: introduzione alla fisica nucleare e subnucleare.» Zanichelli, 1964. dirección: https://books.google.it/books?id=zobQOAAACAAJ.

[2] G. Espinosa-Paredes y R. Rodríguez, «Física de reactores nucleares I: Un enfoque conceptual.» OmniaScience, 2016, ISBN: 9788494341847. dirección: https://books.google.com.co/books?id=eS4mDAAAQBAJ.

[3] W. Leo, «Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments: A How-to Approach.» Springer, 1994, ISBN: 9780387572802. dirección: https://books.google.com.co/books?id=W7vHQgAACAAJ.

[4] D. Cacuci, «Handbook of Nuclear Engineering: Vol. 1: Nuclear Engineering Fundamentals; Vol. 2: Reactor Design; Vol. 3: Reactor Analysis; Vol. 4: Reactors of Generations III and IV; Vol. 5: Fuel Cycles, Decommissioning, Waste Disposal and Safeguards,» ép. Handbook of Nuclear Engineering v. 1. Springer, 2010, ISBN: 9780387981307. dirección: https://books.google.com.co/books?id=pu9BWuf2gdkC.

[5] N. Carron, «An Introduction to the Passage of Energetic Particles through Matter.» CRC Press, 2006, ISBN: 9781420012378. dirección: https://books.google.com.co/books?id=LRAHeoBP%5C_l8C.

[6] S. Glasstone y A. Sesonske, «Nuclear Reactor Engineering: Reactor Systems Engineering.» Springer US, 2012, ISBN: 9781461520832. dirección: https://books.google.com.co/books?id=lEbVBwAAQBAJ.

[7] E. Alpen, «Radiation Biophysics.» Elsevier Science, 1997, ISBN: 9780080540207. dirección: https://books.google.mw/books?id=eaewy0-C9-cC.

[8] J. Turner, «Atoms, Radiation, and Radiation Protection,» ép. No Longer used. Wiley, 2008, ISBN: 9783527616985. dirección: https://books.google.com.co/books?id=-NjMPZEt2yUC.

[9] E. Podgorsak, «Radiation Physics for Medical Physicists,» ép. Graduate Texts in Physics. Springer International Publishing, 2016, ISBN: 9783319253800. dirección: https://books.google.com.co/books?id=bGFUawEACAAJ.

[10] I. Meric, G. Johansen, M. Holstad, J. Wang y R. Gardner, «Produced water characterization by prompt gamma-ray neutron activation analysis,» *Measurement Science and Technology*, vol. 22, pág. 125 701, 2011. DOI: 10.1088/0957-0233/22/12/125701.

[11] I. Kaplan, «Nuclear Physics,» ép. Addison-Wesley series in nuclear science and engineering. Addison-Wesley, 1963. dirección: https://books.google.com.co/books?id=iftQAAAAMAAJ.

[12] G. Knoll, «Radiation Detection and Measurement,» ép. Radiation Detection and Measurement v. 415. Wiley, 1979, ISBN: 9780471495451. dirección: https://books.google.com.cu/books?id=SyBRAAAAMAAJ.

[13] O. K. Harling y K. J. Riley, «Fission reactor neutron sources for neutron capture therapy–a critical review,» *Journal of neuro-oncology*, vol. 62, n.º 1-2, págs. 7-17, 2003, ISSN: 0167-594X. DOI: 10.1007/bf02699930. dirección: https://doi.org/10.1023/A:1023220404800.

[14] E. Bavarnegin, Y. Kasesaz y F. Wagner, «Neutron beams implemented at nuclear research reactors for BNCT,» *Journal of Instrumentation*, vol. 12, n.º 05, P05005-P05005, 2017. DOI: 10.1088/1748-0221/12/05/p05005. dirección: https://doi.org/10.1088/1748-0221/12/05/p05005.

[15] K.-N. Leung, «New Compact Neutron Generator System for Multiple Applications,» *Nuclear Technology*, vol. 206, n.º 10, págs. 1607-1614, 2020. DOI: 10.1080/00295450.2020.1719800. eprint: https://doi.org/10.1080/00295450.2020.1719800. dirección: https://doi.org/10.1080/00295450.2020.1719800.

[16] N. Hosmane y W. Scientific, «Boron and Gadolinium Neutron Capture Therapy for Cancer Treatment,» ép. EBSCO ebook academic collection. World Scientific Publishing Company, 2012, ISBN: 9789814338684. dirección: https://books.google.com.co/books?id=xkG6CgAAQBAJ.

[17] C. Salt, A. Lennox, M. Takagaki, J. A. Maguire y N. Hosmane, «Boron and gadolinium neutron capture therapy,» *Russian Chemical Bulletin*, vol. 53, n.º 9, págs. 1871-1888, 2004. DOI: 10.1007/s11172-005-0045-6. dirección: https://doi.org/10.1007/s11172-005-0045-6.

[18] D. A. R. C., «Aproximación computacional a través de Geant4 de la reacción nuclear de la captura neutrónica por hidrógeno presente en las células biológicas,» Monografía, Universidad Distrital Francisco José de Caldas, 2020.

[19] B. S., «Radiation injury,» *Indian journal of plastic surgery*, vol. 43, págs. 591-593, 2010.

[20] A. M. Q. Fagua, «Aspectos Físicos de la Hadronterapia,» Tesis de mtría., Universidad Nacional de Colombia, 2014.

[21] S. Seltzer, «Fundamental quantities and units for ionizing radiation (revised),» *Journal of the International Commission on Radiation Units and Measurements*, vol. 11, n.º 1, 2011. DOI: 10.1093/jicru/ndr012. dirección: https://doi.org/10.1093/jicru/ndr012.

[22] W. Scharf y W. Wieszczycka, «Proton Radiotherapy Accelerators.» World Scientific Publishing Company, 2001, ISBN: 9789814491662. dirección: https://books.google.com.co/books?id=SRLVCgAAQBAJ.

[23] D. Jones, «Present status and future trends of heavy particle radiotherapy.» Institut of Physics Publishing, 1999, ISBN: 0-7503-0663-7. dirección: http://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:31052290.

[24] R. S. M. M., «Aproximación computacional a través de Geant4 de la interacción de 7Li procedentes de la captura de neutrones en células biológicas,» Monografía, Universidad Distrital Francisco José de Caldas, 2018.

[25] R. M. Ribeiro y D. Souza-Santos, «Comparison of the neutron ambient dose equivalent and ambient absorbed dose calculations with different GEANT4 physics lists,» *Radiation Physics and Chemistry*, vol. 139, págs. 179-183, 2017, ISSN: 0969-806X. DOI: https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2017.05.021. dirección: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0969806X16306600.

[26] J. Taylor, «An Introduction to Error Analysis: The Study of Uncertainties in Physical Measurements,» ép. ASMSU/Spartans.4.Spartans Textbook. University Science Books,

1997, ISBN: 9780935702422. dirección: https://books.google.com.co/books?id=ypNnQgAACAAJ.

[27] «Geant4 a simulation toolkit: User´s Guide For Application Developers,» 10.6, CERN Accelerating science, 2020.

[28] V. F. Sears, «Neutron scattering lengths and cross sections,» *Neutron News*, vol. 3, n.º 3, págs. 26-37, 1992. DOI: 10.1080/10448639208218770. eprint: https://doi.org/10.1080/10448639208218770. dirección: https://doi.org/10.1080/10448639208218770.

[29] A. Marquez, «Física-Matemátematicas básica.» Universidad Distrital Francisco José de Caldas, 2016, ISBN: 9789588972626. dirección: https://books.google.com.co/books?id=ksAiywEACAAJ.

[30] P. Mohr, C. Heinz, M. Pignatari, I. Dillmann, A. Mengoni y F. Käppeler, «Re-evaluation of the ^{16}O$(n,\gamma)^{17}$O cross section at astrophysical energies and its role as neutron poison in the *s* process,» *The Astrophysical Journal*, vol. 827, pág. 29, 2016. DOI: 10.3847/0004-637X/827/1/29.

[31] K. S, «Introductory Nuclear Physics.» Wiley India, 2008, ISBN: 9788126517855. dirección: https://books.google.com.co/books?id=mkZjC1TLXh8C.

[32] J. R. de Laeter, J. K. Böhlke, P. D. Bièvre, H. Hidaka, H. S. Peiser, K. J. R. Rosman y P. D. P. Taylor, «Atomic weights of the elements. Review 2000 (IUPAC Technical Report),» *Pure and Applied Chemistry*, vol. 75, n.º 6, págs. 683-800, 2003. DOI: doi:10.1351/pac200375060683. dirección: https://doi.org/10.1351/pac200375060683.

[33] S. Bhattacharya, «Radiation injury,» *Indian journal of plastic surgery : official publication of the Association of Plastic Surgeons of India*, vol. 43, S91-S93, 2010. dirección: https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/21321665.

[34] «Geant4 a simulation toolkit: User´s Guide For Physics Lists,» 10.6, CERN Accelerating science, 2020.

[35] M. Durante y H. Paganetti, «Nuclear physics in particle therapy: A review,» *Reports on Progress in Physics*, vol. 79, pág. 096 702, 2016. DOI: 10.1088/0034-4885/79/9/096702.

[36] O. Mohamad, B. Sishc, J. Saha, A. Pompos, A. Rahimi, M. Story, A. Davis y D. Kim, «Carbon Ion Radiotherapy: A Review of Clinical Experiences and Preclinical Research,

with an Emphasis on DNA Damage/Repair,» *Cancers*, vol. 9, pág. 66, 2017. DOI: 10.3390/cancers9060066.

[37] E. Fokas, G. Kraft, H. An y R. Engenhart-Cabillic, «Ion beam radiobiology and cancer: Time to update ourselves,» *Biochimica et biophysica acta*, vol. 1796, págs. 216-29, 2009. DOI: 10.1016/j.bbcan.2009.07.005.

[38] A. Kaiser, J. Eley, N. Onyeuku, S. Rice, C. Wright, N. McGovern, M. Sank, M. Zhu, Z. Vujaskovic, C. Simone y A. Hussain, «Proton Therapy Delivery and Its Clinical Application in Select Solid Tumor Malignancies,» *Journal of Visualized Experiments*, 2019. DOI: 10.3791/58372.

[39] P. Johnstone y K. Yamoah, «Proton beam therapy: Clinical utility and current status in prostate cancer,» *OncoTargets and Therapy*, vol. Volume 9, págs. 5721-5727, 2016. DOI: 10.2147/OTT.S100518.

[40] W. Levin, H. Kooy, J. Loeffler y T. Delaney, «Proton beam therapy,» *British journal of cancer*, vol. 93, págs. 849-54, 2005. DOI: 10.1038/sj.bjc.6602754.

[41] J. Saha, P. Wilson, P. Thieberger, D. Lowenstein, M. Wang y F. Cucinotta, «Biological Characterization of Low-Energy Ions with High-Energy Deposition on Human Cells,» *Radiation research*, vol. 182, 2014. DOI: 10.1667/RR13747.1.

[42] J. Cox, K. Ang y S. Frank, «Radiation Oncology E-Book: Rationale, Technique, Results.» Elsevier Health Sciences, 2009, ISBN: 9780323076609. dirección: https://books.google.com.co/books?id=dnaAVo-3VoAC.

[43] S. Agostinelli, J. Allison, K. Amako y col., «Geant4—a simulation toolkit,» *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 506, n.º 3, págs. 250-303, 2003, ISSN: 0168-9002. DOI: https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8. dirección: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900203013688.

[44] T. Xiufang, K. Liu, Y. Hou, J. Cheng y J. Zhang, «The evolution of proton beam therapy: Current and future status (Review),» *Molecular and Clinical Oncology*, nov. de 2017. DOI: 10.3892/mco.2017.1499.

[45] P. Azimi y A. Movafeghi, «Proton Therapy in Neurosurgery: A Historical Review and Future Perspective Based on Currently Available New Generation Systems,» *International Clinical Neuroscience Journal*, vol. 3, págs. 59-80, 2016. DOI: 10.22037/icnj.v3i2.13324.

[46] J. K. Kim, J. E. Leeman, N. Riaz, S. McBride, C. J. Tsai y N. Y. Lee, «Proton Therapy for Head and Neck Cancer,» *Current treatment options in oncology*, vol. 19, n.º 6, pág. 28, 2018, ISSN: 1527-2729. DOI: 10.1007/s11864-018-0546-9. dirección: https://doi.org/10.1007/s11864-018-0546-9.

[47] R. Delorme, T. Masilela, C. Etoh, F. Smekens e Y. Prezado, «First theoretical determination of relative biological effectiveness of very high energy electrons,» *Scientific Reports*, vol. 11, mayo de 2021. DOI: 10.1038/s41598-021-90805-3.

[48] J. Lindhard y M. Scharff, «Energy Dissipation by Ions in the kev Region,» *Phys. Rev.*, vol. 124, págs. 128-130, 1961. DOI: 10.1103/PhysRev.124.128. dirección: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.124.128.

[49] «Geant4 a simulation toolkit: Physics Reference Manual,» 10.6, CERN Accelerating science, 2020, págs. 157-161.

[50] J. J. Wilkens y U. Oelfke, «Analytical linear energy transfer calculations for proton therapy.,» *Medical Physics*, vol. 30, n.º 5, págs. 806-815, 2003. DOI: 10.1118/1.1567852.

[51] F. Guan, C. Peeler, L. Bronk, G. Changran, R. Taleei, S. Randeniya, S. Ge, D. Mirkovic, D. Grosshans, R. Mohan y U. Titt, «Analysis of the track-and dose-averaged LET and LET spectra in proton therapy using the geant4 Monte Carlo code,» *Medical Physics*, vol. 42, págs. 6234-6247, 2015. DOI: 10.1118/1.4932217.

[52] J. García-Farieta, J. Salamanca y D. Rodriguez, «Radiación-Materia: GEANT4 Hands On! Un recurso educativo orientado a profesores-investigadores Alfabetización Científica y Tecnológica.» 2020, ISBN: 978-958-787-231-6.

[53] P. Arce, P. Rato Mendes, M. Canadas y J. Lagares, «GAMOS: A GEANT4-based easy and flexible framework for nuclear medicine applications,» 2008, págs. 3162-3168. DOI: 10.1109/NSSMIC.2008.4775023.

[54] S. Jan, G. Santin, D. Strul, S. Staelens, K. Assié, D. Autret, S. Avner, R. Barbier, M. Bardiès, P. Bloomfield, D. Brasse, V. Breton, P. Bruyndonckx, I. Buvat, A. Chatziioannou, Y. Choi, Y. Chung, C. Comtat, D. Donnarieix y C. Morel, «GATE: a simulation toolkit

for PET and SPECT,» *Physics in medicine and biology*, vol. 49, págs. 4543-61, 2004. DOI: 10.1088/0031-9155/49/19/007.

[55] «Geant4 a simulation toolkit: Introduction to Geant4,» 10.7, CERN Accelerating science, 2020.