



Universidad de Valladolid

Facultad de Ciencias

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Física

Simulaciones Monte Carlo para el Blindaje de una Fuente de Rayos

Gamma

Autor: Jose Antonio del Barrio González

Tutor/es: Iván Cabria Álvaro

*Dedicado a
Jose Antonio del Barrio Calvo*

Índice general

1. Introducción	9
1.1. Orígenes del método de Monte Carlo	9
1.2. Motivación	10
1.3. Planteamiento del problema	10
1.4. Objetivos	11
2. Fundamentos Teóricos de la Simulación	13
2.1. Desintegración del ^{137}Cs	13
2.2. Ley Fundamental de la Atenuación	14
2.3. Interacciones	17
2.3.1. Efecto fotoeléctrico	17
2.3.2. Efecto Compton	18
2.3.3. Dispersión Elástica	20
2.3.4. Producción de Pares	20
2.4. Secciones Eficaces y Base de Datos	20

2.4.1.	Sección eficaz del efecto fotoeléctrico	22
2.4.2.	Sección eficaz diferencial del efecto Compton	22
2.4.3.	Sección eficaz diferencial de la dispersión elástica	23
2.4.4.	Base de Datos	25
3.	Programa y Algoritmos	27
3.1.	Elección de la interacción	27
3.2.	Distancia recorrida entre interacciones	28
3.3.	Dirección del fotón	29
3.3.1.	Dirección en el caso de la dispersión elástica	29
3.3.2.	Dirección en el caso de la dispersión Compton	30
3.4.	Funcionamiento	31
4.	Simulaciones y Resultados	33
4.1.	Blindaje o Shielding	33
4.2.	Características del espectro	34
4.3.	Espectros	36
4.4.	Eficiencia de la Simulación	38
5.	Conclusiones	41

Resumen

Este Trabajo de Fin de Grado consistió en escribir un código en C de simulaciones de Monte Carlo del blindaje de una fuente de rayos gamma, en hacer simulaciones del blindaje con dicho código y en analizar los resultados de las simulaciones.

El sistema de blindaje consistió en una esfera, con una fuente puntual de rayos gamma, ^{137}Cs , en el centro de la esfera. El ^{137}Cs emite fotones gamma con una energía de 0,6617MeV. Se simularon esferas de *Pb*, *U*, *UO₂* y *W*, y de diferentes radios. Se simularon las evoluciones de un millón de fotones dentro de la esfera. Los fotones de 0,6617MeV pueden sufrir tres efectos dentro de la esfera: El efecto fotoeléctrico, la dispersión elástica y el efecto Compton. Las secciones eficaces y atenuaciones de estos efectos se obtuvieron de la base de datos XCOM del NIST (National Institute of Standards and Technology), la cual se basa en experimentos y cálculos teóricos.

Se simuló el nivel de blindaje y el espectro de los fotones que salen de la esfera. Se analizó cómo depende el nivel de blindaje del radio y del material de la esfera. Se analizó y explicó el origen físico de las principales características del espectro: El borde Compton, el espectro Compton y el fotopico.

Abstract

This Final Degree Project consisted on implementing a code in C for Monte Carlo simulations of the shielding of a source of gamma rays, on running the simulations of the shielding with the code and on analyzing the results of the simulations.

The shielding systems consisted on a sphere, with a point source of gamma rays, ^{137}Cs , in the center of the sphere. The nuclide ^{137}Cs emits gamma photons with an energy of 0,6617MeV. Spheres of Pb , U , UO_2 and W , and of several radii were simulated. The evolutions of one million photons inside the sphere were considered. The photons of 0,6617MeV can interact through three effects inside the sphere: The photoelectric effect, the coherent scattering and the Compton effect or incoherent scattering. The cross sections and attenuations of these effects were obtained from the XCOM database of the NIST (National Institute of Standards and Technology). These sections and attenuations are based on experiments and theoretical calculations.

The shielding level and the spectrum of the photons not absorbed by the sphere were simulated. It was analyzed and explained how the shielding level depends on the radius and the type of material of the sphere. It was also analyzed and explained the physical origin of the main features of the spectrum: The Compton edge, the Compton spectrum and the photopeak.

Capítulo 1

Introducción

En este trabajo de fin de grado se pretende crear un programa de ordenador que sea visto como una herramienta para realizar experiencias con muestras radiactivas, evitando exponerse a la radiación y ahorrando costes en la compra de materiales. Por otro lado se le da un enfoque didáctico, en el que se intentará aportar una explicación física a todos los aspectos que se presentan tanto en el enunciado como en la resolución de este problema.

1.1. Orígenes del método de Monte Carlo

Los métodos de Monte Carlo son un conjunto de métodos estadísticos para resolver problemas matemáticos complejos y costosos de resolver exactamente. También se habla de método de Monte Carlo, en singular, para referirse a todo el conjunto. Dan soluciones aproximadas a una gran variedad de problemas matemáticos. Permiten hacer experimentos mediante ordenadores, en lugar de hacer materialmente los experimentos. Se pueden aplicar a cualquier tipo de problema.

El método de Monte Carlo permite resolver problemas físicos y matemáticos mediante la simulación de variables aleatorias. El motivo de que una variable sea aleatoria puede ser el desconocimiento o la dificultad para determinar su valor de un modo analítico. Ejemplo de ello pueden ser las velocidades de las partículas de un gas, compuesto por $6,022 \times 10^{23}$ partículas o más.

Se considera como fecha de nacimiento del método de Monte Carlo al año de 1949 en el que apareció el artículo titulado *The Monte Carlo method*. La creación de este método suele ligarse a los nombres de los matemáticos J. von Neumann y S. Ulam. En la Unión Soviética los primeros artículos dedicados a este método aparecieron en 1955 y 1956.

Hasta la aparición de los computadores electrónicos este método no encontraba aplicaciones

suficientemente amplias, ya que la simulación a mano de variables aleatorias constituye un proceso muy laborioso.

Hay dos peculiaridades en el método. La primera consiste en que su algoritmo tiene una estructura muy sencilla. Como regla se elabora primero un programa para la realización de una prueba aleatoria. En nuestro caso simulamos un fotón procedente del centro de la esfera y distancia total recorrida, la de toda la historia. Después esta prueba se repite N veces, de modo que cada prueba sea independiente de las restantes y se toma la media de los resultados de todos los experimentos. La segunda peculiaridad consiste en que el error es proporcional a $\sqrt{D/N}$, donde D es una constante y N es el número de pruebas. Esta fórmula permite ver que para disminuir el error en 10 veces, es preciso aumentar N en 100 veces. Estas peculiaridades que acabamos de exponer son aplicadas a nuestro programa en la subsección 7.5.

1.2. Motivación

En la actualidad la demanda de energía eléctrica ha llegado a niveles nunca imaginados. En esta línea se abre el debate de qué fuentes de energía son las idóneas para abastecernos. Existe un importante grupo de gente y personalidades que sostienen que dados los costes, ritmos de producción y beneficios mediambientales nuestra única salida es la energía nuclear. El motivo de la seguridad y la protección ante la radiación origina que este modo de obtener electricidad tenga grandes retractoros. Hemos de tener en cuenta que en catástrofes como la de Chernobyl o Fukushima, el escape de incontrolado de $^{137}_{56}\text{Cs}$ como productos de las reacciones en cadena producidas en el núcleo de la central, produjo problemas a su población.

Por este motivo este TFG pretende dar una idea de cuál debe ser el blindaje al que debemos someter la radiación de este tipo de núcleos.

Por otro lado es bien sabido de la utilización de nucleos radiactivos en la lucha contra tumores cancerígenos. Los nuevos tratamientos consisten en introducir estos núcleos en el interior de botellas, debidamente blindadas, de tal modo que de esta solo salgan fotones de cierta energía y el resto sean atenuados absorbidos en el interior. Uno de los argumentos de salida del programa que hemos generado es el espectro de los fotones que consiguen escapar al blindaje. De este modo podemos orientarle en la simulación del blindaje selectivo necesario.

1.3. Planteamiento del problema

Si en el centro de una esfera de radio R de cierto material (que ecogeremos entre U , Pb , UO_2 y W), colocamos una cierta cantidad de un isótopo radiactivo (en nuestro caso $^{137}_{56}\text{Cs}$), éste comenzará a desintegrarse emitiendo radiación. Una suposición imprescindible que haremos es que la cantidad de este elemento radiactivo la podemos suponer puntual. La pregunta que nos hacemos es cuánta energía consigue escapar de la esfera, o en otras palabras determinar el

espectro de los fotones que escapan de la esfera.

El fotón va a poder realizar tres tipos de interacciones con los átomos del material: efecto fotoeléctrico, dispersión Compton y dispersión elástica. La probabilidad de cada interacción depende del valor de su sección eficaz, que es función de la energía. Conocer la sección eficaz también implica conocer la distribución de probabilidad asociada al avance del fotón entre dos interacciones.

Por otro lado, conocer la sección eficaz diferencial implica conocer la distribución de probabilidad asociada a cada una de las posibles direcciones del fotón dispersado.

Con todo esto se ha creado un programa que es capaz de simular la historia de N fotones y calcular el % de ellos que escapan y la energía con la que lo hacen cada uno de ellos, es decir, el espectro de los fotones que salen de la esfera de blindaje.

1.4. Objetivos

Una vez creado y comprobado el programa, los objetivos que se proponían eran los siguientes:

- 1 Comprobaremos la ley de atenuación exponencial de la radiación. Según la teoría, la intensidad con la que llega la radiación gamma a un espesor de material r viene dado por $I = I_0 e^{-\frac{r}{\lambda}}$, donde el recorrido libre medio λ es una constante del material.
- 2 Estableceremos cuál de los 4 materiales testados es el que mayor atenuación proporciona.
- 3 Obtendremos el espectro de los fotones gamma que escapan de la esfera y comprobaremos que su forma y resultados numéricos se ajusta al predicho por la teoría, observando con claridad el borde Compton y el foto pico.

Capítulo 2

Fundamentos Teóricos de la Simulación

En este capítulo expondremos los diferentes aspectos teóricos de la simulación. Empezaremos describiendo el tipo de radiación que vamos a blindar, sus modos de interacción con la materia y cómo se mueve a través de ellas.

2.1. Desintegración del ^{137}Cs

La principal finalidad de este trabajo es responder a la pregunta de qué grosor debe tener una esfera de cierto material para que no escape radiación. Pero antes de eso debemos explicar qué tipo de radiación estamos blindando y por qué elegimos el ^{137}Cs para nuestro problema.

En la formación de un núcleo cierta cantidad de masa se pierde en forma de energía B , es lo que denominaremos *energía de ligadura*.

$$^{137}\text{Cs} = Zm_p + (A - Z)m_n - B/c^2 \quad (2.1)$$

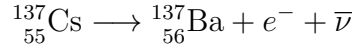
El valor de B viene establecido por la fórmula semiempírica:

$$B = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c Z(Z - 1)A^{-1/3} - a_{sim} \frac{(A - 2Z)^2}{A} + \delta \quad (2.2)$$

donde los parámetros a_v , a_s , a_c , a_{sim} , δ son determinados mediante ajustes a resultados experimentales. Con esto vemos que para familias de núcleos isóbaros, B presenta un aspecto

parabólico, es decir existe un valor del número atómico Z para el cual el valor de la energía de ligadura se maximiza, el núcleo con el Z correspondiente al máximo es el más estable.

Para la isóbara $A=137$, el núcleo más estable es el que tiene $Z=56$, lo que implica que el núcleo de ${}^{137}_{55}\text{Cs}$ emitirá un electrón para dar lugar un núcleo de ${}^{137}_{56}\text{Ba}$ en la reacción:



Resulta que tras una desintegración β^{-} , los núcleos hijo se encuentran en estados excitados. En nuestro caso el 94.696 % de los átomos de ${}^{137}_{56}\text{Ba}$ aparecen en su estado excitado, emitiendo un fotón gamma de 0.6617 MeV al pasar a su estado fundamental. Por último, comentaremos que los núcleos de ${}^{137}_{55}\text{Cs}$ tienen una semivida de 30.23 años y los de ${}^{137}_{56}\text{Ba}$ una semivida de 2.55 minutos.

En nuestro programa se están realizando simulaciones suponiendo una fuente o muestra radioactiva puntual que emite 10^6 fotones por segundo, o dicho de otra manera, que tiene una actividad de 10^6 desintegraciones por segundo. Con estas condiciones y sabiendo la densidad y la vida media del ${}^{137}_{55}\text{Cs}$, podemos determinar la cantidad de ${}^{137}_{55}\text{Cs}$ de la muestra radioactiva que estamos simulando en el interior de la esfera. Los resultados nos dan una masa de $1,563 \times 10^{-8}\text{g}$ lo que equivale a $8,2267 \times 10^{-11}\text{cm}^3$. Estos volúmenes son despreciables si tenemos en cuenta que los radios de los blindajes que estamos usando son del orden de 10^3cm^3 . Luego efectivamente podemos considerarlo como una fuente puntual.

2.2. Ley Fundamental de la Atenuación

En el año 1900 Becquerel y Villar identificaron por primera vez radiación proveniente de una muestra de un mineral de Uranio. En 1909 Soddy y Russell descubrieron que esta radiación, conocida con el nombre de rayos gamma, seguía una ley de atenuación exponencial:

$$I = I_0 e^{-\mu_l x} \quad (2.3)$$

En su momento fue un avance conocer cómo se comportaba en su interacción con la materia, pues al contrario que la radiación α y β que tienen una longitud de penetración bien definida, la radiación γ no se absorbe al 100%. En la actualidad se sabe que la radiación γ se trata de fotones.

La interacción de un fotón gamma con un átomo (más precisamente con la nube electrónica de éste) tiene un caracter probabilístico. Así pues, la cantidad de fotones absorbidos por unidad de tiempo en un material entre x y $x+dx$ será proporcional al número de fotones incidentes por unidad de tiempo en x , $I(x)$, y al espesor dx :

$$dI = -I(x)\mu_l dx \quad (2.4)$$

donde μ_l es la constante de proporcionalidad entre los fotones absorbidos y los incidentes, la cual depende de las características del material: El tipo de átomos del material y la densidad del material. Más adelante explicaremos este coeficiente y otros coeficientes relacionados.

Si integramos la ecuación diferencial (2.4), tenemos que:

$$I = I_0 e^{-\mu_l x} \quad (2.5)$$

Éste es el motivo de que la radiación decaiga exponencialmente cuando interacciona con la materia.

Definamos algunas variables que nos informan de la capacidad de absorción de un medio:

- Sección Eficaz σ : Aunque en la quinta sección daremos una definición cuántica más precisa, para esta sección nos vale con tener una idea más cualitativa y visual. Si pensamos en un gas de partículas, éstas se encuentran en continuo movimiento caótico, chocando unas contra otras. Es lógico pensar que cuanto mayor es el volumen de cada una de estas partículas mayor probabilidad existe de que choquen. Pues bien, a medida que avanza esta partícula lo que determina el choque o no con otras partículas es que la sección que presenta cada una de las partículas vistas de frente se corten a medida que la partícula avanza. A esta sección vista de frente es a lo que se le denomina sección eficaz y tiene unidades de área. En el mejor de los casos la partícula es una esfera y la sección eficaz será (imagen frontal de la esfera) una circunferencia. Si avanza en línea recta una distancia dx , los choques que recibirá serán tantos como partículas caigan en el volumen del cilindro de base σ y altura dx . En nuestro caso estas partículas son fotones, y cada tipo de interacción que veremos en la siguiente sección (efecto fotoeléctrico, efecto Compton y dispersión elástica), presentará una sección diferente.
- Coef. de Atenuación Lineal μ_l : Como ya hemos visto antes, se trata del coeficiente de proporcionalidad entre el número de fotones incidentes y el número de fotones absorbidos por unidad de longitud del medio en que se estén desplazando; tiene por lo tanto dimensiones de $longitud^{-1}$. Es muy simple de medir experimentalmente, pero es difícil encontrarlo tabulado, pues depende de la densidad del material. En el caso del agua, por ejemplo, su valor varía fuertemente dependiendo del estado de agregación, aun tratándose de la misma sustancia.
- Coef. de Atenuación Másico μ : Este coeficiente es similar al anterior, salvaguardando el problema que existía con la dependencia con la densidad. En otras palabras, se trata del coeficiente de atenuación lineal dividido por la densidad del medio; tiene por lo tanto dimensiones de $área/masa$. Los rayos γ interactúan principalmente con los electrones de la corteza electrónica de los átomos, por lo tanto, el coeficiente de atenuación debe ser proporcional a la densidad electrónica P :

$$P = \frac{Z\rho}{A} \quad (2.6)$$

La razón entre el coeficiente de atenuación lineal y la densidad μ_l/ρ es conocido como coeficiente de atenuación másico y tiene unidades de cm^2/g . Podemos expresar el coeficiente de atenuación en función de la sección eficaz, $\sigma(cm^2)$:

$$\mu = \frac{n_A\sigma}{A} \quad (2.7)$$

donde n_A es el número de Avogadro y A es la masa molar. La sección eficaz es la probabilidad (proporcional si nos referimos a la probabilidad definida entre 0 y 1) de que un fotón interactúe con un único átomo. El coeficiente másico de atenuación es independiente de la densidad, y es por ello que es mucho más común de encontrarlo tabulado.

- Recorrido Libre Medio l : Siguiendo el ejemplo de un gas de partículas, podemos definir el recorrido libre medio como la distancia que recorre una partícula en valor promedio sin chocar con ninguna otra y tiene entonces dimensiones de longitud. De este modo, el recorrido libre medio clásico para un gas de partículas es:

$$\lambda = \frac{A}{\sigma\rho n_A} = \frac{1}{\sigma n_o} \quad (2.8)$$

donde A es la masa molar del gas, σ la sección eficaz de cada partícula, ρ la densidad de masa y n_o es el número de átomos por unidad de volumen.

Aunque el término intermedio de las igualdades anteriores es, según las definiciones de las constantes, exclusivo de un gas de partículas, el tercer término es general para cualquier tipo de partículas que estén interactuando. Para el caso de los fotones, cada tipo de efecto (fotoeléctrico, Compton, dispersión elástica y creación de pares) ya se encargara de hacer notar las dependencias pertinentes, como puede ser la densidad de electrones en el material con el que interactúan, en el valor de la sección eficaz. Así pues definimos matemáticamente el recorrido libre medio de un fotón en un material como:

$$\lambda = \frac{1}{\sigma_{efecto}n_o} \quad (2.9)$$

O equivalentemente, utilizando la relación entre μ y σ :

$$\lambda = \frac{1}{\mu_{efecto}\rho} \quad (2.10)$$

Los tres primeros coeficientes que hemos definido son equivalentes; describen a fin de cuentas la probabilidad de que un fotón interactúe con algún electrón del material. En el desarrollo de nuestro programa hemos utilizado el coeficiente de atenuación másico.

La sección eficaz depende de la energía del fotón y por tanto, también el recorrido libre medio depende de la energía del fotón.

2.3. Interacciones

En esta sección explicaremos cuáles son los diferentes modos en que se puede dar la interacción de un fotón γ de energía E_γ con la materia. Estas interacciones son el resultado del choque entre un fotón con un electrón de la capa electrónica de alguno de los átomos (electrones muy ligados) de la red o un electrón de las capas de valencia o conducción del sólido. Estos procesos son: el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton, la dispersión elástica y la producción de pares. La probabilidad de que se produzca uno u otro la veremos con más detalle en la siguiente sección, no obstante haremos algunos comentarios. En la absorción fotoeléctrica el fotón pierde toda su energía en una única interacción. La probabilidad de esta interacción depende fuertemente de la energía del fotón E_γ y del número atómico Z . En el efecto Compton, el fotón pierde sólo una parte de su energía en una interacción. Esta interacción no depende tan fuertemente de la energía del fotón ni del número atómico Z de los átomos. Por último, en la producción de pares electrón-positrón, el fotón pierde toda su energía. No obstante, este tipo de interacción es irrelevante para nuestras simulaciones, ya que necesitamos energía de aproximadamente 1 MeV, y como hemos comentado en la sección 2, los fotones de nuestra simulación tienen energías de 0.6617 MeV.

2.3.1. Efecto fotoeléctrico

El fotón γ interactúa con un electrón ligado a un átomo, cediendo toda su energía al mismo. Parte es utilizada en vencer la energía de ligadura y la sobrante se transforma en energía cinética en el electrón, sólo una pequeña parte es transferida al átomo debido a la conservación del momento. La absorción fotoeléctrica en la detección de rayos gamma, dado que el fotón pierde toda su energía, el pulso de energía aportado por el electrón liberado en el detector constituye el fotopico, es decir, la máxima energía a la que puede escapar un fotón o un electrón del blindaje.

La probabilidad de la absorción fotoeléctrica depende de E_γ , de la energía de ligadura del átomo y del número atómico del mismo. La probabilidad es mayor cuanto más ligados se encuentran los electrones al átomo. Así pues, los electrones de la capa K son los más afectados (entorno a un 80 %), todo esto siempre y cuando E_γ exceda la energía de ligadura de los electrones. Esta probabilidad viene dada aproximadamente por la siguiente expresión:

$$\tau \propto Z^4/E^3 \quad (2.11)$$

donde τ es el coeficiente másico de atenuación fotoeléctrico.

El efecto fotoeléctrico es la interacción predominante para fotones de baja energía y átomos pesados.

La energía del fotoelectrón es la diferencia entre E_γ y la energía de ligadura del electrón.

$$E_e = E_\gamma - E_b \quad (2.12)$$

En la mayoría de los detectores el fotoelectrón es detenido rápidamente en el volumen activo del detector, el cual emite un pulso cuya amplitud es proporcional a la energía depositada por el fotoelectrón. La energía de ligadura del fotoelectrón no se pierde, aparece como un rayo X emitido en coincidencia con el fotoelectrón, el cual también es absorbido en el detector en la mayoría de los casos; aparece, por tanto, un pulso proporcional a la energía de ligadura.

2.3.2. Efecto Compton

El efecto Compton es una dispersión inelástica en la que un rayo gamma interacciona con un electrón débilmente ligado (considerando como débilmente ligado cuando E_γ es mucho mayor que el valor de la energía de ligadura), y se transfiere parte de la energía al electrón. Este efecto predominará por tanto entre los electrones pertenecientes a las bandas de conducción del material. Durante este proceso se conserva la energía y el momento lineal. Tras esta interacción, los electrones se convierten en electrones libres con una energía cinética igual a la diferencia de energía perdida por el fotón y la energía de ligadura del electrón.

Puesto que la energía de ligadura del fotón es muy pequeña con respecto a E_γ , la energía cinética del electrón se puede escribir aproximadamente como:

$$E_e = E_\gamma - E' \quad (2.13)$$

donde: E_e es la energía del electrón desviado, E_γ es la energía del fotón incidente y E' es la energía del electrón resultante.

Tras la interacción aparecen dispersadas dos partículas: el electrón liberado y el fotón resultante. Las direcciones en las que se desplazan estas dos partículas dependen de la energía transferida por el fotón incidente al electrón. Pues bien, teniendo en cuenta la conservación de la energía y utilizando las expresiones relativistas de la energía y momento, tenemos que la energía del fotón desviado viene dada por:

$$E' = \frac{m_0c^2}{1 - \cos(\theta) + m_0c^2/E_\gamma} \quad (2.14)$$

donde m_0c^2 es la energía relativista asociada al electrón en reposo, 511 keV, y θ es el ángulo que forma la dirección del fotón resultante con la dirección del fotón incidente.

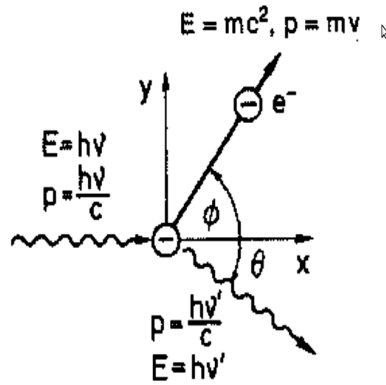


Figura 2.1: Efecto Compton.

Como vemos, la energía del fotón dispersado es mínima cuando su dirección forma 180° con la dirección del fotón incidente. En este caso, el electrón se alejará del punto de colisión en la misma dirección que el fotón incidente. Para este caso, la energía del fotón dispersado será mínima y la del electrón máxima:

$$E_{\gamma min} = \frac{m_0 c^2}{2 + \frac{m_0 c^2}{E_{\gamma}}} \quad (2.15)$$

$$E_{e max} = \frac{E_{\gamma}}{1 + \frac{m_0 c^2}{2E_{\gamma}}} \quad (2.16)$$

En nuestra simulación:

- $E_{\gamma} = 0.6617 \text{ MeV}$
- $m_0 c^2 = 0.511 \text{ MeV}$
- $E_{\gamma min} = 0,1843 \text{ MeV}$
- $E_{e max} = 0,4774 \text{ MeV}$

La energía $E_{\gamma min}$ es la energía de lo que se conoce como el borde Compton del espectro de los fotones gamma de la fuente radioactiva. Los fotones que escapan con una energía igual a 0.6617 MeV constituyen el fotopico. De este modo solo pueden existir fotones con energía comprendidas entre el borde Compton y el fotopico. En la sección de discusión de resultados, volveremos sobre esta energía.

Por último, cuando se produce un efecto Compton en un detector, el electrón dispersado es absorbido en el material absorbente del detector, de modo que se produce un pulso proporcional a la energía del fotón incidente.

2.3.3. Dispersión Elástica

En la dispersión elástica, el fotón no pierde energía, simplemente cambia la dirección de propagación del mismo. Cuánticamente es similar a la interacción entre una partícula libre y un potencial que decae con la distancia más rápido que $1/r$, lo que produce un cambio de fase.

Si tratamos el choque entre el fotón y el electrón desde un punto de vista ondulatorio, es decir, la incidencia de una onda armónica sobre el electrón, éste comenzará a oscilar desde un punto de vista clásico en torno a su posición de equilibrio debido a la fuerza que ejercen el campo eléctrico \vec{E} y el campo magnético \vec{B} asociados a la onda. Lo sorprendente de esta interacción es que la dirección de dispersión del fotón no depende de la energía del fotón incidente, su probabilidad está equidistribuida en todas las direcciones. No obstante esta probabilidad la estudiaremos con más detalle en la sección siguiente.

2.3.4. Producción de Pares

Un rayo gamma con una energía de al menos 1.022 MeV puede producir un par electrón-positrón cuando se encuentra bajo la influencia de un campo electromagnético fuerte en las cercanías de un núcleo. En esta interacción el núcleo recibe una cantidad de energía despreciable con la finalidad de conservar el momento lineal en el choque. No obstante, el fotón desaparece por completo y se crea un par electrón-positrón. La energía mínima de 1.022 MeV es la energía relativista de un electrón más un positrón en reposo. Si la energía fuera mayor, ésta se repartiría en forma de energía cinética entre ambas a fin de conservar el momento lineal. Puesto que las energías que vamos a tratar en nuestro problema son como máximo de 0.6617 MeV, este tipo de interacción no existe en nuestras simulaciones.

El electrón y el positrón son rápidamente absorbidos en el detector. Después de perder su energía cinética, se recombinan, el positrón con un electrón y viceversa, emitiéndose dos rayos gamma de energía 0.511 MeV cada uno.

2.4. Secciones Eficaces y Base de Datos

En principio, el fotón se puede mover en cualquier dirección y cualquier longitud. No obstante, cada efecto tiene una probabilidad determinada de que suceda y cada uno de éstos tiene diferentes preferencias de dirección en la dispersión del fotón y de avance (recorrido libre medio). Para determinar la probabilidad de que se produzca un efecto determinado, debemos normalizar las secciones eficaces:

$$P_{efecto} = \frac{\sigma_{efecto}}{\sum \sigma_i} \quad (2.17)$$

Las secciones eficaces dependen de la energía del fotón y por tanto, también la probabilidad de un efecto depende de la energía del fotón.

Para calcular la probabilidad de un efecto hemos usado las secciones eficaces de la base de datos XCOM del NIST (National Institute of Standards and Technology). Para simular la dirección en la que sale un fotón dispersado en un efecto Compton o en una dispersión elástica, hemos usado las secciones eficaces diferenciales de estos efectos.

En esta sección daremos una definición cuántica de la sección eficaz diferencial y del modo de determinarla. Puesto que algunos procedimientos de resolución de las ecuaciones son bastante tediosos y nos alejan de la finalidad de este trabajo, haremos un planteamiento muy simple y tomaremos las soluciones ya obtenidas.

Si suponemos la función de onda asociada al fotón incidente $\psi_{inc.}$ como una onda libre, $\psi_{inc.} = Ae^{ikz}$ y la función de onda total ψ , que se tratará del estado propio del hamiltoniano en que se encuentra el fotón al interactuar a través de un determinado efecto con uno de los átomos del medio, entonces la función de onda asociada al fotón dispersado vendrá dada como:

$$\psi_{disp.} = \psi - \psi_{inc.} \quad (2.18)$$

Si recordamos la definición de corriente cuántica asociada a una función de onda ψ , $\vec{j} = \frac{\hbar}{2m}\psi^*\nabla\psi - \psi^*\nabla\psi\psi^*$,

$$\begin{aligned} \vec{j}_{inc} &= \frac{\hbar}{2m}\psi_{inc}^*\nabla\psi_{inc} - \psi_{inc}^*\nabla\psi_{inc}\psi_{inc}^* \\ \vec{j}_{disp} &= \frac{\hbar}{2m}\psi_{disp}^*\nabla\psi_{disp} - \psi_{disp}^*\nabla\psi_{disp}\psi_{disp}^* \end{aligned}$$

Con estas dos densidades de corriente de probabilidad podemos definir la sección eficaz diferencial en la dirección subtendida por el ángulo sólido $d\Omega$, como la razón entre el flujo de corriente dispersada en la superficie $r^2d\Omega$ y la densidad de corriente incidente en el punto de dispersión.

$$d\sigma = \frac{j_{disp}r^2d\Omega}{j_{inc}} \quad (2.19)$$

Si integramos esta expresión a todo ángulo sólido, obtendremos la sección eficaz del efecto asociado a la función de onda.

Aunque la idea de este procedimiento es sencilla, se complica mucho a la hora de realizar las operaciones, pues uno de los mayores problemas se encuentra en definir convenientemente el Hamiltoniano, lo que hace que nos alejemos en muchas ocasiones del Hamiltoniano exacto.

Por otro lado, en esta sección sólo pretendemos justificar brevemente de dónde proceden las secciones eficaces de cada efecto y sus dependencias. No obstante, puesto que su cálculo es bastante tedioso y en ocasiones prácticamente imposible, la base de datos empleada en las simulaciones usa resultados teóricos y experimentales y los combina para poder realizar una mejor descripción de la realidad.

2.4.1. Sección eficaz del efecto fotoeléctrico

La obtención de una sección eficaz exacta para el efecto fotoeléctrico es una tarea compleja, en primer lugar, por el hecho intrínseco de que el cálculo debe tener en cuenta el estado de ligadura del electrón, y en segundo lugar, porque existe una marcada dependencia energética en el comportamiento del fotón.

A pesar de todo de todo es muy habitual establecer la siguiente relación de proporcionalidad entre la sección eficaz, el número atómico y la energía del fotón incidente:

$$\sigma \propto \frac{Z^n}{(h\nu)^m} \quad (2.20)$$

En la tabla 2.1 se muestran los valores aproximados que se suelen dar a las variables n y m en función de la energía del fotón incidente.

	0.1 MeV	5 MeV
n	4	~ 4,6
m	3	1

Tabla 2.1: Ctes. Sección Eficaz Efecto Fotoeléctrico

2.4.2. Sección eficaz diferencial del efecto Compton

Determinar la sección eficaz diferencial del efecto Compton es una tarea compleja. Nos quedaremos simplemente con la solución a la que se llega. Esto es debido a que debemos hacer un tratamiento cuántico relativista, es decir, debemos plantear la ecuación de Klein-Gordon y resolverla.

El resultado es conocido como la fórmula o sección eficaz diferencial de Klein-Nishina:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto r^2 \left[r + \frac{1}{r} - 1 + (\cos\Delta\theta)^2 \right] \quad (2.21)$$

Donde r es la razón entre las energías del fotón incidente y del fotón dispersado: $r = \frac{E_f}{E_i}$. Esta relación depende del ángulo $\Delta\theta$ que forman las direcciones del fotón incidente y del fotón dispersado:

$$\frac{E_f}{E_i} = \frac{1}{1 + \frac{E_f}{m_e c^2} (1 - \cos \Delta \theta)} \quad (2.22)$$

Esta sección eficaz diferencial servirá para simular la dirección del fotón dispersado en un efecto Compton. Puesto que su expresión es más complicada de integrar y además debemos tener en cuenta que los fotones no interaccionan con electrones libres, usaremos el algoritmo de Khan, que ya veremos más adelante.

2.4.3. Sección eficaz diferencial de la dispersión elástica

Desde un punto de vista cuántico podemos llegar a determinar la sección eficaz de la dispersión elástica haciendo tender r a 1, es decir, cuando el fotón es dispersado con la misma energía con la que incidió, $E_f \rightarrow E_i$.

No obstante, es interesante llegar a hasta ella de un modo clásico. Consideremos una luz polarizada monocromática que incide sobre una carga q . La componente eléctrica de la onda puede escribirse como:

$$\vec{E} = \vec{e} E_o e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (2.23)$$

donde E_o es la amplitud del campo eléctrico, \vec{e} es el vector en el que está polarizado este campo y \vec{k} es el vector de ondas, con $\vec{e} \cdot \vec{k} = 0$

Asumimos que la partícula de carga q (en este caso el electrón en el que se va a producir la dispersión, va a realizar pequeñas oscilaciones entorno a su posición de equilibrio, donde tomaremos el origen de coordenadas. También asumiremos que la velocidad de la partícula es subrelativista, de este modo podemos despreciar la fuerza ejercida por la componente magnética de la onda. La ecuación del movimiento de la partícula cargada es:

$$\vec{f} = q \vec{E} = m \ddot{\vec{s}} \quad (2.24)$$

donde m es la masa de la partícula y \vec{s} es el desplazamiento respecto del origen.

La potencia radiada promediada en el tiempo por unidad de ángulo sólido, debida a la aceleración no relativista de una partícula cargada, viene dada por:

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{q^2 \langle \ddot{\vec{s}}^2 \rangle}{16\pi^2 \epsilon_o c^3} \sin^2 \theta \quad (2.25)$$

donde θ es el ángulo que forma la dirección de la aceleración de la partícula (la dirección del vector de polarización del campo eléctrico \vec{E}) y la dirección de propagación de la radiación dispersada, que la consideraremos paralela al vector \vec{n}). θ varía entre 0 y π .

Estamos tratando la partícula oscilante como una antena corta:

$$\frac{dP}{d\Omega} = \left(\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2}\right)^2 \frac{\epsilon_0 c E_o^2}{2} \sin^2\theta \quad (2.26)$$

donde el valor del vector de Poynting promediado es:

$$\langle u \rangle = \frac{\epsilon_0 c E_o^2}{2} \quad (2.27)$$

Es conveniente definir la sección eficaz de dispersión elástica como el área equivalente de la onda incidente que irradia la misma potencia que la radiación dispersada por la carga q . Por lo tanto, la sección eficaz diferencial por unidad de ángulo sólido será:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dP/d\Omega}{\langle u \rangle} = \left(\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2}\right)^2 \sin^2\theta \quad (2.28)$$

Hasta ahora sólo hemos considerado la dispersión de una onda linealmente polarizada por una partícula cargada. Determinemos ahora la distribución angular de radiación dispersada. Utilicemos como base de vectores: \vec{e} , $\vec{e} \times \vec{k}$ y \hat{k} . En esta base podemos escribir el vector director de la radiación dispersada como:

$$\vec{n} = \sin\phi \cos\psi \vec{e} + \sin\phi \sin\psi \vec{e} \times \vec{k} + \cos\phi \hat{k} \quad (2.29)$$

donde ϕ es el ángulo subtendido entre la dirección de la radiación incidente y la radiación dispersada, y ψ es un ángulo que especifica la orientación del vector polarización en el plano perpendicular a \vec{k} , (asumiendo \vec{n} conocido).

Es fácil ver que:

$$\cos\theta = \vec{e} \cdot \vec{n} = \cos\psi \sin\phi \quad (2.30)$$

Así pues:

$$\sin^2\theta = 1 - \cos^2\psi \sin^2\phi \quad (2.31)$$

promediando el resultado para todas las polarizaciones posibles de la onda incidente, lo que es lo mismo que sobre todos los valores posibles del ángulo de polarización ϕ , obtenemos:

$$\overline{\sin^2\theta} = \frac{1 + \cos^2\phi}{2} \quad (2.32)$$

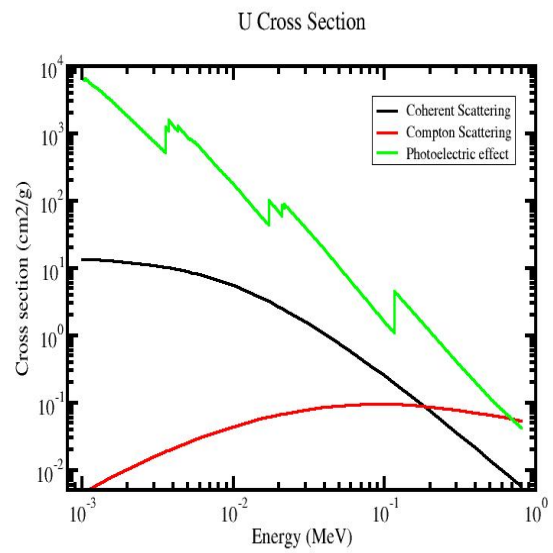
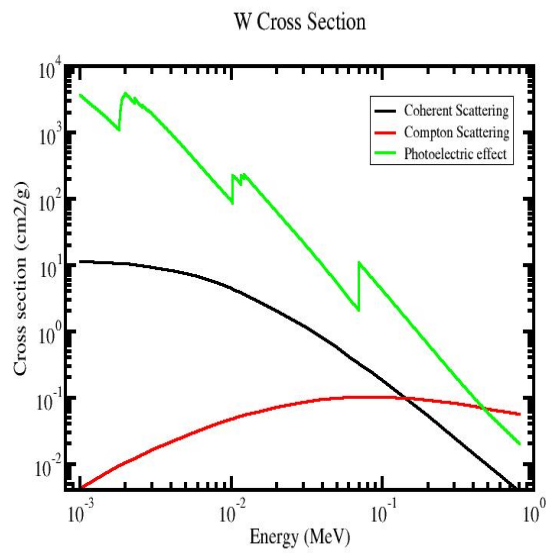
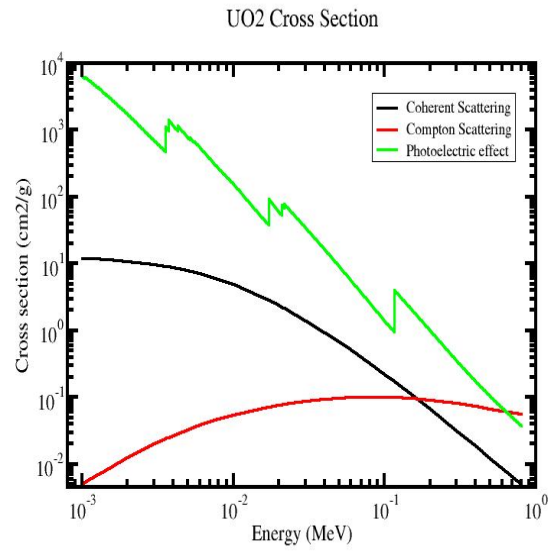
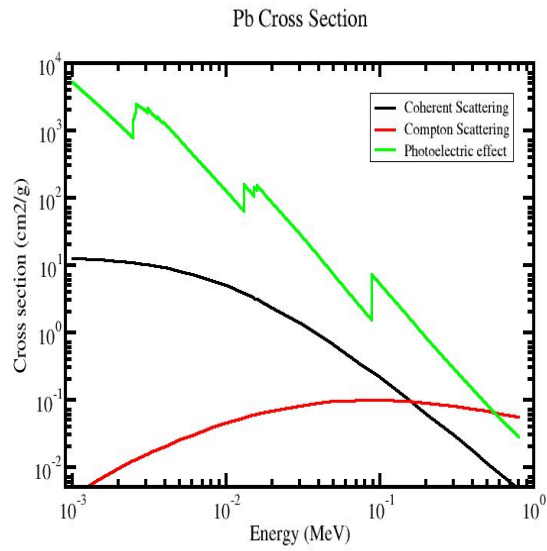
De este modo la sección eficaz diferencial por unidad de ángulo sólido viene dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\text{nopolarizada}}} = \left(\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2\phi}{2} \quad (2.33)$$

Esta sección eficaz diferencial servirá para simular la dirección del fotón dispersado en una dispersión elástica.

2.4.4. Base de Datos

Presentamos a continuación una serie de gráficas obtenidas de la base de datos XCOM del NIST. En ellas se representan las secciones eficaces integradas a todo ángulo sólido para el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton y la dispersión elástica para los materiales Pb, U, UO₂ y W en función de la energía.



Capítulo 3

Programa y Algoritmos

En este capítulo expondremos el algoritmo seguido en el programa y se detallará la definición de algunas variables y razonamientos no triviales en el código, es decir, se expondrá como se ha traducido toda la teoría y los razonamientos físicos y analíticos expuestos hasta aquí a un método computacional.

El algoritmo se estructura en tres partes fundamentales:

- 1 Elección del efecto
- 2 Determinación de la distancia recorrida por el fotón antes de realizar la interacción establecida por el punto 1 y si escapa o no de la esfera.
- 3 Determinación de la energía y dirección del fotón tras la interacción establecida en el punto 1, y de las nuevas coordenadas de posición del fotón

Según el orden expuesto en esta enumeración es como se va ejecutando la simulación establecida por nuestro código. En este mismo orden se irán especificando los detalles de cada paso.

3.1. Elección de la interacción

Tenemos un fotón en el punto A y queremos determinar qué proceso sufrirá en el siguiente punto, el punto B. La energía del fotón es conocida en cada instante, secciones eficaces de cada efecto en función de la energía son obtenidas de la base de datos. El algoritmo para determinar qué proceso de interacción sufre el fotón en el punto B es el más sencillo de todos. De la base de datos y de la ecuación (2.17), determinamos la probabilidad de que se produzca cada tipo de efecto: $P_{fotoeléctrico}$, $P_{Compton}$ y $P_{elástico}$. en este momento generamos un número aleatorio

rn . Si $rn < P_{fotoeléctrico}$, entonces se producirá el efecto fotoeléctrico, si $P_{fotoeléctrico} < rn < P_{fotoeléctrico} + P_{elástico}$, entonces se producirá la dispersión elástica y si $rn > P_{fotoeléctrico} + P_{elástico}$ se producirá la dispersión Compton. Conocida la sección eficaz asociada al efecto que se va a producir en unidades de *superficie/masa* y la densidad del material que constituye el blindaje, queda determinado el recorrido libre medio λ según la ecuación (2.10).

3.2. Distancia recorrida entre interacciones

En las simulaciones de Monte Carlo la distancia recorrida entre el punto A y B, Δr , se genera de una manera aleatoria. Esta distancia no sigue una distribución de probabilidad uniforme. A continuación vamos a explicar cómo se calcula la distribución de probabilidad de la distancia y cómo se genera de manera aleatoria la distancia recorrida entre interacciones.

Puesto que la intensidad debe ser proporcional al número de fotones que atraviesan una superficie unidad en la unidad de tiempo, la caída de intensidad dI dentro del material, entre r y $r+dr$, donde r es la distancia a la fuente de radiación, debe ser proporcional al número de fotones que llegan hasta distancias comprendidas entre r y $r+dr$, es decir:

$$dI/I_o = -\frac{1}{\lambda} e^{-\frac{r}{\lambda}} dr \rightarrow dn/n_o \propto e^{-\frac{r}{\lambda}} dr \quad (3.1)$$

donde n_o es el número de fotones que han salido de la fuente, dn son los que han sido absorbidos entre una distancia r y $r+dr$ y λ es el recorrido libre medio de la partícula.

De este modo, proponemos la distribución de probabilidad:

$$p(r) = A e^{-\frac{r}{\lambda}} \quad (3.2)$$

Pues bien, si normalizamos la expresión (3.2) a 1, determinaremos la constante de proporcionalidad. Puesto que nuestro problema se trata del blindaje mediante una esfera, tomaremos el límite inferior de integración en el centro de la esfera. El límite superior de integración será el radio de la esfera. Esto se conoce como una distribución truncada de distancias: La distancia recorrida entre interacciones estará entre 0 y el radio de la esfera.

$$\int_{r=0}^{r=R} A e^{-\frac{r}{\lambda}} \cdot dr = 1 \quad (3.3)$$

de este modo llegamos a que $A = \frac{1}{\lambda(1-e^{-\frac{R}{\lambda}})}$.

$p(r)$ es la distribución o densidad de probabilidad (probabilidad/unidad de longitud) de que un fotón situado a una distancia r de la fuente radioactiva interactúe con el material del blindaje. $p(r)dr$ es la probabilidad de que un fotón situado entre r y $r+dr$ interactúe con el material. La probabilidad de que un fotón situado entre 0 y Δr interactúe con el material del blindaje es:

$$P(r) = \int_0^r p(r)dr = \int_0^r Ae^{-\frac{r}{\lambda}} \cdot dr \quad (3.4)$$

Generamos un número aleatorio rn entre 0 y 1, este número aleatorio será probabilidad asociada a que un fotón interactúe en una distancia Δr . Si integramos la última igualdad de la ecuación (3.4) y despejamos la distancia, obtenemos:

$$\Delta r = -\lambda \ln(1 - rn(1 - e^{-\frac{R}{\lambda}})) \quad (3.5)$$

Esta distancia Δr es una distancia generada aleatoriamente de acuerdo a una distribución o densidad de probabilidad del tipo $Ae^{-\frac{r}{\lambda}}$, que no es una distribución uniforme.

3.3. Dirección del fotón

Hasta aquí tendríamos simulados el efecto con el que va a interactuar el fotón en el punto B y la distancia que recorrerá entre el punto A y el punto B, antes de interactuar en el punto B. Ahora nos falta concretar en qué dirección se moverá el fotón dispersado en el punto B, con respecto a la dirección del fotón incidente en B. Esta dirección depende del efecto en B, según la sección eficaz diferencial asociada al mismo.

Para determinar la dirección del fotón dispersado, consideramos los dos ángulos de las coordenadas esféricas: El ángulo polar θ , que varía entre 0 y ϕ y el ángulo azimutal π , que varía entre 0 y 2π .

En el caso del efecto fotoeléctrico, el fotón será absorbido en el punto B y no será dispersado. Por lo tanto no tendremos que calcular ninguna dirección.

3.3.1. Dirección en el caso de la dispersión elástica

Tal como vimos la sección eficaz diferencial de la dispersión elástica, es proporcional a $(1 + \cos^2\theta)/2$. Recordamos que la sección eficaz diferencial es la sección diferencial $d\sigma$ de la onda incidente que irradia tanta energía como la dispersada en la superficie (sobre la superficie

de la esfera de radio unidad centrada en el electrón dispersor) $d\Omega$, centrada en la dirección establecida por los ángulos θ y ϕ . Esto lleva a que $d\sigma/d\Omega$ es la fracción de la radiación incidente que sale dispersada en esa dirección. Hablamos de fracción en su significado puro si consideramos la relación entre la radiación incidente y dispersada como $(1 + \cos^2\theta)/2$, pues de este modo su valor varía entre 0 y 1.

Si tenemos en cuenta que en nuestro caso estamos trabajando con fotones y no con ondas electromagnéticas, la fracción de radiación dispersada en una dirección no es más que la fracción de fotones, o visto de otro modo, es la probabilidad de que un fotón cualquiera tome esa dirección.

Con estas aclaraciones presentamos el algoritmo de la elección de la dirección del fotón dispersado.

- Ángulo azimutal ϕ : Como hemos visto la sección eficaz diferencial es independiente de este ángulo. Tomando un número aleatorio entre 0 y 1 rn , $\phi = rn2\pi$.
- Ángulo polar θ : Este ángulo sí que está condicionado por la sección eficaz diferencial. Primero generamos un número aleatorio entre 0 y π , $rn1\pi$, y lo introducimos en la expresión $p = \frac{1+\cos^2\theta}{2}$. A continuación, generamos un número aleatorio entre 0 y 1, $rn2$. Si $rn2 \leq p$, entonces el ángulo con el que va a salir dispersado el fotón es $rn1\pi$; en caso contrario generamos un nuevo número aleatorio $rn1$ y repetimos el proceso.

3.3.2. Dirección en el caso de la dispersión Compton

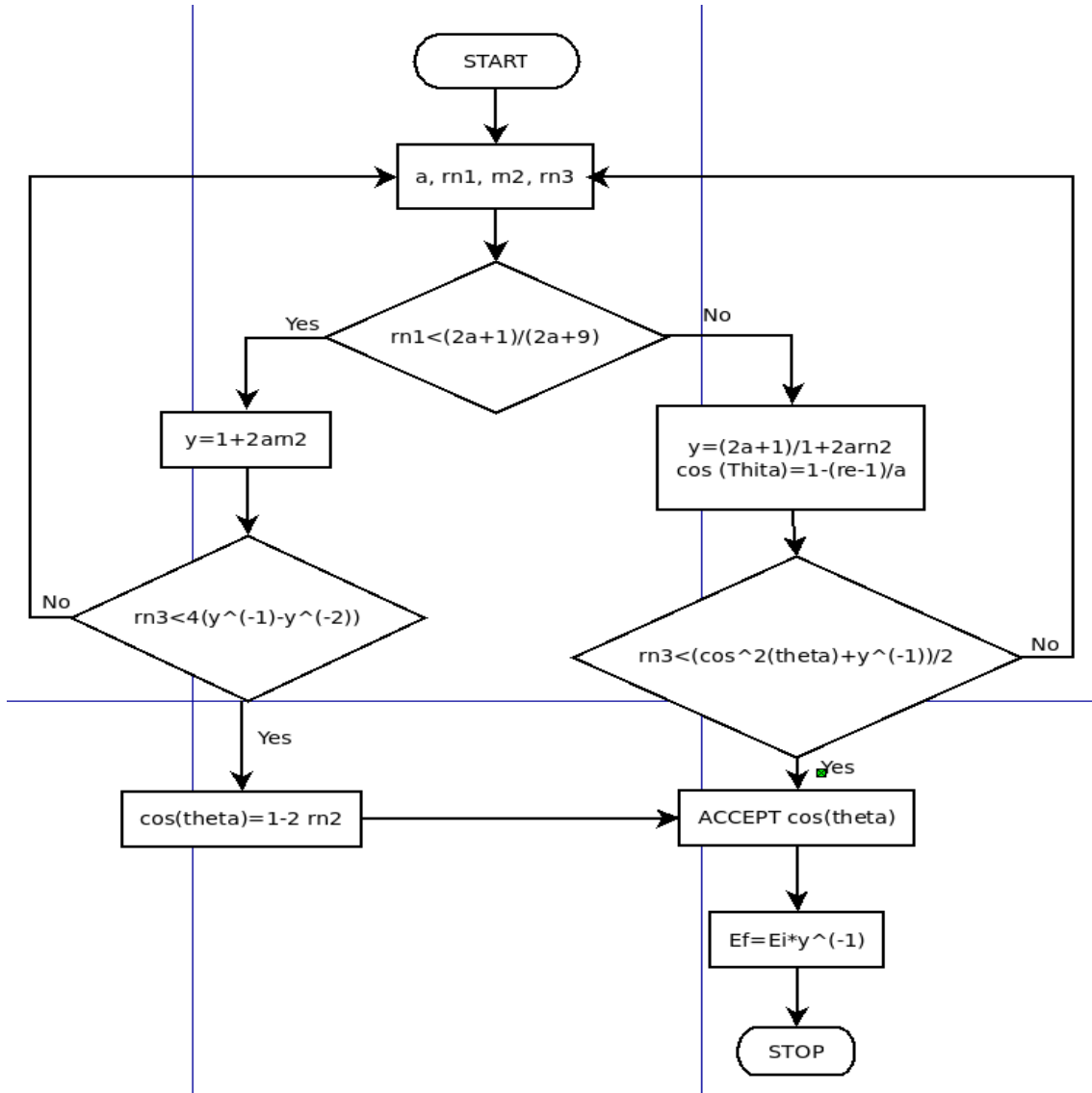
Esta elección es más compleja. Esta vez tenemos que tener en cuenta que la dirección influye en la energía del fotón dispersado y a su vez en la sección eficaz diferencial.

La normalización de esta distribución de probabilidad es más tediosa, además debemos de tener en cuenta como afecta el que no se traten de electrones libres. El algoritmo de Khan resuelve este problema:

- 1 Generamos tres números aleatorios: rn_1 , rn_2 y rn_3 y determinamos $\alpha = \frac{E}{m_0c^2}$.
- 2.a Si $rn_1 < \frac{2\alpha+1}{2\alpha+9}$ entonces $y = \frac{E_i}{E_f} = 1 + 2\alpha rn_2$
 - 2.a.3.a. Si $rn_3 < 4(y^{-1} - y^{-2})$ entonces el ángulo θ que forma el fotón incidente con el dispersado asociado a $\cos\theta = 1 - 2rn_2$
 - 2.a.3.b. Si $rn_3 \geq 4(y^{-1} - y^{-2})$ volvemos al punto 1
- 2.b Si $rn_1 \geq \frac{2\alpha+1}{2\alpha+9}$ entonces $y = \frac{2\alpha+1}{1+2\alpha rn_2}$ y $\cos\theta = 1 - \alpha^{-1}(y - 1)$
 - 2.b.3.a. Si $rn_3 < \frac{1}{2}(\cos^2\theta + y^{-1})$, el ángulo θ es aceptado

2.b.3.b Si $rn_3 \geq \frac{1}{2}(\cos^2\theta + y^{-1})$, volvemos al punto 1.

Esto es un diagrama de flujo que resume el algoritmo:



3.4. Funcionamiento

Una vez ejecutemos el programa nos irán apareciendo por pantalla una serie de peticiones y datos.

- Introduzca el valor del radio R en cm: R ha sido declarada como una variable tipo double, luego podemos introducir números de al menos 15 decimales significativos.

- Introduzca el número de fotones gamma: Se debe introducir un número entero, ha sido declarado como una variable tipo int, por lo tanto su valor debe ser inferior a 2×10^9 . El Valor de este número debe ser superior a 10^6 para que los resultados de la simulación sea lo suficientemente fiables.
- Introduzca el valor del intervalo en que quieres que se lean las energías: Para hacer el recuento de fotones que escapan a cada energía del blindaje el programa necesita agrupar los fotones por intervalos de energía. Está declarado como una variable tipo double; se aconseja (y así se ha hecho en este trabajo) dar un valor de 0.001 MeV.
- Escoja el elemento U, UO₂, Pb, W: Finalmente el programa nos pide escoger el material con el que queremos crear el blindaje. Para seleccionar uno simplemente debemos escribir las mismas siglas, tal y como se presentan, del material deseado.

Capítulo 4

Simulaciones y Resultados

4.1. Blindaje o Shielding

La primera pregunta que nos hacemos es cuál de los materiales atenúa más la radiación que sale del centro de la esfera. Para ello, representamos en una misma gráfica el % de los fotones que escapan del interior de la esfera frente al radio de ésta para cada uno de los materiales por los que nos hemos interesado: plomo, uranio, óxido de uranio y wolframio Fig. 4.1.

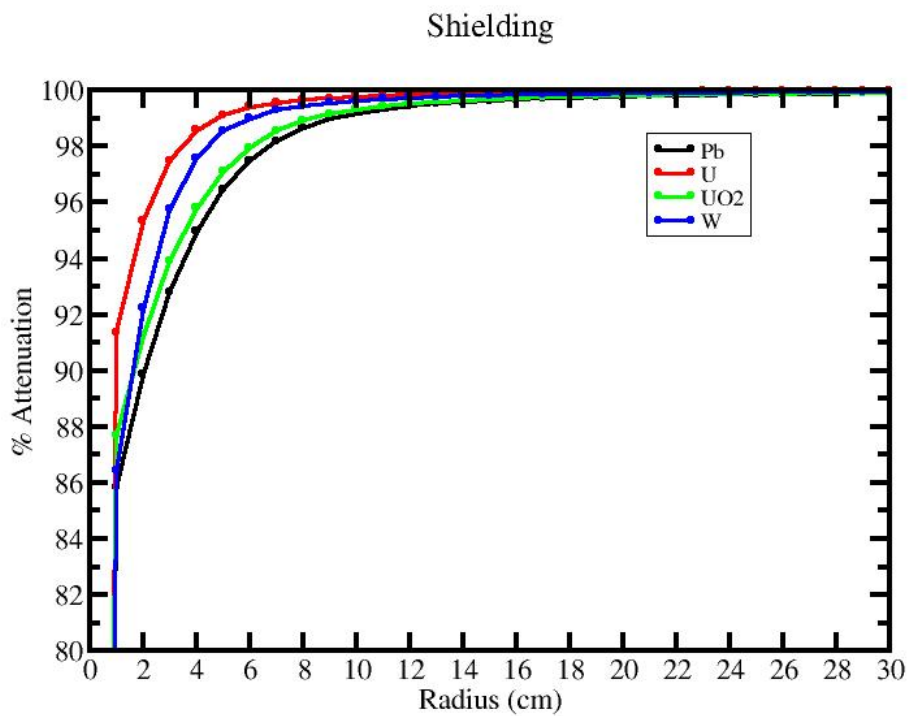


Figura 4.1: Shielding.

En la siguiente tabla presentamos el radio que necesita cada material para lograr una aten-

uación del 99.9%:

Elemento	Radio (cm)
Pb	30
UO ₂	27
W	20
U	15

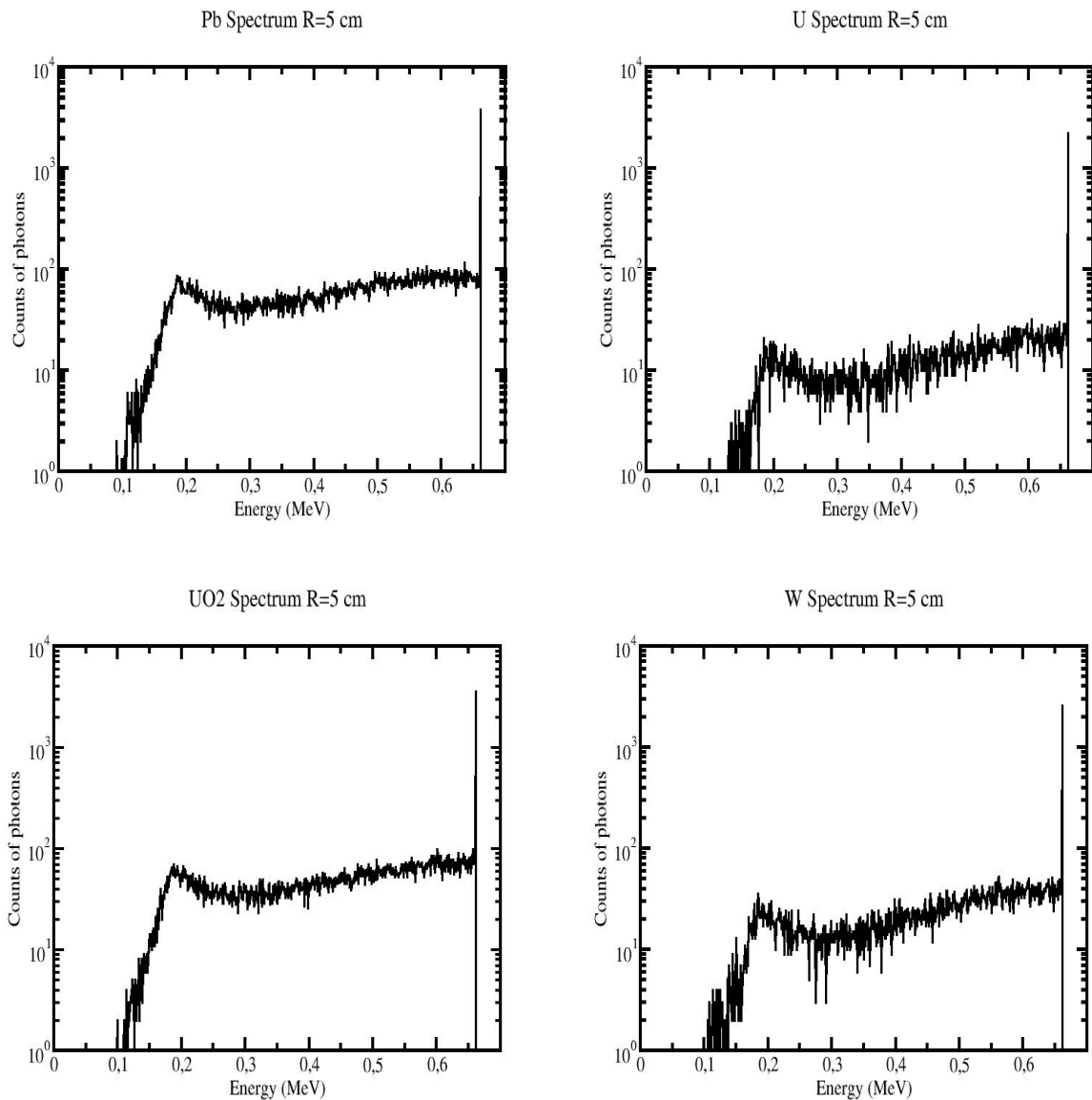
Tabla 4.1: Radios para 99.9% de atenuación

Como podemos observar, el Uranio es el elemento que más fuertemente atenúa la radiación. El Wolframio, estaría en un segundo puesto. Esto es debido a que ambos son materiales muy densos y con altos números atómicos, lo que provoca recorridos libres medios cortos.

Debemos comentar que el Wolframio es muy utilizado en protección radiológica, aunque tiene un elevado coste. Se utiliza en pequeñas cantidades y en zonas estratégicas y/o sensibles de los aparatos y de las instalaciones.

4.2. Características del espectro

Hemos realizado simulaciones de Monte Carlo del espectro de los fotones que salen de una esfera de 5 cm de radio de diferentes materiales: Pb, U, UO₂ y W. Simulamos las historias o evoluciones de un millón de fotones dentro de la esfera. En las siguientes figuras presentamos las gráficas de dichos espectros para los cuatro materiales estudiados:



En primer lugar, podemos observar en estos espectros entorno a 0.184 MeV lo que se conoce como el borde Compton. Tal como explicamos la sección 2.3, al explicar el efecto Compton, la energía con la que sale el fotón dispersado depende del ángulo formado entre el fotón incidente y el fotón dispersado. Explicamos que la energía mínima del fotón dispersado tenía un valor de 0.184 MeV para fotones incidentes con una energía de 0.662 MeV. Esa energía corresponde a un ángulo entre el fotón incidente y el dispersado de π radianes y se trata de una dispersión hacia atrás o "backscattering". Los fotones dispersados con esa energía dan lugar a lo que se conoce como el borde Compton del espectro.

La región del espectro total situada entre el borde Compton y 0.662 MeV es lo que se conoce como espectro Compton. Esta región del espectro total tiene su origen en fotones que han sufrido dispersiones Compton y dispersiones elásticas. Han perdido parte de su energía inicial, 0.662 MeV, en sucesivas dispersiones Compton. Las dispersiones elásticas no han modificado su energía. Finalmente, salen de la esfera con una energía entre 0.184 y 0.662 MeV, dando lugar al espectro Compton que se observa en las gráficas.

En los espectros simulados se observa un pico pronunciado en 0.662 MeV. Es lo que se conoce como fotopico. Los fotones que salen de la esfera con una energía de 0.662 MeV, la energía de los fotones emitidos por la fuente radioactiva, constituyen el fotopico.

Este fotopico tiene varios orígenes físicos. Procede de fotones que han sufrido sólo dispersiones elásticas, las cuales no cambian la energía de 0.662 MeV de los fotones emitidos por la fuente radioactiva. Pero también proceden de fotones de 0.662 MeV que han sufrido dispersiones Compton a cero grados, alternadas con dispersiones elásticas. La energía máxima con la que puede ser dispersado un fotón en un efecto Compton, es la misma que la del fotón incidente y esa energía corresponde a un ángulo de 0 radianes.

Finalmente, tenemos en los espectros algunos fotones con energías inferiores a 0.184 MeV, por debajo del borde Compton. Estos fotones han sufrido sucesivas dispersiones Compton que han disminuido su energía por debajo de 0.184 MeV. Si el fotón incidente tiene una energía de 0.662 MeV, entonces la energía mínima del fotón dispersado en un efecto Compton es 0.184 MeV. Si el fotón incidente tiene una energía inferior a 0.662 MeV, entonces la energía mínima del fotón dispersado en un efecto Compton será inferior a 0.184 MeV. Sucesivas dispersiones Compton pueden dar lugar a fotones dispersados con energías inferiores a 0.184 MeV. Estos fotones son los que se observan en las simulaciones por debajo del borde Compton. Hay que notar que estas historias o evoluciones de los fotones dentro de la esfera son mucho más improbables que otras evoluciones y por tanto, se observan pocos fotones de estas bajas energías en los espectros simulados.

4.3. Espectros

En la tabla 4.2 mostramos los resultado numéricos asociados a las simulaciones con esferas de radio 5cm.

Elemento	% Atenuación	% Fotopico
Pb	96.5	0.3807
UO ₂	97.07	0.3580
W	98.54	0.2586
U	99.12	0.2189

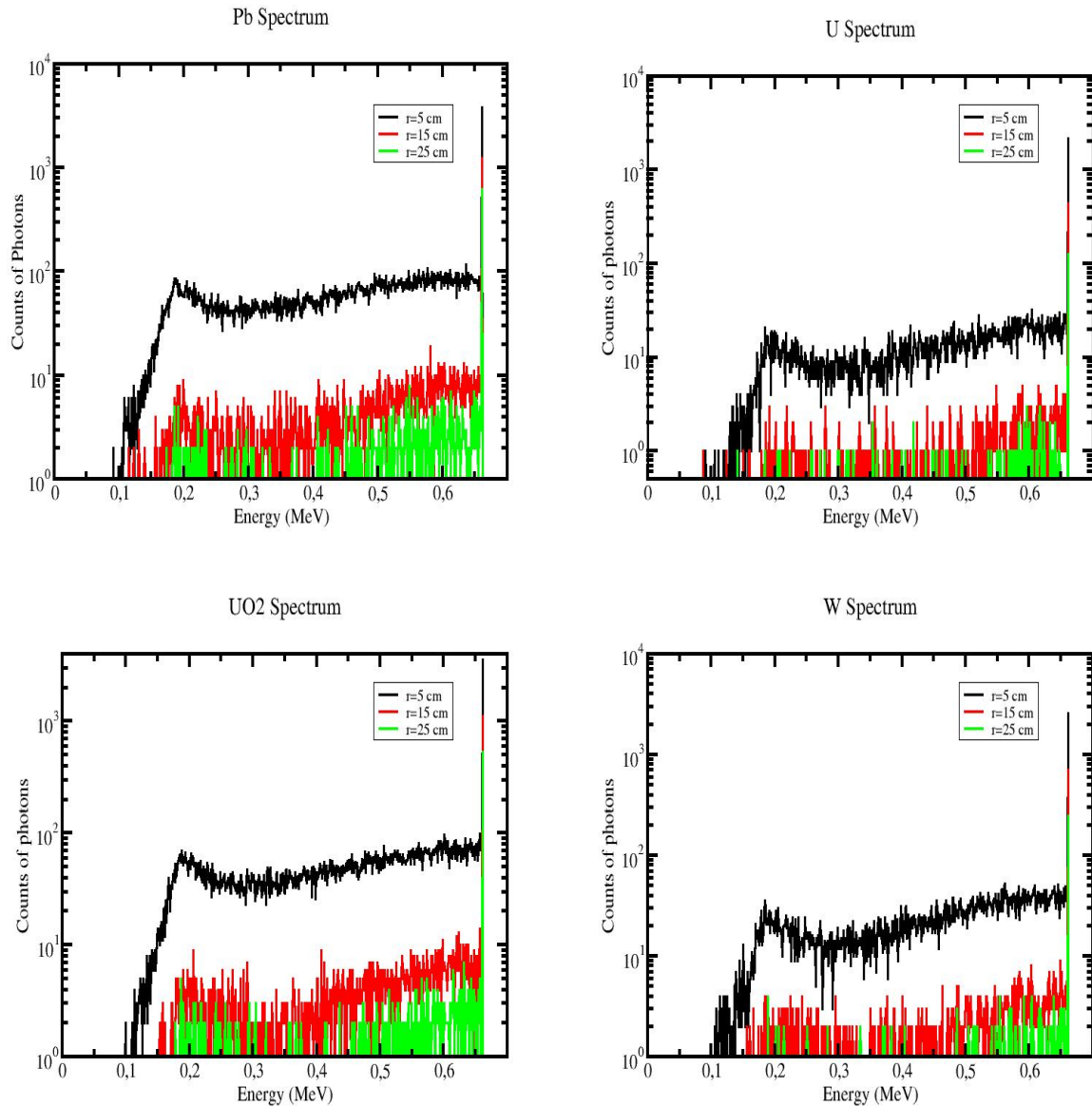
Tabla 4.2: Resultados $R = 5\text{cm}$

donde la tercera columna se identifica con el % del total de fotones que constituyen el fotopico.

El mayor blindaje o atenuación se consigue mediante Uranio, para un mismo radio de la esfera. Sin embargo, el blindaje que se obtiene con los otros materiales no está lejos del que se obtiene con Uranio. Teniendo en cuenta los costes económicos y la mayor o menor facilidad para conseguir estos materiales, la opción más razonable es usar una esfera de plomo.

Tal como se adelantaba en la sección 3.2. y se ha venido repitiendo durante todo este trabajo, a medida que aumenta el grosor del material, mayor es la cantidad de fotones absorbidos.

Presentamos a continuación el espectro de los fotones que consiguen atravesar la esfera de blindaje de un mismo material para radios de 5 cm, 15 cm y 25 cm. Hemos estudiado los cuatro materiales anteriormente citados: Pb, U, UO₂ y W.



Se puede observar que, en un mismo material y para una energía dada, el número de fotones que escapa desciende exponencialmente con el radio de la esfera.

Adjuntamos a continuación dos tablas similares a la tabla 4.2, pero esta vez con los radios de 15 cm y 25 cm:

Como vemos el Uranio es el elemento que más atenúa la radiación gamma.

Elemento	Atenuación %	Fotopico %
Pb	99.6	0.130
UO ₂	99.7	0.116
W	99.8	0.073
U	99.9	0.041

Tabla 4.3: Resultados esfera de R=15 cm

Elemento	Atenuación %	Fotopico %
Pb	99.86	0.060
UO ₂	99.89	0.048
W	99.94	0.028
U	99.98	0.011

Tabla 4.4: Resultados esfera de R=25 cm

4.4. Eficiencia de la Simulación

A medida que aumentamos el número de fotones que interviene en la simulación, también aumenta el tiempo que emplea el ordenador en hacer la simulación. La precisión de nuestra simulación de Monte Carlo viene dada por la desviación estándar de alguna característica de los fotones que conforman la simulación. En nuestro caso específico hemos tomado la longitud de los caminos que recorren cada uno de los fotones, es decir, la suma de todos los Δr de cada fotón.

Si denotamos como $\langle \Delta r \rangle$ la longitud del camino total recorrido promediado a los N fotones, entonces la desviación típica de $\langle \Delta r \rangle$ viene dada por:

$$\sigma_{\langle \Delta r \rangle} = \sqrt{\frac{\langle \Delta r^2 \rangle - \langle \Delta r \rangle^2}{N}} \quad (4.1)$$

Cuanto menor es la desviación típica, mayor es la precisión de la misma, menos dispersos son los resultados con respecto a la probabilidad real. Es la teoría de los números grandes: Si al tirar una moneda obtenemos una cruz, no es seguro que se obtenga una cara en la tirada siguiente, pero sí se espera que tras un gran número de tiradas la cantidad de cruces y caras sea la misma, el 50%. Del mismo modo, cuando simulemos un gran número de fotones, los resultados se aproximarán más a los resultados reales.

El error relativo es:

$$R = \frac{\sigma_{\Delta r}}{\langle \Delta r \rangle} \quad (4.2)$$

Cuando el error relativo se sitúa por debajo del 10% la simulación comienza a ser lo suficientemente aceptable.

Por último definimos la eficiencia como:

$$\varepsilon = \frac{1}{R^2 T} \quad (4.3)$$

siendo T el tiempo de simulación.

El error relativo R tiende al inverso de \sqrt{N} al aumentar el número N de fotones. El tiempo T de la simulación es proporcional a N. Por tanto, la eficiencia de una simulación tiende a hacerse constante a medida que se aumenta el número N de fotones. Cuando se alcanza ese valor aproximadamente constante, los resultados de la simulación son aceptables.

En nuestro caso hemos realizado las simulaciones con 10^6 fotones. Con ese número de fotones obteníamos una desviación típica de 0.005072 y un error relativo del 0.18%. A continuación presentamos dos figuras. En la figura 4.2 representamos la eficiencia que obtenemos en nuestro ordenador frente al logaritmo en base 10 del tiempo empleado en la simulación.

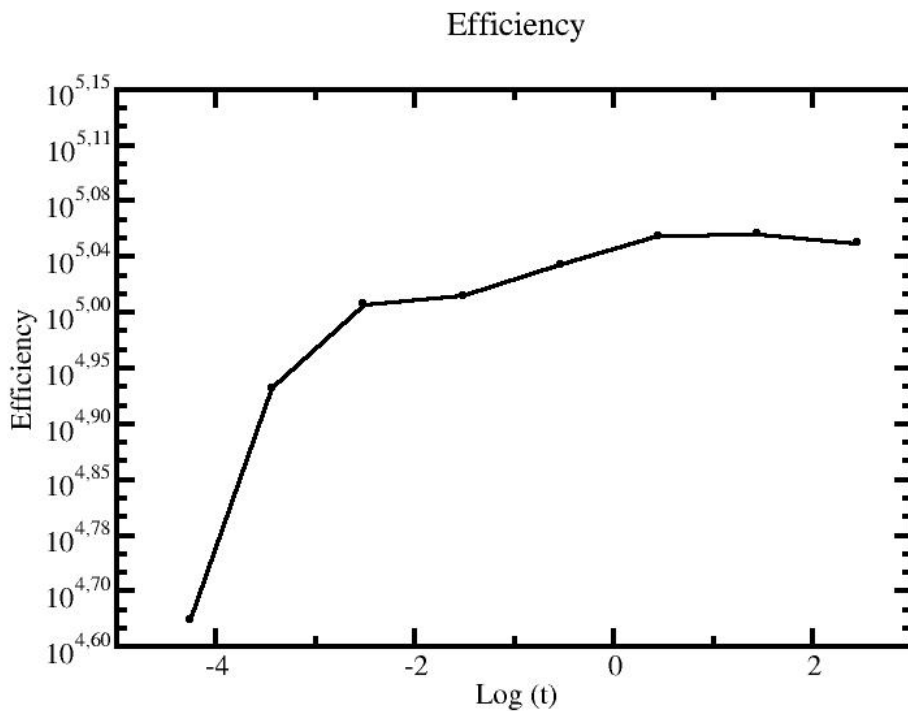


Figura 4.2: Eficiencia

En la figura 4.3 hacemos una comparación para el blindaje obtenido para una esfera de plomo de radio 15 cm para distintos números de fotones simulados:

Como vemos, para 10^5 fotones ya hay un buen acuerdo entre los resultados para el blindaje.

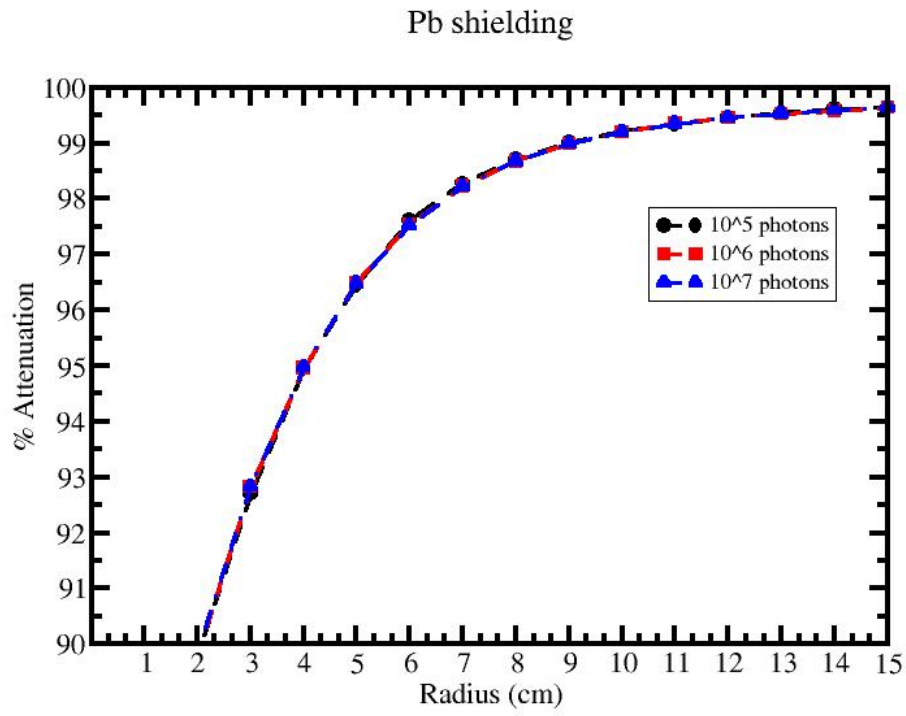


Figura 4.3: Blindaje para Diferente número de fotones

No obstante, si lo comparamos con la eficiencia, es aconsejable irnos a órdenes mayores para llegar a resultados mejores.

Capítulo 5

Conclusiones

- La atenuación de la intensidad disminuye exponencialmente con la distancia al foco. Esto viene ilustrado en la figura 4.1, en la cual claramente tiende asintóticamente al 100 % de atenuación para radios extremadamente grandes.
- En la figura 4.1 también queda patente que de mayor a menor atenuación los materiales simulados lo hacen del siguiente modo: U , W , UO_2 y Pb . La mayor atenuación del uranio es debida a su gran densidad y su alto número atómico. Aunque el W y el U tienen densidades similares, el primero $19,25g/cm^3$ y el segundo $18,95g/cm^3$, debemos hacer notar que no es proporcional a la diferencia entre número atómicos, 74 y 92 respectivamente. Esto hace que la densidad electrónica del primero sea extraordinariamente grande.
- Tal y como hemos visto, los resultados de los espectros se ajustan a la teoría: Un borde Compton en 0.184 MeV, un espectro Compton entre 0.184 y 0.662 MeV y una gran número de fotones que escapan a la energía de 0.662 MeV (0.6617 MeV redondeando) con respecto a los que lo hacen con otras energías inferiores, el llamado fotopico.
- En cuanto a la computación del programa debemos comentar que ha sido con un 10^6 fotones, el número con el que hemos trabajado, que establecían un error relativo del 0.17 %

Bibliografía

- [1]I. M. SÓBOL. *Método De Montecarlo* Editorial MIR 1976. pág:7-13
- [2]KENNETH S. KRANE. *Introductory Nuclear Physics* 1988. 65-70;272-273
- [3]G. NELSON AND D. REILLY. *Gamma-Ray Interactions with Matter*
- [4]<http://farside.ph.utexas.edu/teaching/em/lectures/node96.html>; 8-Junio-2016.
- [5]FRANCISCO JOSÉ YNDURAIN. *Mecánica Cuántica Relativista*. Alianza Editorial 1990. Dispersión de partículas en mecánica cuántica, Teoría de colisiones.
- [6]NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY. XCOM
- [7]JAN PERSLIDEN. *Computer Program in Biomedicine* 1983. pág 115-128
- [8] HERMAN KAHN. *Applications of Monte Carlo* 1956. Research Memorandum to the U.S. Atomic Energy Commission