
Desarrollos y aplicaciones de GEANT4 para radioterapia y microdosimetría en detectores y circuitos integrados



TESIS DOCTORAL

Miguel Antonio Cortés Giraldo

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear

Facultad de Física

Universidad de Sevilla

Abril 2011

Documento maquetado con T_EX^S v.1.0+.

Desarrollos y aplicaciones de
GEANT4 para radioterapia y
microdosimetría en detectores y
circuitos integrados

Memoria que presenta para optar al título de Doctor en Física

Miguel Antonio Cortés Giraldo

Dirigida por los Doctores

María Isabel Gallardo Fuentes

José Manuel Quesada Molina

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear

Facultad de Física

Universidad de Sevilla

Abril 2011

A mis padres y hermana

*El éxito consiste en ir de fracaso en
fracaso sin perder el entusiasmo.*

Winston Churchill
(1874-1965)

Agradecimientos

El desarrollo de este proyecto no hubiese sido posible sin la confianza depositada por mis directores, compañeros y amigos, María Isabel Gallardo Fuentes y José Manuel Quesada Molina, cuyo entusiasmo y total disponibilidad han sido fundamentales para la realización de este trabajo durante estos últimos 4 años, que han dado mucho de sí y en los que los buenos momentos superan ampliamente a los no tan buenos. Además, a ellos les debo la mayor parte del conocimiento adquirido durante este tiempo en muchas facetas, no sólo científicas.

Desde estas líneas también quiero agradecer tanto a Oliver Jäkel como a Harald Paganetti, investigadores responsables durante mis estancias en el *Deutsches Krebsforschungszentrum* (DKFZ – Heidelberg, Alemania) y en el Hospital General de Massachusetts (MGH – Boston, Estados Unidos), respectivamente, su cálida acogida y su buen hacer como anfitriones y colaboradores. Por parte del DKFZ deseo también agradecer, a Niels Bassler, Ilaria Rinaldi, Andrea Mairani y Gonzalo Cabal su colaboración, amistad, y los buenos fines de semana que hemos pasado en Heidelberg. Por otro lado, mi estancia en Boston no hubiese sido la misma sin los cafés y cervezas compartidas con Samuel España y Alejandro Cárabe, éste último además de mi tierra. También deseo agradecer a Raúl y a Debbie, por crear un magnífico clima de convivencia en nuestro piso en Cambridge, y a Ignacio, por nuestras excursiones por la costa este americana. A todos, espero volver a veros en algún momento y que todo os vaya muy bien en vuestras aspiraciones.

También deseo expresar mi gratitud a Rafael Arráns y Héctor Miras, del Servicio de Radiofísica del Hospital Universitario Virgen Macarena (Sevilla, España), por los datos experimentales proporcionados y la resolución de todas las dudas que han ido surgiendo en relación a los aceleradores clínicos simulados en este trabajo. Sin ellos, no hubiese sido posible culminar los capítulos 5 y 6 de esta memoria. En este sentido, agradezco a Alessio Bocci y a José Manuel Espino las medidas y análisis, muchas veces interminables, que han hecho posible completar el capítulo 5. Además, también quiero agradecer a F. Rogelio Palomo, del Departamento de Ingeniería Electrónica (Escuela Técnica Superior de Ingenieros, Universidad de Sevilla), su colaboración proporcionando los datos geométricos del circuito biestable y transmitiendo

a un servidor el conocimiento necesario para que el capítulo 8 viese la luz. Asimismo, a Marcos A. G. Alvarez y a Begoña Fernández, del Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, quiero agradecerles los datos y las aclaraciones necesarias para realizar la simulación su prototipo mini-SeD (capítulo 9).

Deseo agradecer también a mis compañeros y amigos de la facultad los buenos ratos que hemos pasado, especialmente durante los almuerzos y los viernes. Sin olvidar a compañeros de despacho (Alberto, Juan y Mouloud), de departamento (Lay, Juan Pablo, Raúl, Manoli, Lasanta y Galván) y a los demás (Armando, Rafa, Antonio “el Químico”, Eloy, Sergio, Andrés y Juanma), quiero mencionar de manera muy especial a Pedro (también mi compañero de despacho) y a Nagi, por la amistad que me une con ambos desde que estudiábamos la carrera y por todos los cafés y almuerzos tomados juntos durante todos estos años, sin olvidar alguna que otra juerga. También debo mencionar de manera especial a Meme, gran amiga, por animarme cuando lo he necesitado y por todas las ferias a las que me ha invitado.

A Chiqui. . . ella ya sabe por qué.

Por supuesto, desde estas líneas agradezco a mis abuelos, primos, tíos y amigos de toda la vida la comprensión por no haberles podido dedicar el tiempo que se merecen.

Y finalmente, a mis padres, Antonio e Isabel, y a mi hermana, Isabel, especialmente les agradezco su permanente e incondicional apoyo, a mis padres además por inculcarme a estudiar lo que más me gustase y, sobre todo, por aguantarme durante la fase terminal de este trabajo.

Sevilla, 18 de abril de 2011.

Resumen

El objetivo general de este proyecto es abrir nuevas líneas de investigación en el Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad de Sevilla, relacionadas con el estudio del transporte de radiación a través de la materia mediante simulaciones Monte Carlo. En esta memoria, se presentan las aplicaciones desarrolladas con el código GEANT4 en diversos campos de investigación.

Este documento se divide en cuatro partes. En la primera, se realiza una breve introducción sobre el método de Monte Carlo, con especial interés en su aplicación al transporte de radiación e incidiendo en los campos relacionados con este trabajo. Posteriormente, se describen las principales características del código GEANT4. En la segunda, se muestran dos trabajos realizados a nivel de desarrollo del código: una aplicación para leer y escribir archivos de espacios de fase en formato del OIEA y una revisión de los modelos de desexcitación de fragmentos. En la tercera parte, se presentan las aplicaciones GEANT4 que hemos desarrollado con interés en radioterapia, en el estudio de efectos debidos a radiación en aparatos microelectrónicos y en física nuclear experimental. Finalmente, en la cuarta parte se recopilan las conclusiones y las perspectivas futuras de este proyecto.

Abstract

The overall goal of this project is to open new research lines at the Department of Atomic, Molecular and Nuclear Physics of the University of Seville, related to the study of radiation transport through matter by means of Monte Carlo simulations. In this document, we present applications of interest in several research fields, developed with the GEANT4 toolkit.

This document is divided into four parts. In the first one, we present an introduction on the Monte Carlo method, with special interest in its application to the radiation transport in fields related to this project. Subsequently, we describe the main features of the GEANT4 toolkit. In the second one, we show two works realized at code development level: an application to read and write phase-space files in IAEA format and a review of the modifications performed to the de-excitation models of nuclear fragments implemented in the code. In the third one, we show the GEANT4 applications developed in this project with interest in radiotherapy, in the study of radiation effects in microelectronic devices and in experimental nuclear physics. Finally, in the fourth part we extract the conclusions and future perspectives of this project.

Índice

Agradecimientos	IX
Resumen	XI
Abstract	XIII
I Fundamentos y antecedentes	1
1. Introducción	3
1.1. El método de Monte Carlo	3
1.1.1. Definición	3
1.1.2. Historia	3
1.1.3. Propiedades fundamentales	4
1.1.4. Algunos ejemplos de aplicación	5
1.2. El método de Monte Carlo y el transporte de radiación	6
1.2.1. Principales utilidades	6
1.2.2. Radioterapia convencional externa	7
1.2.3. Terapia con hadrones cargados	10
1.2.4. Ingeniería aeroespacial	14
1.2.5. Códigos de simulación de transporte de radiación	15
1.3. Objetivos de este trabajo	18
2. El Código GEANT4	19
2.1. Introducción	19
2.1.1. Breve historia de GEANT4	20
2.1.2. Aplicabilidad de GEANT4	21
2.2. El núcleo de GEANT4	22
2.3. Clases de obligada implementación	25
2.3.1. Definición de la geometría	26
2.3.2. Lista de física	27
2.3.3. Generador de primarias	30

2.4.	Clases de implementación opcional	30
2.4.1.	Acciones de usuario	31
2.4.2.	Volúmenes sensibles y su respuesta	31
2.5.	Conclusiones	32
II	Desarrollos para el código GEANT4	35
3.	Archivos de espacio de fases en formato del OIEA	37
3.1.	Introducción	37
3.2.	Descripción de las clases implementadas	40
3.2.1.	Lectura de espacios de fases	41
3.2.2.	Escritura de espacios de fases	44
3.3.	Resultados	46
3.4.	Conclusiones	51
4.	Desexcitación nuclear en GEANT4	53
4.1.	Introducción	53
4.2.	Revisión de los modelos	55
4.2.1.	Pre-equilibrio	55
4.2.2.	Desexcitación	56
4.3.	Resultados	61
4.4.	Conclusiones	68
III	Aplicaciones	69
5.	Viabilidad de un detector de silicio para verificar tratamien- tos complejos de radioterapia	71
5.1.	Introducción	72
5.2.	Simulación del cabezal del acelerador PRIMUS de Siemens	74
5.2.1.	Modelo geométrico del cabezal	74
5.2.2.	Características de la simulación con GEANT4	78
5.2.3.	Resultados	80
5.3.	Simulación del sistema de detección	87
5.3.1.	Modelado del detector SSSSD	87
5.3.2.	Geometría de los maniqués	88
5.3.3.	Detalles técnicos de las simulaciones con GEANT4	91
5.3.4.	Resultados	92
5.4.	Conclusiones	102
6.	Caracterización de un acelerador Siemens ONCOR	103

6.1.	Introducción	104
6.2.	Simulación del cabezal del acelerador con el colimador MLC-160	105
6.2.1.	Geometría del cabezal y el MLC-160	105
6.2.2.	Características de la simulación GEANT4	111
6.3.	Caracterización del acelerador	111
6.3.1.	Calibración en apertura	112
6.3.2.	Obtención de los parámetros del haz de electrones	113
6.4.	Resultados y discusión	115
6.4.1.	Curvas de dosis relativa	115
6.4.2.	Cálculo de dosis absoluta	123
6.5.	Conclusiones	126
7.	Terapia con protones por dispersión pasiva	129
7.1.	Introducción	130
7.2.	Materiales y métodos	131
7.2.1.	Simulación del cabezal	131
7.2.2.	Técnica de filtrado de protones	135
7.2.3.	Modelo optimizado de las cámaras monitoras	136
7.2.4.	Metodología	137
7.3.	Resultados y discusión	138
7.3.1.	Filtrado de protones	138
7.3.2.	Simplificación de las cámaras monitoras	141
7.3.3.	Perfiles de tiempo	144
7.3.4.	Impacto sobre la fluencia de salida	144
7.4.	Conclusiones	148
8.	Microdosimetría en circuitos integrados	149
8.1.	Introducción	150
8.2.	Modelo del circuito biestable	152
8.3.	Modelo GEANT4 de la fuente de neutrones del CNA	154
8.3.1.	Descripción de la fuente	154
8.3.2.	Simulación con GEANT4	155
8.3.3.	Emisión de partículas por la fuente	158
8.4.	Aplicaciones GEANT4 para microdosimetría	166
8.4.1.	Diseño y lista de física	166
8.4.2.	Aplicación “ff”	167
8.4.3.	Aplicación “track analyser”	167
8.5.	Resultados	169
8.5.1.	Irradiación del biestable con la fuente de neutrones	169
8.5.2.	Irradiación con partículas cargadas pesadas	174
8.6.	Discusión	184

8.7. Conclusiones	186
9. Simulación del prototipo <i>mini-SeD</i>	189
9.1. Introducción	190
9.2. Simulación GEANT4 del detector	191
9.2.1. Estructura y principio de funcionamiento	191
9.2.2. Simulación del montaje experimental	194
9.3. Resultados y discusión	199
9.4. Conclusiones	204
IV Conclusiones / <i>Conclusions</i>	207
10. Conclusiones y perspectivas	209
10.1. Conclusiones	209
10.2. <i>Conclusions</i>	211
10.3. Perspectivas futuras	213
Bibliografía	217
Lista de acrónimos	233
Adenda	239

Parte I

Fundamentos y antecedentes

Capítulo 1

Introducción

1.1. El método de Monte Carlo

1.1.1. Definición

El *método de Monte Carlo* define una técnica matemática desarrollada para resolver problemas mediante el uso de números aleatorios. Aunque se trata de un método específicamente desarrollado para abordar situaciones de índole probabilística, su aplicación también es válida en problemas de naturaleza determinista.

1.1.2. Historia

El origen del método de Monte Carlo suele ser atribuido a los brillantes matemáticos John von Neumann (1903-1957) y Stanislaw Ulam (1909-1984), que participaron en el desarrollo del Proyecto Manhattan, llevado a cabo durante la Segunda Guerra Mundial (1939-1945) en el Laboratorio Nacional de Los Alamos, LANL (*Los Alamos National Laboratory* – Los Alamos, New Mexico, EE.UU.). Sin embargo, el término *Monte Carlo*, como método utilizado en investigación, fue utilizado por primera vez en un artículo publicado en 1949 por Nicholas Metropolis (1915-1999) y Stanislaw Ulam (Metropolis y Ulam, 1949), donde lo presentan como una técnica matemática útil para resolver, mediante una aproximación estadística, complicadas ecuaciones integro-diferenciales que aparecen en diversas ramas de las ciencias naturales. Evidentemente, el nombre se estableció en honor al famoso casino situado en el Principado de Mónaco, a causa de la gran afición de Stanislaw Ulam a los juegos de azar, entre ellos el póquer (Metropolis, 1987).

Sin embargo, la base teórica de este método ya era conocida en aquella época. Desde hacía mucho tiempo se conocía la resolución de problemas mediante *pruebas estadísticas*. De hecho, *la aguja de Buffon* es un problema matemático que data del siglo XVIII que permite calcular el valor del número

π mediante la repetición sucesiva del mismo experimento.^a Asimismo, Enrico Fermi (1901-1954) había utilizado este método para estudiar la difusión de neutrones durante la década de 1930, antes de emigrar a los EE. UU. (Metropolis, 1987).

Sin embargo, en muchas ocasiones la resolución de problemas por el método de Monte Carlo era demasiado lenta porque, como veremos a continuación, por sus características requiere un número muy elevado de repeticiones de un mismo experimento, con condiciones iniciales establecidas al azar, para obtener resultados con una incertidumbre asociada razonable. Esta característica además introduce el problema de *cómo se pueden generar esos números aleatorios*.

En los primeros años del desarrollo del método de Monte Carlo se utilizaban tablas de números aleatorios que habían sido obtenidos previamente al azar. El ejemplo mecánico más sencillo que existe es, precisamente, una ruleta de casino perfectamente equilibrada. Sin embargo, la lentitud inherente del uso de estas tablas propició el desarrollo de algoritmos deterministas con el objetivo de generar series de números cuya distribución superase determinadas pruebas de aleatoriedad (Sóbol, 1983). Estos algoritmos generan dicha serie a partir de unas condiciones iniciales, conocidas como *semilla*. Aunque la semilla se establezca de manera aleatoria, la serie de números producida está totalmente determinada por esa semilla. Por esta razón, a estos algoritmos se les conoce como *generadores de números pseudoaleatorios*. Sin embargo, este determinismo es el que permite que una computadora pueda utilizar estos algoritmos para generar números aleatorios.

En cualquier caso, el método de Monte Carlo no se convirtió en una técnica utilizada con frecuencia hasta la década de 1970, cuando el desarrollo tecnológico permitió que las computadoras fuesen lo suficientemente rápidas para obtener resultados precisos en una escala de tiempo razonable. A partir de ese momento, su uso ha aumentado de manera vertiginosa.

1.1.3. Propiedades fundamentales

En primer lugar, el método de Monte Carlo presenta una estructura muy sencilla. El procedimiento consiste primero en crear un programa que realice una prueba aleatoria que permita asignar un valor determinado para una cierta magnitud de interés. Posteriormente, esta prueba se repite un número N de veces de manera que todas las pruebas sean independientes entre sí; en otras palabras, todas las pruebas deben partir de una semilla diferente. Una vez realizadas, se calcula la magnitud de interés tomando el valor medio de

^aEn internet existe una gran cantidad de sitios web explicando este problema. Un ejemplo es el que se muestra en la página <http://whistleralley.com/buffon/buffon.htm>.

NOTA: El último acceso a todas las páginas web citadas en esta memoria ha sido realizado en abril de 2011.

los resultados.

En segundo lugar, en virtud del *teorema del límite central* puede demostrarse que la incertidumbre asociada al valor estimado es ζ/\sqrt{N} , donde ζ es una constante típica del experimento realizado. Por lo tanto, si queremos disminuir la incertidumbre en un factor 2, debemos multiplicar por 4 el número de repeticiones.

Sobre la primera propiedad, debemos aclarar que la sencillez de la estructura del método de Monte Carlo no implica que la resolución del problema planteado lo sea. De hecho, para un mismo problema se puede plantear más de una estrategia de resolución. Evidentemente, cada una de éstas tendrá un valor de ζ determinado, por lo que una elección correcta de dicha estrategia ayuda a aumentar la exactitud de la estimación realizada para un número determinado de repeticiones.

1.1.4. Algunos ejemplos de aplicación

El uso del método de Monte Carlo es particularmente útil cuando en la resolución de un problema el principal interés sea conocer una estimación lo suficientemente precisa de la solución exacta.

Como ya hemos comentado, el método de Monte Carlo es una herramienta potente para resolver ecuaciones integro-diferenciales cuya resolución analítica es demasiado compleja. Asimismo, por sus características se trata de una técnica a la que se recurre con frecuencia a la hora de analizar sistemas complejos que involucren un gran número de variables, correlacionadas entre sí o no, cuyo valor pueda ser reproducido mediante una distribución de probabilidad.

En numerosas áreas de conocimiento de las ciencias físicas podemos encontrar una gran cantidad de trabajos en los que se utiliza el método de Monte Carlo. De hecho, su origen está ligado al estudio de la propagación de la radiación a través de la materia; concretamente la difusión de neutrones (Metropolis, 1987). Actualmente, en física nuclear y de partículas es un método muy utilizado en las simulaciones del transporte de radiación a través de la materia para estimar la eficiencia de un montaje experimental, la respuesta de un determinado diseño de detector o la radiación que atraviesa un determinado blindaje de seguridad. Además, en meteorología, se utiliza para calcular la probabilidad de que se cumplan unas determinadas condiciones meteorológicas en los días siguientes al momento de la predicción. En astrofísica, un ejemplo lo encontramos en el modelado de la evolución de galaxias. En mecánica estadística se ha utilizado para estudios de estructura molecular, utilizando modelos basados tanto en la mecánica clásica como en la cuántica. También en ciencias de materiales o en química física podemos encontrar diversos ejemplos de aplicación.

Por otro lado, también es una técnica a la que se ha recurrido en otras

ramas del conocimiento. Por ejemplo, en especialidades de la ingeniería como la robótica o la microelectrónica. En biología a veces se usa para estudiar moléculas complejas, como las proteínas. En economía se utiliza para análisis de riesgo de proyectos e inversiones, pruebas de estrés de organismos financieros y para predecir la evolución de las bolsas de valores o del mercado de divisas. Finalmente, podemos encontrar más ejemplos en matemáticas, estadística y en juegos de estrategias programados por ordenador.

Entre todas las aplicaciones citadas, el trabajo que presentamos en esta memoria gira en torno a la simulación del transporte de radiación a través de la materia. Con lo cual, a continuación realizaremos una descripción introductoria de las principales disciplinas en las que hemos centrado nuestro interés.

1.2. El método de Monte Carlo y el transporte de radiación

1.2.1. Principales utilidades

En la simulación del transporte de radiación a través de la materia, la principal ventaja que ofrece el uso del método de Monte Carlo es la reproducción virtual de un experimento determinado. De esta manera, se consigue un doble beneficio. Por un lado, ahorramos tiempo durante la optimización del montaje. Por otro lado, conseguimos abaratar costes relacionados con su diseño y construcción. Asimismo, podemos incluso estudiar la viabilidad de determinados prototipos que aún no han sido construidos.

El análisis mediante simulación de este tipo de problemas permite calcular observables cuya medida experimental es muy complicada, poco fiable o incluso imposible. Por ejemplo, con una simulación es posible clasificar un determinado tipo de radiación en función de ciertos criterios que nos convengan (proceso y lugar donde esa radiación ha sido originada, materiales y volúmenes con los que ha interactuado...). Otra ventaja de las simulaciones Monte Carlo es que, utilizando los modelos apropiados, podemos analizar a escala microscópica la estructura de una traza generada por el paso de una partícula cargada por un material determinado. Por otra parte, este método también permite estimar la deposición de energía en volúmenes tan pequeños en los que es imposible calcular experimentalmente dicha magnitud.

Por todo ello, la simulación Monte Carlo es un recurso que ha sido utilizado en física médica para cálculos de braquiterapia, dosimetría, modelado de haces de radioterapia de cualquier tipo (fotones, electrones, neutrones, protones e iones) e incluso como sistema de planificación de tratamientos (Rogers, 2002). Asimismo, en ingeniería nuclear la protección radiológica es

uno de los principales caballos de batalla; para ello, el diseño de los sistemas de aislamiento de una determinada instalación (e. g. una central nuclear) suele obtenerse tras un exhaustivo análisis de la propagación de radiación. Por otro lado, en experimentos de física nuclear y de partículas se realizan frecuentemente estudios de transporte de radiación en todas las etapas de un montaje experimental, desde la producción de partículas en la fuente de radiación hasta la respuesta esperada de los detectores. Además, en ingeniería aeroespacial se usan para analizar el daño producido por radiación cósmica en los componentes electrónicos de aeronaves y transbordadores espaciales. Asimismo, en radiobiología está comenzando a ser considerada para analizar la deposición de energía a escala tanto micrométrica como nanométrica.

En resumen, la simulación Monte Carlo se ha convertido en una herramienta presente en casi todas las especialidades relacionadas con el transporte de radiación. Entre éstas, a continuación realizaremos una breve introducción de aquéllas relacionadas directamente con los trabajos presentados en esta memoria.

1.2.2. Radioterapia convencional externa

En los últimos años, la incidencia del cáncer en la población mundial se ha visto incrementada. Se ha estimado que durante el año 2008 se diagnosticaron 12,7 millones de casos nuevos y que 7,6 millones de personas fallecieron a causa de esta enfermedad; el 64 % de estas muertes sucedieron en países desarrollados (Jemal et al., 2011). Según la OMS (Organización Mundial de la Salud – Ginebra, Suiza), el cáncer es la primera causa de mortalidad a escala mundial (aproximadamente el 13 %), aunque es la segunda causa en los países en vías de desarrollo (OMS, 2008). Esta diferencia se debe a que la esperanza de vida en los países desarrollados es mayor y la probabilidad de sufrir esta enfermedad aumenta con la edad. En España, el cáncer fue la causa del 26 % de los fallecimientos ocurridos en 2007 y es la segunda causa de mortalidad tras las enfermedades cardiovasculares (Regidor et al., 2009).

Para esta patología no existe una terapia común, ya que el término *cáncer* agrupa una gran variedad de enfermedades caracterizadas por un crecimiento incontrolado de un grupo de células.

A pesar de que el estudio de los oncogenes está creciendo de manera esperanzadora en los últimos años, aún es imposible utilizar terapia génica para curar el cáncer a escala molecular. Hoy en día los procedimientos empleados para el tratamiento del cáncer son, en general, macroscópicos: la *cirugía*, la *quimioterapia* y la *radioterapia*.

La cirugía es la forma más efectiva para eliminar el tejido maligno, aunque no siempre se puede recurrir a ella. En cualquier caso, los tres procedimientos suelen combinarse para incrementar la probabilidad de eliminar el tumor. En consecuencia, se estima que más de la mitad de los pacientes requiere ser

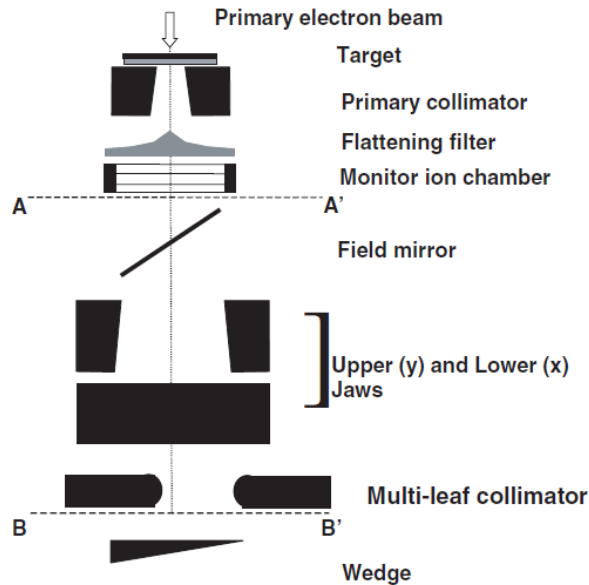


Figura 1.1: Esquema de los componentes presentes en el cabezal de un acelerador lineal de electrones para radioterapia. (Verhaegen y Seuntjens, 2003)

tratado mediante radioterapia en algún momento del tratamiento.

La radioterapia es una técnica utilizada desde 1953 (Bewley, 1985) y consiste en la aplicación de radiaciones ionizantes sobre el tejido tumoral. Su fundamento se basa en la capacidad de este tipo de radiación de dañar puntos básicos de la célula, como sus moléculas de ADN (Ácido Desoxirribonucleico), mediante la deposición local de su energía (descrita por la magnitud denominada *dosis*). La aplicación del tratamiento se realiza de dos maneras diferentes: mediante haz externo (*teleterapia*) y mediante haz interno (*braquiterapia*). En lo que sigue nos centraremos en la primera.

En radioterapia de haz externo, la estrategia usada habitualmente consiste en dirigir varios haces de fotones o electrones desde distintas direcciones al centro del blanco para depositar una elevada cantidad de radiación en el tumor y minimizar la dosis en los tejidos sanos. Originalmente se utilizaban fuentes de ^{60}Co para administrar la radiación. En la actualidad, ésta es producida de manera estándar mediante un acelerador lineal de electrones.

Generalmente, estos aceleradores están equipados con elementos que permiten producir haces con forma irregular tanto de electrones como de fotones. En cada caso, las características del campo de radiación se definen a partir de la configuración del *cabezal* de la máquina. El cabezal es una estructura colocada al final del acelerador que, generalmente, está compuesta por los componentes mostrados en la Fig. 1.1. En este esquema se observan dos partes diferenciadas. La primera parte (constituida por el

blanco, colimador primario, filtro aplanador y cámara monitora) se encarga de producir la radiación necesaria para el tratamiento. El esquema mostrado en esta figura corresponde al modo de tratamiento con fotones, los cuales se producen por radiación de frenado debido a la incidencia de los electrones en el blanco. Para un tratamiento con electrones, el blanco suele ser una lámina difusora que dispersa el haz a la entrada y no se utilizan filtros aplanadores. La configuración de la segunda parte (*mordazas, y colimador multiláminas*) depende del tratamiento particular y su principal cometido es definir las dimensiones y forma del campo de radiación. A veces, como en este esquema, se colocan *cuñas* para definir un gradiente de intensidad en el campo de radiación.

Gracias al avance tecnológico de los últimos años, en la actualidad existen varias técnicas avanzadas de radioterapia, como son las técnicas estereotácticas, la radioterapia conformada en tres dimensiones, 3DCRT (*3-Dimensional Conformal Radiotherapy*) la radioterapia de intensidad modulada, IMRT (*Intensity-Modulated Radiation Therapy*), la radioterapia guiada por imagen, IGRT (*Image-Guided Radiation Therapy*), etc. Todas ellas requieren una planificación previa al tratamiento para ser aplicadas adecuadamente, además de sistemas que verifiquen que la administración del tratamiento se realiza correctamente.

Los hospitales disponen de sistemas de planificación, TPS (*Treatment Planning System*), que permiten calcular la dosis depositada en cada tejido del paciente a partir de una imagen obtenida mediante TAC (Tomografía Axial Computarizada). Debido a la rapidez de cálculo que deben ofrecer, los TPS calculan la dosis mediante modelos analíticos aproximados de transporte de radiación, principalmente basados en la propagación de *haces pinceles* (*pencil beam* en inglés). Por esta razón, en determinados tratamientos en los que existen elevados gradientes de densidad en el volumen irradiado, las predicciones del TPS pierden fiabilidad.

Por otro lado, se considera que la simulación Monte Carlo (utilizando códigos debidamente validados) es el procedimiento más preciso para calcular la dosis depositada en geometría irregulares y heterogéneas (Andreo, 1991; Ma y Jiang, 1999; Verhaegen y Seuntjens, 2003; Rogers, 2006; Chetty et al., 2007), pero su principal desventaja es que el tiempo de CPU (*Central Processing Unit*) requerido es, actualmente, demasiado largo para su aplicación diaria en el hospital. Por esta razón, existen códigos de simulación especialmente diseñados y optimizados para simular el transporte de radiación tanto a través del cabezal como del paciente, cuya geometría se modela mediante *voxels* construidos a partir de la imagen tomada por TAC. En la sección 1.2.5 se citan algunos.

En cualquier caso, el informe número 24 del ICRU (*International Commission on Radiation Units and Measurements*) recomienda que la dosis debe ser aplicada con una incertidumbre máxima del 5% (ICRU, 1976).

Teniendo en cuenta las posibles fuentes de error durante el tratamiento, esta limitación implica que el sistema de planificación que se utilice debe tener una incertidumbre asociada menor del 2%.

1.2.3. Terapia con hadrones cargados

El uso de haces de protones e iones ligeros con fines terapéuticos fue propuesto por primera vez por Robert Wilson en 1946 durante sus trabajos en el Laboratorio del Ciclotrón de Harvard (Cambridge, Massachusetts, EE. UU.) (Wilson, 1946). Su propuesta se justificaba por la forma en que las partículas cargadas depositan su energía, en comparación con los fotones. Además, los haces de protones e iones ligeros ofrecen las mayores ventajas para combatir los tumores más radio-resistentes, debido a la densa columna de ionización que producen a su paso, la cual origina, con gran probabilidad, muchas dobles rupturas de las cadenas de ADN del núcleo celular.

Aunque el primer tratamiento con protones se realizó en el LBNL (*Lawrence Berkeley National Laboratory* – Berkeley, California, EE.UU.) en 1954 (DeLaney y Kooy, 2008), el primer centro de terapia con protones ligado a un hospital no comenzó a operar hasta 1990, cuando se inauguró el de Loma Linda (California, EE. UU.). En el caso de iones de carbono, fue en HIMAC (*Heavy Ion Medical ACcelerator* – Chiba, Japón) donde, en 1994, se realizaron los primeros tratamientos médicos (Bethge et al., 2004). Hasta el año 2009, más de 78 000 pacientes han sido tratados mediante esta técnica, existiendo en todo el mundo 28 centros en activo para terapia con protones y 3 para terapia con iones de carbono. Además, actualmente hay más de 20 instalaciones en fase de proyecto o construcción;^b por lo tanto, la terapia con hadrones cargados es una técnica cuyo impacto aumentará notablemente en los próximos años.

La Fig. 1.2 muestra una gráfica comparativa en la que se observan dos características a favor del uso de protones e iones pesados. La primera es el hecho de que su máximo de deposición de energía se encuentra al final de su recorrido, en la zona conocida como *pico de Bragg*. La segunda ventaja se argumenta con que la energía depositada tras el pico de Bragg cae a cero de manera abrupta; por lo tanto, la dosis depositada más allá del tumor (*dosis de salida*) es mucho menor que en el caso de fotones. En la figura también se muestra una distribución de dosis típica de un tratamiento con protones, generalmente denominado *pico de Bragg ensanchado* o, por sus siglas en inglés, SOBP (*Spread-Out Bragg Peak*). El SOBP se obtiene mediante una superposición adecuada de haces de energías diferentes de manera que exista una zona de *plateau* para un determinado intervalo de profundidad, en el que la dosis depositada no presente variaciones mayores al 2% con

^bEstadísticas extraídas de la página web del PTCOG (*Particle Therapy Co-Operative Group*): <http://ptcog.web.psi.ch/>.

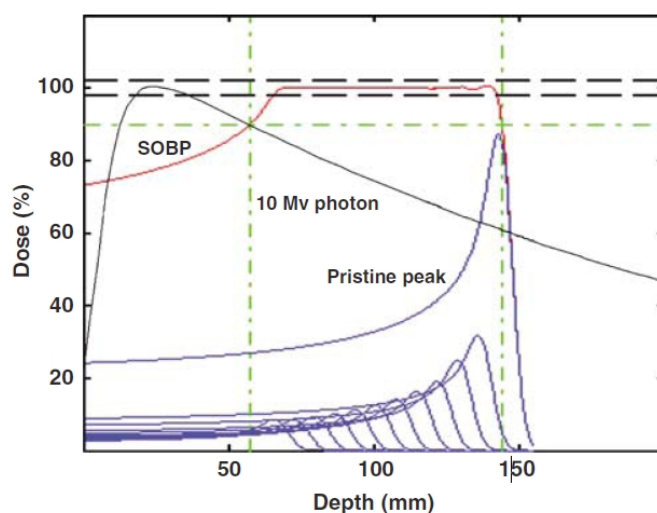


Figura 1.2: Distribución de dosis en profundidad de un haz de fotones correspondiente a una energía nominal del haz de 10 MV (negro), de una superposición de haces de protones conformando un SOBP (rojo) y de las distribuciones de dosis de dichos haces (azul). La línea negra discontinua indica el intervalo de variación clínicamente aceptable ($\pm 2\%$). Las líneas discontinuas punteadas indican el nivel de 90 % de la dosis y el intervalo en profundidad que caracteriza este SOBP, definido por su alcance y su anchura de modulación. (Levin et al., 2005)

respecto a la dosis depositada en el centro de ese *plateau*. Dicha tolerancia se muestra también en la figura. El SOBP se caracteriza espacialmente por dos parámetros: su *alcance* y su *anchura de modulación*. El alcance se define como la profundidad donde se encuentra el nivel del 90 % de dosis en la zona distal, mientras que la anchura de modulación corresponde a la diferencia en profundidad entre los niveles 90 % distal y proximal.

Actualmente, las dos técnicas de terapia más comunes son: BBM (*Broad Beam Modulation*) y PBS (*Pencil-Beam Scanning*). El objetivo de ambas es conseguir una distribución uniforme en la zona de tratamiento, aunque sus estrategias son muy diferentes.

BBM utiliza métodos de dispersión pasivos como los mostrados en la Fig. 1.3. Combina sistemas de dispersión en los que predominan elementos de alto número atómico, Z , con moduladores en cuyos materiales predominan elementos de bajo Z . Con los primeros se consigue ensanchar el haz que entra en el cabezal, mientras que el objetivo de los segundos es modificar la energía de los protones para modular su alcance dentro del paciente.

PBS es una técnica más sofisticada en la que un haz pincel es desviado mediante campos magnéticos, tal y como se muestra en el esquema de la Fig. 1.4. Combinando distintas energías e intensidades del campo, se realiza un barrido activo sobre el volumen a irradiar.

Hasta ahora, la técnica más utilizada ha sido BBM debido a que es

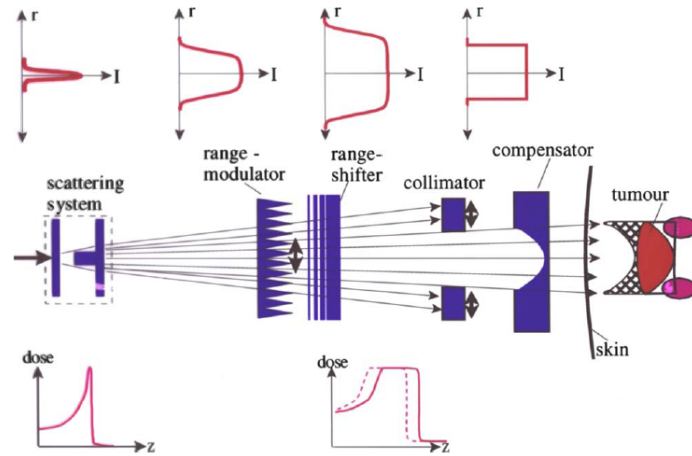


Figura 1.3: Esquema de un cabezal diseñado para terapia por BBM. El haz inicial es ensanchado por un sistema dispersor y posteriormente su energía es ajustada mediante sistemas de modulación de alcance. Finalmente, con un compensador se adapta la distribución de energía del haz para irradiar completamente el volumen del tumor. Aunque es inevitable irradiar el tejido sano situado delante del tumor, la dosis depositada tras la parte distal del tumor es prácticamente nula. (Schardt et al., 2010)

más sencilla desde el punto de vista tecnológico. Sin embargo, la técnica de PBS ofrece ventajas terapéuticas con respecto a BBM, eliminando dos de los inconvenientes de ésta última. Por un lado, con BBM la anchura de modulación del campo es constante y cubre la máxima extensión del volumen a irradiar en profundidad, provocando que parte del tejido sano situado delante del tumor reciba una dosis del 100 %. Por otro lado, la interacción del haz con elementos dispesores genera radiación secundaria de neutrones sobre el paciente (DeLaney y Kooy, 2008). En el caso de PBS, además de minimizar estos dos inconvenientes, permite el desarrollo de técnicas de terapia con protones por intensidad modulada, IMPT (*Intensity-Modulated Proton Therapy*), en analogía a la IMRT (Lomax et al., 2001).

En cuanto al cálculo de la dosis depositada en los diferentes tejidos del paciente, los TPS deben incorporar algoritmos más complejos que aquéllos que se utilizan en radioterapia convencional por un doble motivo. Por un lado, existen más mecanismos de interacción que influyen sobre la propagación del haz. Además de las interacciones electromagnéticas responsables del frenado de las partículas del haz, también hay que tener en cuenta las colisiones hadrónicas inelásticas con los núcleos de los átomos que constituyen los tejidos (Matsufuji et al., 2005; Böhlen et al., 2010). Estas interacciones inelásticas producen fragmentos nucleares que pueden depositar su energía lejos del camino del haz al salir dispersados. Por otro lado, la eficiencia biológica relativa, RBE (*Relative Biological Effectiveness*), es un factor que debemos tener en cuenta. La RBE depende de la transferencia lineal de

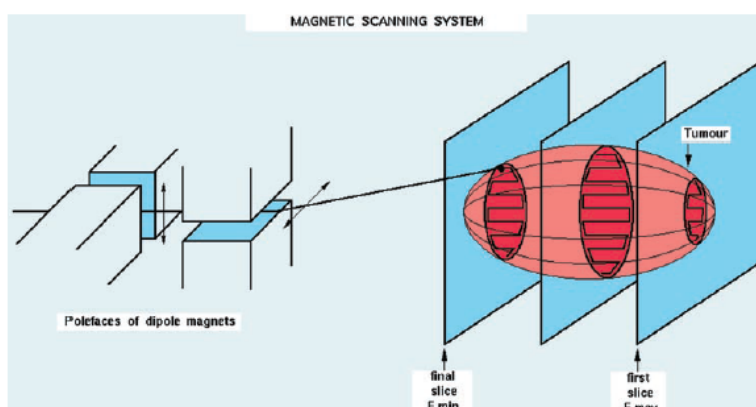


Figura 1.4: Esquema conceptual de la técnica PBS. Dos campos magnéticos deflexionan el haz antes de incidir sobre el tumor. La irradiación se realiza sobre intervalos definidos en profundidad comenzando por la parte distal. A cada profundidad le corresponde una energía nominal de haz definida. (Krämer et al., 2000)

energía, LET (*Linear Energy Transfer*), que a su vez depende de la energía de la partícula que atraviesa el tejido. Por lo tanto, el valor del RBE cerca de la zona del pico de Bragg es diferente a su valor en zonas alejadas de él (DeLaney y Kooy, 2008; Jäkel, 2010).

Debido a esta complejidad, actualmente se considera que las simulaciones Monte Carlo son las más fiables para simular la dosis depositada en un paciente, debido a que pueden reproducir en detalle la interacción de cada partícula con la materia (Schaffner et al., 1999). Sin embargo, esto último provoca que las técnicas basadas en este método sean demasiado lentas para su aplicación clínica diaria. Por esta razón, los TPS utilizados actualmente en los hospitales se basan en algoritmos de haces pinceles (Petti, 1992; Hong et al., 1996; Deasy, 1998; Schaffner et al., 1999; Soukup et al., 2005; Kanematsu et al., 2006), pero éstos no pueden proporcionar resultados fiables en situaciones en las que existe un elevado gradiente de densidad en las direcciones transversales a la propagación del haz. Para paliar este problema, se ha recurrido a separar en partes el haz (Kanematsu et al., 2009). En otros casos se han desarrollado simplificaciones de las técnicas Monte Carlo desde diversas perspectivas (Kohno et al., 2003; Fippel y Soukup, 2004; Li et al., 2005; Yepes et al., 2009; Hotta et al., 2010).

En cualquier caso, las simulaciones Monte Carlo constituyen una herramienta potente para verificar la distribución de dosis calculada por el TPS en tratamientos especialmente complicados para sus prestaciones (Newhauser et al., 2005; Koch et al., 2008; Paganetti et al., 2008). Sin embargo, conscientes del continuo crecimiento en tecnología computacional, en el MGH (*Massachusetts General Hospital* – Boston, Massachusetts, EE.UU.) ya se ha desarrollado un TPS basado en Monte Carlo (Paganetti et al., 2008).

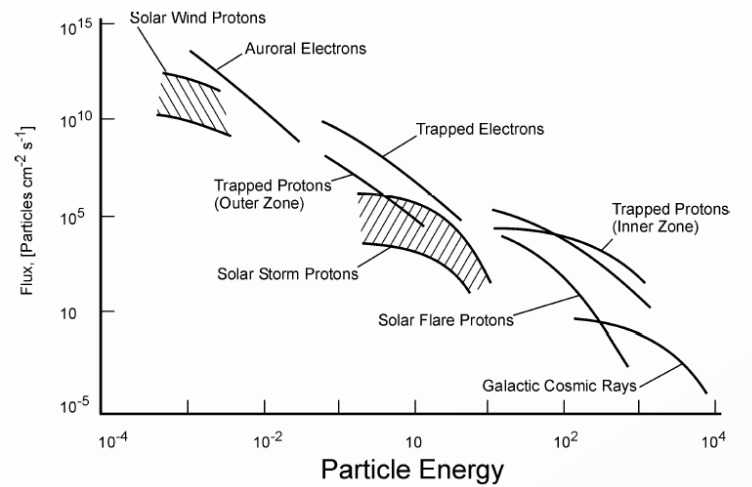


Figura 1.5: Espectro de energía (expresada en MeV) de las diferentes contribuciones a la radiación (Testard et al., 2002)

1.2.4. Ingeniería aeroespacial

El entorno de radiación existente lejos de la superficie de la Tierra es mucho mayor que el que recibimos sobre la superficie. En función de la distancia a la Tierra, tanto la carga como el tipo de radiación varían. En la Fig. 1.5 se muestran las distintas contribuciones a la radiación en el entorno de la Tierra.

La radiación que recibimos sobre la superficie terrestre se debe principalmente a rayos X, rayos γ y a emisores α como el radón. Estas emisiones constituyen el nivel de radiación natural terrestre, cuyo valor medio en Europa es de 1 mSv/año. Sin embargo, lejos de la superficie terrestre la carga de radiación es mucho mayor. Dentro de la región protegida por el escudo magnético de la Tierra (se extiende hasta unos 70 000 km de distancia desde el centro de la Tierra), la radiación predominante se debe a protones y electrones atrapados en los cinturones de Van Allen. Fuera de este escudo magnético, la mayor contribución viene dada por la radiación cósmica de la galaxia, compuesta por iones a altas energía con masa atómica menor o igual que la del hierro, cuya componente más importante viene dada por protones e iones de helio. Además, la radiación en el espacio alcanza su valor máximo durante eventos de erupciones solares, cuya dosis puede alcanzar niveles letales (Testard et al., 2002).

Por esta razón, durante la planificación una misión espacial es fundamental la protección radiológica de la tripulación. Sin embargo, el diseño del blindaje no es una tarea sencilla. En el caso de electrones, sus colisiones generan rayos X. En el caso de iones, las colisiones inelásticas producen fragmentos secundarios. En ambos casos, la radiación recibida es nociva para

la tripulación (Schimmerling, 1992; Obe et al., 1997; Cucinotta et al., 2001; Wilson et al., 2001). Así pues, tanto la NASA (*National Aeronautics and Space Administration* – Washington DC, EE. UU.) como la ESA (*European Space Agency* – Noordwijk, Países Bajos) han financiado proyectos cuyo objetivo es cuantificar la dosis causada por esta radiación, utilizando en ambos casos simulaciones Monte Carlo que previamente han sido validadas.^c

Por otra parte, los circuitos de microelectrónica son sensibles al paso de partículas ionizantes debido a la escala nanométrica de sus componentes (Bräunig y Wulf, 1994; Tang, 1996). Por ejemplo, la traza de ionización generada por el paso de una partícula cargada crea distribuciones de carga parásita y además puede provocar daños por desplazamiento en la red cristalina (Summers et al., 1995). Ambos mecanismos pueden producir efectos en la microelectrónica, denominados *efectos de evento singular* o SEE (*Single Event Effect*), que provocan respuestas inesperadas del circuito. Además, se sabe que los óxidos aislantes de un circuito microelectrónico (compuestos de SiO₂) pueden acumular carga generada por ionización (Summers et al., 1993) debido a la incidencia de partículas cargadas, fotones y, en menor medida, neutrones, mediante un mecanismo que se conoce como TID (*Total Ionization Dose*). En el caso de los neutrones, éstos también pierden su energía transfiriendo su momento lineal a átomos de la red cristalina de silicio (Summers et al., 1995), constituyendo un fenómeno de NIEL (*Non-Ionizing Energy Loss*).

Con el desarrollo de teorías de microdosimetría aplicada a aplicaciones microelectrónicas (Xapsos et al., 2001), se ha podido estudiar los efectos de la radiación en circuitos microelectrónicos para tratar de mitigar sus efectos (Hughes y Benedetto, 2003). Sin embargo, estos efectos permiten el uso de esta tecnología como detectores de microdosimetría con diversas aplicaciones (Cornelius y Rosenfeld, 2004; Wroe et al., 2006, 2007; Seon et al., 2010), cuyo diseño es además respaldado con simulaciones Monte Carlo.

1.2.5. Códigos de simulación de transporte de radiación

A continuación, citamos los códigos Monte Carlo más populares en relación con el transporte de radiación, presentando muy brevemente sus principales características.

ETRAN (*Electron TRANsport*): Es el primer código Monte Carlo creado para simular el transporte de electrones y fotones a través de geometrías sencillas (Seltzer, 1991). Su rango de validez está comprendido entre 1 keV y 100 GeV.

^cEn el caso de la NASA podemos visitar la página web del programa de radiación espacial: <http://spaceradiation.usra.edu>.

En el caso de la ESA podemos encontrar varios ejemplos en el sitio <http://space-env.esa.int/ProjectSupport/>.

EGS (*Electron Gamma Shower*): La versión actual se denomina EGSnrc (Kawrakow, 2000; Kawrakow et al., 2009). Simula el transporte de electrones, fotones y positrones considerando sólo interacciones electromagnéticas. Su rango de validez está comprendido entre 1 keV y 10 GeV. La geometría se puede construir mediante un código usuario denominado BEAMnrc (Rogers et al., 1995, 2009) que incorpora módulos geométricos especialmente diseñados para problemas de interés en física médica. Además, al incorporar técnicas de reducción de varianza y haber sido extensamente validado, es un código Monte Carlo muy popular en física médica. No es código abierto y puede requerir que el usuario desarrolle parte del código en lenguaje MORTRAN para definir geometrías complejas.

FLUKA (*FLUktuierende KAskade*): La versión actual es la 2011.2.1. (Fassò et al., 2005; Battistoni et al., 2007). Es un código de propósito general que reproduce la propagación en la materia de hasta 60 partículas diferentes, incluyendo electrones y fotones (desde 1 keV hasta 1000 TeV), hadrones (hasta 20 TeV), neutrones (incluyendo térmicos) e iones pesados. Permite reproducir geometrías complejas. Su código fuente, desarrollado en FORTRAN77, no es accesible. Asimismo, es necesario registrarse para su uso.

GEANT4 (*Geometry AND Tracking*): Su versión actual es la 9.4 y es un código capaz de simular el transporte de todo tipo de partículas en un rango de validez en energía comprendido entre 250 eV y unos 10 TeV (Agostinelli et al., 2003; Allison et al., 2006). Es especialmente potente en la reproducción de geometrías complejas y puede ser utilizado en aplicaciones de interés tanto en física de altas energías como en física médica. Requiere que el usuario desarrolle parte del código en lenguaje C++. A diferencia de la mayoría de los códigos, su código fuente es totalmente público y no es necesario registrarse para utilizarlo.

MARS: Su versión actual se denomina MARS15. Es un código utilizado en física de altas energías para simular cascadas hadrónicas y electromagnéticas de muones, iones pesados y neutrones a energías comprendidas entre 0.1 MeV y 100 TeV (Mokhov, 2010).

MCNP (*Monte Carlo N-Particle*): Su versión actual es MCNP5. Es un código de propósito general para el transporte de neutrones, fotones y electrones (Brown et al., 2002). Por su validación, es considerado el código más fiable para el transporte de neutrones. Incorpora técnicas de reducción de varianza. Su código fuente no es accesible y es necesario un registro de pago para utilizarlo.

MCNPX (*Monte Carlo N-Particle eXtended*): La versión estable actual es la 2.6.0 (Mashnik et al., 2008), que extiende la aplicación del

código MCNP4C3 a casi todo tipo de partículas en un amplio rango de energías. El código fuente, desarrollado en FORTRAN90, sólo está disponible de manera restringida mediante un acuerdo previo con los desarrolladores.

PENELOPE (*PENetration and Energy LOss of Positrons and Electrons*): Es un código abierto de propósito general para el transporte de electrones, fotones y positrones, sin considerar reacciones foto-nucleares, en un rango de energías comprendido entre 100 eV y 1 GeV; por esta razón, su principal campo de aplicación es la física médica. La geometría se construye a partir de superficies cuádricas e incorpora técnicas de reducción de varianza. Su versión actual es PENELOPE2008.1 (Salvat et al., 2009).

PHITS (*Particle and Heavy Ion Transport code System*): Su versión actual es la 2.24 y está desarrollado para simular el transporte de hadrones en la materia hasta energías del orden de 100 GeV/u en el caso de iones pesados (Niita et al., 2010). Es un código desarrollado en FORTRAN77 y para usarlo es necesario registrarse en su lista de distribución.

PTRAN (*Proton TRANsport*): Es un código limitado al transporte de protones en el rango de energías terapéuticas (entre 50 MeV y 250 MeV) en geometrías muy sencillas. Fue un código muy popular durante la década de 1990 para el diseño de sistemas de planificación para terapia con protones.

SHIELD-HIT: Este código es una extensión del código SHIELD, que simula el transporte de hadrones y núcleos atómicos hasta una energía de 30 GeV (Dementyev y Sobolevsky, 1999). En esta extensión incorpora modelos para simular con precisión las interacciones a energías típicas de terapia con hadrones cargados. Está desarrollado en FORTRAN77 y se usa previo acuerdo contractual con los desarrolladores.

SRIM (*The Stopping and Range of Ions in Matter*): Es un programa especializado en calcular el transporte de iones (hasta 2 GeV/u) a través de una geometría definida por capas. No requiere de registro para su uso,^d pero su código fuente no es públicamente accesible.

Entre estos códigos, hemos optado por utilizar GEANT4, motivados por diversas razones. En primer lugar, uno de los objetivos de este trabajo, que se exponen en la sección 1.3, es iniciar líneas de investigación en nuestro departamento relacionadas con el estudio del transporte de radiación en la materia. Para ello, hemos considerado fundamental poder tomar parte activa

^dSRIM está disponible en: <http://www.srim.org>.

en el desarrollo del código, por lo que hemos optado por elegir entre aquéllos que son de libre acceso. Entre los códigos que cumplen esta condición, optamos por GEANT4 gracias a la extensa aplicabilidad que ofrece en diversos campos, tal y como se muestra en el capítulo 2.

1.3. Objetivos de este trabajo

Como ya se ha adelantado, el objetivo general de este proyecto es abrir nuevas líneas de investigación en el Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad de Sevilla en el campo del estudio de la propagación de radiación a través de la materia mediante simulaciones Monte Carlo, aprovechando las ventajas que esta técnica ofrece y que acabamos de presentar.

Del objetivo general se desprenden otros más específicos:

- Aplicar el código Monte Carlo GEANT4 a problemas de interés en física médica, especialmente en radioterapia, en el estudio de efectos de radiación en circuitos microelectrónicos y en el desarrollo de montajes experimentales en física nuclear.
- Tomar parte activa en el desarrollo del código como miembros de la colaboración GEANT4, no sólo en los modelos de desexcitación nuclear implementados en este código, donde aprovecharemos la experiencia adquirida en nuestro Departamento, sino también en la creación de herramientas de interés en física médica.
- Y para terminar, sentar las bases de un proyecto pionero en Sevilla que permita desarrollar aplicaciones con GEANT4 que ofrezcan una continuidad más allá del trabajo presentado en esta memoria. En este sentido, creemos que GEANT4, como código de propósito general cuyos desarrollos se realizan por una amplia colaboración internacional, va a tener mucha utilidad en los próximos años gracias a sus constantes mejoras.

Capítulo 2

El Código GEANT4

RESUMEN: En este capítulo presentamos una introducción general al código GEANT4. Comenzamos con una reseña histórica de la colaboración y una breve exposición de los diferentes campos en los que se han realizado simulaciones con GEANT4. Posteriormente se describen los aspectos principales del núcleo del código y las clases que se deben implementar al desarrollar una aplicación. Aunque esta última parte no pretende ser un tutorial abreviado, a veces se utilizan términos propios de la programación en C++ para completar la explicación.

ABSTRACT: A general introduction to the GEANT4 code is presented in this chapter. It starts with a historical review of the collaboration and a short summary of the different fields where GEANT4 simulations have been performed. Subsequently, the main aspects of the GEANT4 code and the mandatory classes which must be implemented in any application are described. Although this chapter is not intended to be a short tutorial, specific terms of C++ programming are sometimes used to complete these descriptions.

2.1. Introducción

GEANT4 es un conjunto de herramientas^a computacionales de libre distribución para simular el transporte de partículas a través de la materia.^b Incorpora un conjunto muy extenso de partículas y materiales, así como de modelos de interacciones tanto hadrónicas como leptónicas, que permiten reproducir fenómenos de colisión a energías comprendidas en un rango que se extiende desde los 250 eV hasta los TeV. Como se describirá a continuación, es un código desarrollado en el lenguaje C++ y diseñado de acuerdo con el

^aEn inglés se le conoce como *the GEANT4 toolkit*.

^bPágina web de la colaboración GEANT4: <http://geant4.cern.ch>.

paradigma de la POO (Programación Orientada a Objetos). Asimismo, ha sido creado siguiendo la filosofía de proporcionar total flexibilidad de cara al usuario, de manera que éste pueda (a) diseñar una simulación que se ajuste totalmente a sus intereses y (b) obtener todo tipo de información a partir de la simulación.

2.1.1. Breve historia de GEANT4

GEANT4 surgió a partir de estudios independientemente desarrollados en 1993 en el CERN (*Organisation Européenne pour la Recherche Nucléaire* – Ginebra, Suiza) y en el KEK (en inglés, *High Energy Accelerator Research Organization* – Tsukuba, Ibaraki, Japón). El objetivo de ambos trabajos era investigar el uso de las modernas técnicas de computación, basadas en la POO, para mejorar el programa ya existente GEANT3, que es un código de simulación Monte Carlo desarrollado en FORTRAN para reproducir el transporte de partículas a través de la materia en experimentos de física de altas energías. En 1994 se coordinaron ambas investigaciones y ello derivó en un proyecto conjunto coordinado por el CERN bajo la denominación RD44. Se trataba de un proyecto pionero en el sentido de que involucraba rediseñar y reprogramar un código ya existente, pero usando el lenguaje C++ en lugar de FORTRAN. Finalmente, en diciembre de 1998 se lanzó la primera versión oficial del nuevo código, que pasó a llamarse GEANT4. Desde entonces han sido publicadas al menos dos versiones oficiales por año,^c lo cual ilustra las constantes mejoras y depuraciones que se llevan a cabo de forma continuada (Agostinelli et al., 2003; Allison et al., 2006).

El hecho de que GEANT4 sea un programa de código abierto (a diferencia de otros códigos basados en el método de Monte Carlo) junto con la consecuente modularidad debida a la filosofía de la POO hace que GEANT4 pueda ser mantenido por una gran colaboración de físicos e ingenieros de software. De este modo se pueden cubrir campos de aplicación muy diversos y constituir una colaboración muy ambiciosa en programas de investigación. En la actualidad, un total de 12 instituciones colaboran oficialmente en GEANT4. Son: CERN, ESA, Fermilab (*FERMI national accelerator LABORATORY* – Batavia, Illinois, EE. UU.), *Helsinki Institute of Physics* (Helsinki, Finlandia), IN2P3 (*Institut National de Physique Nucléaire et de Physique des Particules* – Francia), INFN (*Istituto Nazionale di Fisica Nucleare* – Italia), KEK, *Lebedev Institute* (Moscú, Rusia), LIP (*Laboratório de Instrumentação e Física Experimental de Partículas* – Portugal), SLAC (*Stanford Linear Accelerator Center* – Menlo Park, California, EE. UU.), TRIUMF (Vancouver, BC, Canadá) y UK/STFC (*United Kingdom Science & Technology Facilities Council* – Reino Unido). En total, la colaboración está formada por más de un centenar de investigadores que provienen tanto

^cEn diciembre de 2010 se lanzó la versión oficial 9.4.

de estas instituciones como de otras que, por ahora, no forman parte de la colaboración de manera oficial.^d

2.1.2. Aplicabilidad de GEANT4

En sus orígenes, GEANT4 era un código cuyo fin era dar soporte a diseños experimentales dentro del campo de la física de altas energías. De hecho, se ha convertido en una herramienta muy conocida en las grandes colaboraciones experimentales de este campo (e. g. Banerjee et al., 2008; Anisenkov et al., 2010), incluyendo en especial las relacionadas con el LHC (*Large Hadron Collider*), particularmente ATLAS (e. g. Garutti, 2009; Kiryunin et al., 2009; Simonyan, 2009; Cossutti, 2010; Husemann et al., 2010). Obviamente estos trabajos han estado avalados por las validaciones y desarrollos realizados por la colaboración GEANT4 en este sentido (e. g. Apostolakis et al., 2008; Heikkinen et al., 2008; Ivanchenko et al., 2008; Apostolakis et al., 2010; Heikkinen et al., 2010; Ivanchenko et al., 2010; Banerjee, 2010). Por otra parte, también ha sido utilizado para reproducir fenómenos y experimentos de interés en astrofísica de altas energías (Liang, 2010; Tang y Smith, 2010).

Sin embargo, el rango de validez de GEANT4 ha sido extendido a energías más bajas en los últimos años gracias a la implementación de los modelos físicos requeridos para ello, los cuales han sido validados en numerosos trabajos (e. g. Larsson et al., 2005; Poon y Verhaegen, 2005; Quesada et al., 2008; Faddegon et al., 2008a, 2009; Cirrone et al., 2010; Lechner et al., 2010). Gracias a estos esfuerzos de desarrollo, hoy día existen grupos de investigación en todo el mundo que usan GEANT4 para otro tipo de aplicaciones, diferentes de las inicialmente previstas. Por ejemplo, se pueden encontrar multitud de trabajos de interés aeroespacial en los que GEANT4 es una herramienta fundamental (e. g. Santin et al., 2005; Ersmark et al., 2007; Godet et al., 2009; Le Postollec et al., 2009; Alpat et al., 2010; Sarkar y Chakrabarti, 2010). Asimismo, también podemos encontrar programas basados en GEANT4 que han sido desarrollados específicamente para aplicaciones médicas con el objetivo de simplificar su desarrollo. Ejemplos son GAMOS (*Geant4-based Architecture for Medicine-Oriented Simulations*)^e (Arce et al., 2008) y GATE (*Geant4 Application for Tomographic Emission*)^f (Jan et al., 2004). No obstante, también existen numerosos trabajos en los que directamente se usa GEANT4 para aplicaciones médicas (Rodrigues et al., 2004; Tacke et al., 2006; Sharma et al., 2007; Faddegon et al., 2008b; Grevillot et al., 2011), especialmente en hadronterapia (Paganetti, 2004; Paganetti et al., 2004; Aso et al., 2005; Cirrone et al., 2005; Newhauser et al., 2005; Paganetti et al., 2008; Peterson et al., 2009). Por otra parte,

^dMás información en el enlace “*Collaboration*” de la página web oficial de GEANT4, <http://geant4.cern.ch>.

^ePágina web de GAMOS: <http://fismed.ciemat.es/GAMOS/>.

^fPágina web de GATE: <http://www.opengatecollaboration.org/>.

algunos grupos utilizan GEANT4 para simular la respuesta de detectores, tanto de centelleo (Patronis et al., 2007; Riggi et al., 2010) como de estado sólido (Hurtado et al., 2004; Ljungvall y Nyberg, 2005). Finalmente, debemos resaltar el trabajo que en la actualidad realiza la colaboración GEANT4-DNA (Incerti et al., 2010a) en la implementación de modelos en el límite de muy bajas energías,[§] buscando la aplicación de GEANT4 en campos como la radiobiología o la microdosimetría (Chauvie et al., 2007; Champion et al., 2009; Incerti et al., 2009, 2010b; Francis et al., 2011; Villagrasa et al., 2011).

2.2. El núcleo de GEANT4

Todos los posibles elementos que puedan estar involucrados en una simulación se encuentran incluidos en esta herramienta de software. Dentro del código GEANT4 podemos encontrar:

- Objetos que ofrecen una gran flexibilidad y versatilidad para definir tanto la geometría del problema como los materiales involucrados.
- La definición de todas las partículas fundamentales incluidas en la lista del PDG (*Particle Data Group*),^h como son leptones, hadrones, bosones y resonancias. Asimismo es posible definir cualquier ion de manera genérica.
- Clases con las que podemos elegir los modelos físicos que queremos aplicar en nuestro caso particular, junto con la posibilidad de implementar un nuevo modelo si fuese necesario.
- Clases que proporcionan la generación de partículas primarias, a partir de las cuales se realiza el transporte a través de la geometría incluyendo la posibilidad de definir campos electromagnéticos.
- Utilidades para definir regiones con parámetros específicos dentro de una simulación determinada.
- Clases que permiten designar los detectores o *volúmenes sensibles* y definir el tipo de eventos que sean de interés.
- Clases que facilitan la visualización de la geometría.
- Utilidades con las que se puede generar una información de salida acorde al problema que se intenta abordar con la simulación.

[§]Página web de la colaboración GEANT4-DNA: <https://twiki.cern.ch/twiki/bin/view/Geant4/LoweMigratedDNAProcesses>.

^hParticle Data Group: Monte Carlo Particle Numbering Scheme, http://pdg.lbl.gov/2006/mcdata/mc_particle_id_contents.html.

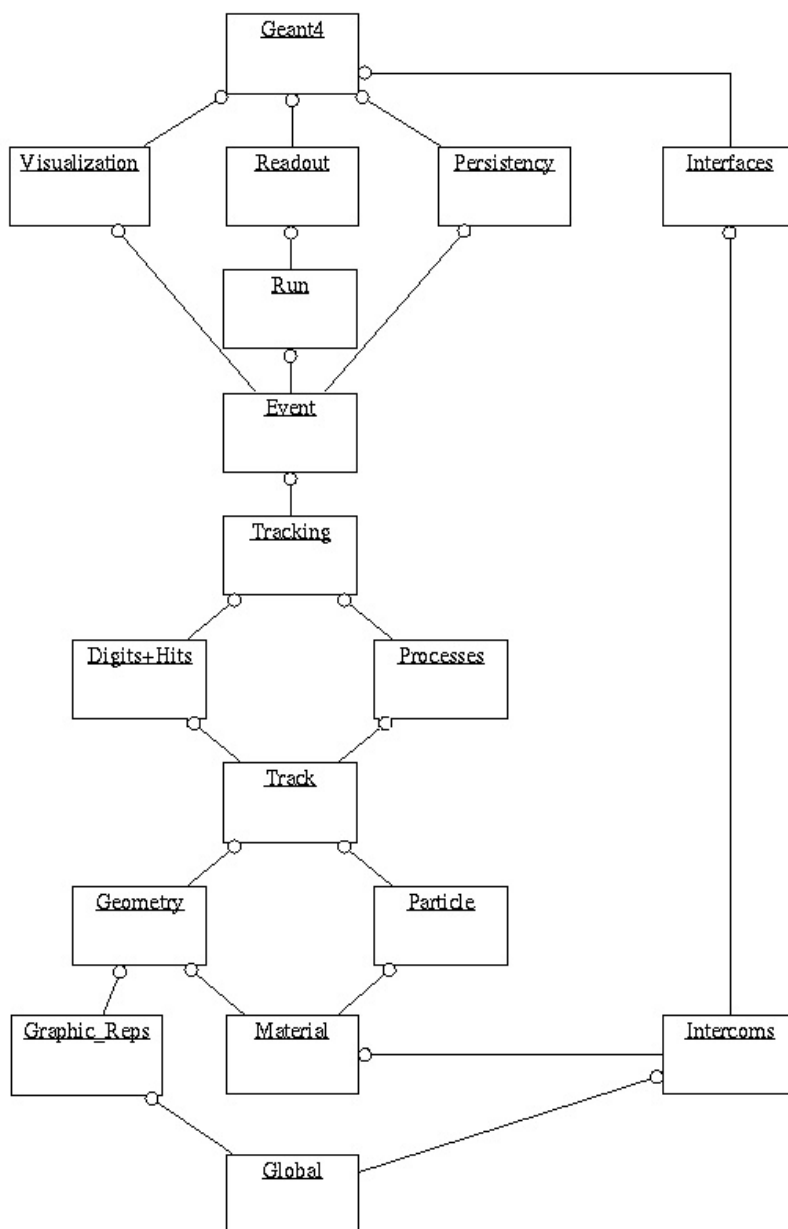


Figura 2.1: Estructura de categorías de las clases de GEANT4. Las líneas terminadas en círculo representan una relación de uso en el sentido de que las clases en la categoría junto al círculo usan clases de la categoría situada al otro lado de la línea. (Agostinelli et al., 2003)

En la Fig. 2.1 se muestra un esquema representativo de las relaciones existentes entre las diferentes categorías en el nivel superior de GEANT4 (Agostinelli et al., 2003). Por construcción del diagrama, las clases que están situadas en la parte baja del mismo son usadas por aquéllas situadas en la parte superior. De todas las categorías presentadas, a continuación se realiza una breve descripción de las más importantes desde el punto de vista del usuario:

Global: define el sistema de unidades, constantes físicas y generadores de números aleatorios.

Material y Particles (Materiales y Partículas): implementan las clases necesarias para describir todas las propiedades físicas de las partículas y materiales incluidos en GEANT4 para poder simular la interacción de cada partícula con la materia.

Geometry (Geometría): proporciona todas las clases que se encargan de describir la geometría de la simulación.

Track (Pista): contiene las clases que definen tanto el estado actual de una partícula en el seno de un volumen como las clases que se encargan de modificarlo en cada paso de la simulación.

Processes (Procesos): incluye los modelos y datos evaluados para reproducir las interacciones tanto electromagnéticas como hadrónicas, definiendo cómo se modifica el estado de una partícula en cada paso.

Tracking (Seguimiento): controla la información relativa a la evolución del estado de cada partícula durante el transporte.

Digits+Hits (Impacto y Respuesta): engloba las clases que definen la respuesta de los volúmenes sensibles a partir de la información referida en la categoría de *tracking*.

Event (Evento): es la categoría que controla un evento completo, que está constituido por todas las partículas generadas a partir de una situación inicial definida por el generador de partículas primarias.

Run (Ejecución): categoría donde se encuentran las clases que se encargan de controlar la información de un conjunto de eventos que comparten el mismo generador de partículas primarias y una misma configuración geométrica.

Finalmente, las categorías *visualization* (visualización), *persistency* (persistencia), *interfaces* (entornos) y *readout* (lectura de salida) son las que incluyen las clases necesarias para constituir la interfaz de comunicación exterior de GEANT4.

Por otra parte, para completar la descripción del núcleo del código conviene definir los siguientes tecnicismos de GEANT4, estrechamente relacionados con su arquitectura:

Run (ejecución): consiste en una sucesión de *eventos* que comparten la misma geometría, el mismo generador de partículas primarias y la misma *lista de física*. La clase que la representa es **G4Run**, mientras que **G4RunManager** es la clase que gestiona todos los aspectos relativos a un *run*.ⁱ

Event (evento): es la unidad básica de simulación en GEANT4. Define todos los procesos transcurridos a partir de una determinada situación inicial dada por el generador de partículas primarias, las cuales pueden ser una o varias. La clase que representa un evento es **G4Event**, el cual es gestionado por la clase **G4EventManager**.

Track (pista): es la imagen de la partícula en un instante concreto (es como una instantánea). Esta información (posición, energía, dirección del momento...) está contenida en un objeto de la clase **G4Track**, que se actualiza por la información recibida en cada *paso* de la simulación. La clase que se encarga de cambiar la información de **G4Track** es **G4TrackingManager**.

Step (paso): define el cambio producido en el estado de una partícula entre un punto y otro de su camino. Se representa por un objeto de la clase **G4Step**, que es quien se encarga de modificar la información contenida en **G4Track**. Cada paso es gestionado por la clase **G4SteppingManager**.

Lista de física: denota el conjunto de modelos físicos considerados en un determinado *run*. En la sección 2.3.2 se profundizará en este concepto.

Dentro del núcleo de GEANT4 hay otras clases cuya labor también es importante. Sin embargo, su exposición ya queda fuera del objetivo de este trabajo. Explicaciones más detalladas pueden encontrarse en la bibliografía (Agostinelli et al., 2003) o en los tutoriales disponibles en internet.^j

2.3. Clases de obligada implementación

Como ya se dijo anteriormente, GEANT4 requiere que el usuario *termine* de codificar el programa de acuerdo a sus intereses, incluyendo la implementación del método principal (**main()**) donde se inicia la aplicación.

ⁱNo debemos confundir el término *run* con la ejecución de la simulación completa, ya que en una misma simulación se pueden definir varios *runs*.

^jP. ej. en el enlace "*Past events*" de la página web de GEANT4, <http://geant4.cern.ch>, pueden encontrarse algunos tutoriales de libre acceso realizados en los últimos años.

En general, dependiendo de las necesidades o ambiciones del usuario, será necesario definir un mayor o menor número de clases, pero siempre es obligatorio implementar estas tres clases, que deben ser registradas en el método principal:

- `UserDetectorConstruction`, donde se establece la geometría.
- `UserPhysicsList`, donde se define la lista de física.
- `UserPrimaryGeneratorAction`, donde se configura la generación de primarias.

Los nombres anteriores son denominaciones genéricas que se usan en el argot para designar estas clases; en realidad, existe total libertad en este sentido. En los apartados siguientes se describen los aspectos más importantes de cada una de ellas.

2.3.1. Definición de la geometría

Esta clase debe derivar de la clase virtual denominada `G4VUserDetectorConstruction`. Aquí es donde se definen tanto la geometría del problema como los materiales que constituyen cada volumen. Para ello, hay que seguir la jerarquía establecida en GEANT4, realizada para optimizar recursos de CPU y que explicamos a continuación. Existen otras alternativas, plasmadas en la guía del usuario,^k pero todas ellas siguen en cierto modo el mismo procedimiento.

1. El primer paso consiste en definir la forma y dimensiones de cada volumen mediante un *sólido*, que está representado por un objeto perteneciente a cualquiera de las clases que heredan de la clase abstracta `G4VSolid`, como pueden ser `G4Box` o `G4Tubs`.
2. Una vez creado el sólido, en el segundo paso se define el llamado *volumen lógico*, que combina la información del sólido junto con la del material del que está compuesto el mismo. El volumen lógico está representado en el código por un objeto de la clase `G4LogicalVolume` y siempre debe definirse dentro de otro volumen lógico. Siempre hay que generar el volumen que contiene a todos los demás, que suele denominarse *experimental hall*.
3. Finalmente se crea el *volumen físico*, que está representado por un objeto de la clase `G4VPhysicalVolume`. El volumen físico es una copia del volumen lógico (el cual incluye a los volúmenes lógicos que albergue en su interior) que está localizada en una zona del espacio definido por el sistema de referencia del volumen lógico que la contenga.

^kGEANT4: User Documentation, <http://geant4.web.cern.ch/geant4/support/userdocuments.shtml>.

Es importante resaltar que todas las operaciones lógicas entre volúmenes (intersección, adición y sustracción) se realizan a nivel de volúmenes *lógicos*, tal y como cabía esperar por la denominación. Es importante tener en cuenta esto, ya que las relaciones entre volúmenes que se consideren repercutirán en las prestaciones de la simulación generada. En general, cuanto más jerarquizada se haya definido una determinada geometría, más rápido se realizará la simulación, ya que cuanto menos volúmenes lógicos hayan sido definidos en el mismo nivel jerárquico, más eficiente (en general) es el algoritmo de transporte.

Por otra parte, en la geometría de la simulación pueden definirse diferentes *regiones*, las cuales se definen asignando los volúmenes lógicos que contienen a la región completa (pueden ser uno o varios). Cada región está representada por un objeto de la clase `G4Region`.

Además, los *volúmenes sensibles* deben definirse también a nivel de volumen lógico. Cada volumen sensible debe estar representado por un objeto perteneciente a una clase derivada de `G4VSensitiveDetector`. En la sección 2.4.2 se explica brevemente los pasos a seguir.

Por último, si existe algún campo electromagnético aplicado en alguna zona del espacio, es en esta clase donde debe ser definido.

2.3.2. Lista de física

GEANT4 no considera partícula o interacción alguna por defecto; ni siquiera el proceso de transporte sin interacción. Toda la información relativa a partículas e interacciones que se consideran en la simulación debe incluirse en una clase que derive de la clase virtual `G4VUserPhysicsList`. En esta clase hay que incluir:

- Las partículas cuyo transporte a través de la materia se va a simular.
- Los tipos de interacción con la materia que se consideran para cada partícula. Cada forma de interacción está gobernada por uno o varios modelos, entre los cuales también se puede elegir.
- Los *cortes de producción* de electrones, fotones y positrones secundarios en la simulación, para evitar divergencia infrarroja en algunos procesos electromagnéticos. Además, desde la versión 9.3 se puede introducir un corte de producción para protones, que actúa como umbral de producción en colisiones hadrónicas elásticas.

En este punto procede explicar brevemente la manera en la que se activan los modelos físicos en la simulación. Cada tipo de interacción se implementa en una clase determinada, a la cual se le denomina **proceso** en la terminología de GEANT4. Éstos se pueden clasificar en tres tipos:

AtRest: sólo se invocan cuando la partícula está en reposo (p. ej., aniquilación de un positrón).

AlongStep: son tenidos en cuenta cuando la partícula cambia de un punto a otro en un paso o *step* (p. ej., dispersión electromagnética).

PostStep: son aplicables una vez que el *step* ha concluido (p. ej., colisión inelástica con producción de partículas secundarias).

Según el tipo de interacción que reproduzca, el proceso puede ser de un tipo determinado o mezcla de varios. Por ejemplo, la aniquilación de un positrón con un electrón del medio es una mezcla de procesos **AtRest** y **PostStep**, puesto que la aniquilación puede ocurrir en vuelo o con el positrón en reposo.¹

Para una partícula en concreto, la manera en la que interviene cada uno de los procesos registrados varía en función del tipo de éstos según la clasificación anterior. Aunque el procedimiento de llamada a los procesos se puede explicar de manera general, éste es más fácil de entender mediante un ejemplo concreto: el transporte de un positrón a través de la materia.

Consideremos un positrón, desplazándose dentro de un volumen compuesto por un material determinado, para el que se han registrado los siguientes procesos, agrupados según el criterio anterior:

- **AlongStep** y **PostStep:** dispersión electromagnética, ionización y radiación de frenado.
- **AtRest** y **PostStep:** aniquilación con un electrón del material.

Para realizar el paso en la simulación, GEANT4 realiza la siguiente secuencia:

1. Calcula, usando números aleatorios, la longitud que cada uno de los procesos **PostStep** propone para realizar el paso en la simulación. En esta comparación también se considera la distancia a la frontera del volumen. El proceso que otorgue la menor longitud, será el único que se aplique como proceso **PostStep**.
2. Se procede a transportar el positrón desde el punto inicial hasta el punto final. Para ello se invocan de manera secuencial *todos* los procesos **AlongStep** que se encuentren registrados. Con esta información se calcula el cambio de energía cinética del positrón a lo largo del paso.
3. Una vez que la partícula se encuentra en el punto final, se aplica el proceso **PostStep** que estableció la longitud del paso.

¹Aquí se entiende “*en reposo*” en el sentido de que la energía cinética está por debajo de un umbral, determinado mediante un parámetro denominado `finalRange`, por debajo del cual se considera nula.

Este procedimiento se aplica sucesivamente hasta que el positrón sea aniquilado (la aniquilación también entra en juego como `PostStep`), escape del volumen global de la simulación o su energía cinética llegue a ser menor que el umbral determinado por el parámetro `finalRange`, momento en el cual se considera nula. En este último caso, se estima usando números aleatorios el transcurso de tiempo propuesto por cada uno de los procesos `AtRest`, aplicándose el que otorgue el menor valor. Si el proceso `AtRest` invocado implica la aniquilación del positrón (como es el caso), entonces se da por concluido el seguimiento de este positrón y comienza el de las partículas secundarias que se hayan generado durante su transporte.

El cálculo de la longitud propuesta por cada proceso se realiza mediante la solución de la ecuación de supervivencia,

$$P(x) = \frac{1}{\lambda} \exp(-x/\lambda) , \quad (2.1)$$

donde en el caso de colisiones con el medio $\lambda^{-1} = N\sigma$ es la sección eficaz macroscópica, con N la densidad de blancos por unidad de volumen en el material y σ la sección eficaz de esa interacción. Como en general σ depende de la energía de la partícula incidente, E , entonces la longitud propuesta para el paso debe ser lo suficientemente pequeña como para considerar que la sección eficaz es constante en ese recorrido. En el caso de procesos `AtRest`, x representa el tiempo transcurrido y $\lambda = \tau$, siendo τ el tiempo medio correspondiente a ese proceso.

Por otra parte, en la lista de física debemos definir unas magnitudes denominadas **cortes de producción**, cuyo concepto es bastante sencillo.

En el ejemplo anterior, existen procesos que generan partículas secundarias, como es el caso de la aniquilación positrón-electrón, que crea dos fotones de 511 keV. En este tipo de procesos es donde intervienen los cortes de producción. Consisten en definir una determinada longitud, que establece el mínimo alcance esperado que deben tener las partículas secundarias en el momento de su creación para que se considere su seguimiento en la simulación. Si el proceso en cuestión genera partículas cuyo alcance esperado quede por debajo del corte (como pueden ser los fotones de muy baja energía generados por radiación de frenado), entonces GEANT4 considera la pérdida de energía que experimenta la partícula primaria, pero NO realiza el seguimiento de las partículas secundarias. En caso contrario, la partícula primaria pierde igualmente la energía, y la partícula secundaria es seguida en la simulación.

En general, el valor del corte de producción puede establecerse para cada *región* presente en la geometría (sección 2.3.1) de tal modo que podamos definir regiones específicas que por sus características o interés requieran un seguimiento más detallado.

Introducir los cortes considerando el alcance esperado en lugar de la energía de la partícula secundaria es una novedad de GEANT4, puesto que

la mayoría de los programas de simulación definen una energía determinada como umbral de producción. Sin embargo en una simulación en la que hay implicados distintos materiales, la definición de cortes en energía puede provocar que el umbral establecido sea adecuado para los materiales más ligeros, pero excesivamente bajo para los materiales con densidad más alta. De este modo, la definición del corte de producción en función del rango esperado es mucho más intuitiva de manejar, ya que basta con estudiar las dimensiones típicas del problema para establecer este valor.

Finalmente, hay que resaltar que también se puede definir un corte para terminar el seguimiento global de todas las partículas mediante un parámetro denominado `finalRange`, que define el alcance esperado que debe tener una partícula dada para que su seguimiento siga siendo considerado. Su valor por defecto es también de 1 mm.

2.3.3. Generador de primarias

Esta clase, la tercera y última de obligatoria implementación por parte del usuario, debe derivar de `G4VUserPrimaryGeneratorAction` y es la que se encarga de generar las partículas primarias en la simulación.

Aquí se deben definir qué partículas se crearán como primarias, establecer las distribuciones de energía, posición y momento e invocar el generador adecuado para lanzarlas en la simulación, que es un objeto del tipo `G4VPrimaryGenerator`.

En el capítulo 3 se presenta el trabajo realizado para diseñar un nuevo generador de partículas primarias de interés para aplicaciones médicas.

2.4. Clases de implementación opcional

Con las tres clases anteriores se cubren los requisitos mínimos para desarrollar una aplicación GEANT4. Sin embargo, no podemos obtener más información que la reflejada por pantalla a menos que definamos algunas clases más en dicha aplicación.

Entre el gran número de posibilidades existentes, destacaremos las que han sido más importantes para el desarrollo de los trabajos descritos en los capítulos siguientes, destacando sus aspectos más relevantes. Una descripción más detallada queda fuera del objetivo de este trabajo. En el manual de usuario de GEANT4 se puede encontrar información al respecto.^m

^mDisponible siguiendo los enlaces “guides” y “User’s Guide: For Application Developers” en la página web de GEANT4, <http://geant4.cern.ch>.

2.4.1. Acciones de usuario

Son un conjunto de clases diseñadas para realizar determinadas acciones a voluntad del usuario durante la simulación. Existen cinco tipos diferentes, clasificados en función del momento en el que se invocan. Son:

“Run Action”: se ejecutan al principio o al final de un *run* determinado.

“Event Action”: se ejecutan al principio o al final de cada evento.

“Stepping Action”: son acciones que se realizan en cada paso de la simulación.

“Tracking Action”: estas acciones se llevan a cabo al principio o final del seguimiento realizado a cada partícula.

“Stacking Action”: sirve para alterar el orden asignado por defecto al seguimiento de las partículas que se producen durante la simulación, de manera que se pueda dar prioridad a aquéllas que cumplan ciertas condiciones.

2.4.2. Volúmenes sensibles y su respuesta

En la sección 2.3.1 se expuso que aquellos volúmenes lógicos cuya información sobre una determinada magnitud necesitamos conocer deben ser asignados a un *volumen sensible*, que en GEANT4 se representa por un objeto de una clase derivada de `G4VSensitiveDetector`. Uno puede implementar su propio detector, aunque ya existe en GEANT4 una clase, denominada `G4MultiFunctionalDetector`, que facilita este trabajo.

En cualquier caso, a un objeto que representa un *volumen sensible* hay que asignarle *scorers* (anotadores), que son entidades donde se define el tipo de información que se debe extraer del *volumen sensible*. Los *scorers* están representados por objetos de clases derivadas de la clase abstracta `G4VPrimitiveScorer`. En la versión actual de GEANT4 (9.4) ya existen diversos *scorers* implementados para su uso directo en GEANT4. Por ejemplo, en las aplicaciones que mostraremos en los capítulos siguientes usaremos principalmente `G4PSDoseDeposit` y `G4PSEnergyDeposit`, que calculan la dosis y la energía depositada en un volumen, respectivamente.

Finalmente, la respuesta obtenida en un determinado *volumen sensible* al que se registran uno o varios *scorers* se procesa mediante entidades denominadas *hits* (impactos), que consisten en una “foto” de la interacción que haya tenido lugar en dicho volumen. Los *hits* están representados por objetos de clases derivadas de `G4VHit` y son creados por los *scorers*. En el caso de utilizar los *scorers* incluidos en la distribución oficial de GEANT4 no es necesario implementarlos. Por el contrario, si hemos definido nuestro propio *scorer*, debemos implementar también este tipo de objetos.

2.5. Conclusiones

Tras esta breve exposición de las principales características y funcionalidades de GEANT4, podemos extraer las siguientes conclusiones, resumidas en ventajas e inconvenientes.

Ventajas

- A diferencia de otros códigos Monte Carlo, GEANT4 es un código de propósito general y es aplicable a una amplia gama de problemas físicos, proporcionando resultados aceptables en un amplio rango en energías.
- Programar según el paradigma de la POO implica tener un código distribuido en módulos, posibilitando así jerarquizar responsabilidades en una colaboración muy amplia de físicos e ingenieros. De este modo, las depuraciones, optimizaciones o actualizaciones en una parte del código no influyen en otras partes del mismo.
- Al estar mantenido por una extensísima colaboración, las posibilidades de mejora son muchas, lo cual se refleja constantemente con las nuevas versiones que se publican.
- GEANT4 está dotado de gran flexibilidad para el usuario, de manera que proporciona multitud de opciones a la hora de definir la geometría del problema, la lista de física, posibles filtros en regiones geométricas de interés, obtención de resultados. . .
- Es un código muy potente a la hora de generar modelos geométricos gracias a la extensa variedad de formas geométricas que ofrece.
- Posee una documentación extensa, tanto a nivel de usuario como de desarrollador, y buen soporte técnico en el foro, en el cual los usuarios que encuentren algún error o problema pueden dirigirse directamente al grupo de trabajo correspondiente gracias a la mencionada modularización del código.

Inconvenientes

- La flexibilidad requerida por GEANT4 obliga a que el usuario tenga que involucrarse en *terminar de codificar* completamente en C++ la aplicación de acuerdo a sus intereses.
- Debido a la cantidad de opciones existente y a su compleja estructura, la curva de aprendizaje en GEANT4 es muy lenta y requiere un esfuerzo notable por parte del usuario.

-
- Al ser tan general puede requerir más recursos computacionales que otros códigos especialmente diseñados para aplicaciones concretas.
 - Aunque GEANT4 es un código de propósito general, en algunos campos de aplicación a bajas energías no tiene el mismo nivel de validación que otros códigos especializados para ese tipo de aplicaciones.
 - En el modelado de interacciones a bajas energías (neutrones e interacciones electromagnéticas) no proporciona a veces resultados igual de satisfactorios que otros programas especialmente diseñados para este tipo de interacciones, debido a que algunos de estos modelos están en GEANT4 aún en fase de desarrollo (donde nuestro grupo colabora de manera activa).

Parte II

Desarrollos para el código GEANT4

Capítulo 3

Archivos de espacio de fases en formato del OIEA

RESUMEN: En este capítulo se describe el desarrollo de un código independiente que permite la lectura y escritura con GEANT4 de archivos de espacio de fases en formato del OIEA, de manera que sea posible el intercambio de archivos validados entre otros códigos Monte Carlo y GEANT4. Para tal fin se han desarrollado dos clases, denominadas *G4IAEAphspReader* y *G4IAEAphspWriter* cuyas características se describen. Finalmente, se muestran algunos ejemplos relativos a la verificación del funcionamiento de estas clases y al propio uso en sí de ambas en aplicaciones de interés en radioterapia.

ABSTRACT: The development of a stand-alone code designed to read and write phase-space files following the IAEA format is presented in this chapter. This work allows the exchange of validated phase-space files between other Monte Carlo codes and GEANT4. With this purpose, two classes have been developed, called *G4IAEAphspReader* and *G4IAEAphspWriter*, which main functionalities are described. Finally, some examples related to performance tests are shown as well as its use in applications of interest in radiotherapy.

3.1. Introducción

Tal y como se ha comentado anteriormente, la simulación por el método de Monte Carlo se ha convertido en los últimos años en una herramienta estándar para verificar tratamientos de radioterapia con aceleradores lineales de electrones. Generalmente, se ha utilizado para modelar los componentes de generación y/o colimación el haz, para calcular la respuesta de detectores

usados en dosimetría clínica y para reproducir las interacciones de la radiación en el paciente (Rogers, 2006).

Para conseguir una planificación precisa del tratamiento la fuente de radiación debe caracterizarse con exactitud. Sin embargo, al existir un número limitado de modelos de aceleradores lineales comerciales para radioterapia, en la mayoría de las simulaciones se repiten algunas partes del cabezal del acelerador, especialmente el blanco, el colimador primario o el filtro aplanador.

Además, en el capítulo 1 se expuso que la incertidumbre asociada a cualquier cálculo realizado mediante el método de Monte Carlo es proporcional a $1/\sqrt{N}$, siendo N el número de eventos simulados. Como consecuencia de ello, la precisión del 2% requerida para calcular la dosis en un tratamiento dado (ICRU, 1976) hace que la verificación por métodos de Monte Carlo requiera simular un número muy elevado de eventos o *historias*, que es como se conoce en radioterapia a cada suceso correspondiente a la incidencia de un electrón en el blanco o lámina difusora del cabezal. Esto implica que el tiempo de simulación necesario para alcanzar la precisión exigida en los cálculos sea excesivo para la práctica clínica diaria. Por lo tanto, al margen de la evolución que experimenta la tecnología en cuanto a rapidez de cálculo, es necesario desarrollar técnicas que posibiliten reducir el tiempo invertido por un ordenador para realizar la simulación.

Por estas razones, el uso de archivos de espacio de fases, o archivos phsp (*PHase SPace*), que hayan sido previamente calculados y validados es de gran utilidad. Un *archivo de espacio de fases* es una colección de determinados datos que corresponden a las partículas que cruzan un plano determinado previamente, que se define como *plano del espacio de fases*. Las variables que se almacenan son: tipo de partícula, energía, posición en el plano, cosenos directores del momento lineal y peso estadístico. Si se define dicho archivo *phsp* como generador de partículas primarias para la simulación, entonces desaparece la necesidad de obtener una descripción detallada de la geometría y materiales de la máquina (especialmente el cabezal), cuyos datos técnicos suelen estar además protegidos por acuerdos de confidencialidad.

En este sentido, el OIEA (Organismo Internacional de Energía Atómica – Viena, Austria), en inglés IAEA (*International Atomic Energy Agency*), ha fomentado un proyecto cuyo objetivo es construir una base de datos de archivos phsp representativos de diferentes modelos de aceleradores y unidades de Co-60 utilizadas en radioterapia;^a además, los datos contenidos en la base de datos deben haber sido validados experimentalmente. En el marco de este proyecto, un comité de expertos aprobó un formato común de archivo phsp para su uso en aplicaciones médicas bajo la denominación de *IAEAphsp* (Capote et al., 2006). Este formato ya ha sido implementado en

^aPágina web del proyecto “*Phase-space database for external beam radiotherapy*”, coordinado por la Sección de Datos Nucleares del OIEA: <http://www-nds.iaea.org/phsp>.

las versiones oficiales de los códigos de simulación Monte Carlo BEAMnrc/EGSnrc (Rogers et al., 1995; Kawrakow, 2000; Kawrakow et al., 2009) y PENELOPE (Salvat et al., 2009), que son considerados estándares para modelar el transporte de electrones y fotones en aplicaciones de radioterapia.

En este capítulo describiremos la implementación de dos clases que permiten trabajar con archivos *IAEAphsp* con el código GEANT4. Tal y como se comentó en el capítulo 2, GEANT4 es un código Monte Carlo para la simulación del transporte de todo tipo de partículas a través de la materia. En sus orígenes se diseñó para analizar dispositivos experimentales de física de altas energías, pero en la actualidad ha extendido su rango de aplicación a energías más bajas, incluyendo el rango de energías de interés para radioterapia. Además, algunos aspectos relevantes en radioterapia, como el estudio de la contaminación de neutrones existente en tratamientos de radioterapia con fotones de altas energías (Becker et al., 2007), aumentan las posibilidades de GEANT4 como código de simulación en este campo. Por lo tanto, es importante que el código GEANT4 incorpore la posibilidad de trabajar con archivos *IAEAphsp* que permitan el intercambio de datos de espacios de fases con los códigos de simulación mencionados.

A continuación presentaremos las características del código que hemos desarrollado para leer y escribir archivos *IAEAphsp* con GEANT4. El desarrollo de este trabajo ha sido avalado por el OIEA como una implementación general e independiente. Las clases que presentamos en este trabajo sólo se comunican con las clases desarrolladas por el OIEA para definir el formato de los archivos *IAEAphsp* mediante el uso de sus métodos públicos, sin reimplementar el formato *IAEAphsp* en las clases de GEANT4. De esta manera aseguramos la compatibilidad con versiones futuras del formato *IAEAphsp*. En este sentido hay que mencionar que la plataforma GAMOS (Arce et al., 2008) incorpora también la utilidad de lectura y escritura de archivos de espacio de fases en formato *IAEAphsp*,^b pero no está disponible como un código independiente y no utiliza los métodos públicos de las clases del OIEA.

Estructura de este capítulo

En la sección 3.2 se describen algunos aspectos del formato *IAEAphsp*, el diseño de las clases que hemos desarrollado y se exponen las principales utilidades en cuanto a lectura y escritura de archivos *IAEAphsp*. Posteriormente, la sección 3.3 expone algunos resultados ilustrativos de este trabajo. Finalmente, en la sección 3.4 presentamos las conclusiones.

^bPágina web de GAMOS: <http://fismed.ciemat.es/GAMOS/>.

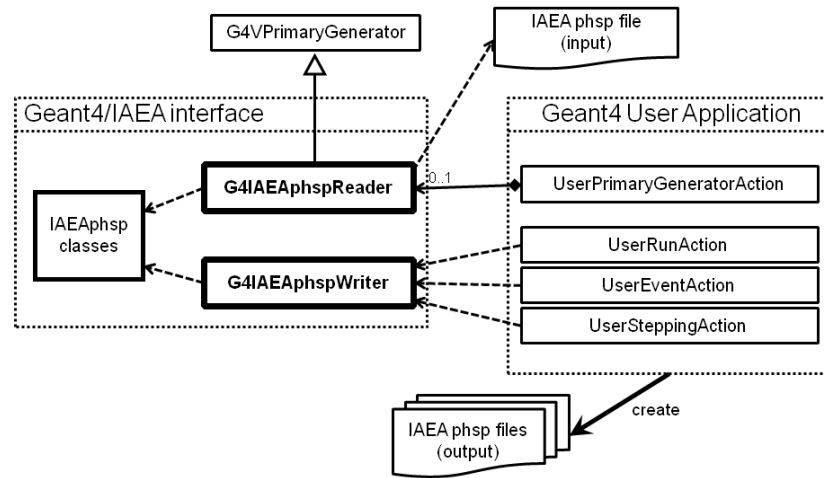


Figura 3.1: Esquema representativo de las principales relaciones (expresadas en notación UML) de las clases desarrolladas en este trabajo, *G4IAEAphspReader* y *G4IAEAphspWriter*, las clases de una aplicación genérica GEANT4 y las clases definidas en el código desarrollado por el OIEA.

3.2. Descripción de las clases implementadas

La Fig. 3.1 muestra un esquema en notación UML (*Unified Modeling Language*) del diseño de las clases desarrolladas para leer y escribir archivos *IAEAphsp* con GEANT4, que hemos denominado *G4IAEAphspReader* y *G4IAEAphspWriter*, respectivamente. Las flechas discontinuas que unen ambas con las clases IAEA (disponibles en la página web del proyecto), que definen el formato *IAEAphsp*, indican una relación de uso en el sentido de que las clases *G4IAEAphspReader* y *G4IAEAphspWriter* invocan los métodos públicos implementados en las clases IAEA. Por otra parte, también se indica que la clase *G4IAEAphspReader* deriva de la clase virtual *G4VPrimaryGenerator* del código GEANT4. La Fig. 3.1 también muestra las relaciones existentes entre las acciones de usuario que, en este caso, *deben* estar definidas en la aplicación GEANT4 y las dos clases que hemos desarrollado. Estas relaciones se explican en detalle en las secciones 3.2.1 y 3.2.2.

En la Tabla 3.1 se enumeran todos los métodos públicos definidos en las clases IAEA, que son aquéllos a los que nos hemos referido con anterioridad. En la tabla, la letra “R” indica los métodos utilizados en la clase *G4IAEAphspReader* mientras que la letra “W” denota lo mismo para la clase *G4IAEAphspWriter*. La descripción del cometido de cada uno de estos métodos puede encontrarse en los códigos fuente de estas clases, donde se explican con mayor profundidad éstos y otros detalles acerca del formato *IAEAphsp*.

Método público IAEA	Usado en
<i>iaea_check_file_size_byte_order()</i>	R
<i>iaea_copy_header()</i>	W
<i>iaea_destroy_source()</i>	R/W
<i>iaea_get_constant_variable()</i>	R
<i>iaea_get_extra_numbers()</i>	R
<i>iaea_get_max_particles()</i>	R
<i>iaea_get_maximum_energy()</i>	R
<i>iaea_get_particle()</i>	R
<i>iaea_get_total_original_particles()</i>	R
<i>iaea_get_type_extra_variables()</i>	R
<i>iaea_get_used_original_particles()</i>	R
<i>iaea_new_source()</i>	R/W
<i>iaea_print_header()</i>	W
<i>iaea_set_constant_variable()</i>	W
<i>iaea_set_extra_numbers()</i>	W
<i>iaea_set_paralell()</i>	R
<i>iaea_set_record()</i>	R
<i>iaea_set_total_original_particles()</i>	W
<i>iaea_set_type_extrafloat_variable()</i>	W
<i>iaea_set_type_extralong_variable()</i>	W
<i>iaea_update_header()</i>	W
<i>iaea_write_particle()</i>	W

Tabla 3.1: Métodos públicos definidos en las clases IAEA. La columna derecha indica la clase que lo usa: “R” para lectura y “W” para escritura.

3.2.1. Lectura de espacios de fases

En el código GEANT4 hay varios generadores de partículas primarias disponibles para el usuario. De ellos, los más populares son los implementados en las clases *G4ParticleGun* y *G4GeneralParticleSource*. Ambas derivan de la clase base abstracta *G4VPrimaryGenerator* y, como tales, pueden utilizarse en la clase concreta “Primary Generator Action” de cualquier aplicación desarrollada con GEANT4.

Siguiendo este esquema, nuestra clase *G4IAEAphspReader* deriva también de *G4VPrimaryGenerator* y su misión es obtener la información almacenada en un archivo *IAEAphsp* y, a partir de ésta, crear las correspondientes partículas primarias en la simulación GEANT4.

Entre las utilidades implementadas en nuestra clase *G4IAEAphspReader*, destacamos las siguientes:

- Para realizar un análisis estadístico adecuado es necesario tener en

cuenta las correlaciones que puedan existir entre partículas. Para mantenerlas, este generador crea en el mismo evento de la simulación GEANT4 todas las partículas que pertenezcan a la misma historia. En este sentido, consideramos dos tipos de correlaciones diferentes:

1. Las existentes entre partículas distintas que pertenezcan a la misma historia.
2. Las que aparecen cuando se aplica *reciclado* de partículas; esto es, cuando cada partícula leída desde el archivo de espacio de fases se reutiliza más de una vez para aumentar la estadística de recuento en la simulación.

Por lo tanto, el funcionamiento de esta clase *G4IAEAphspReader* consiste en:

1. Obtener toda la información perteneciente a la misma historia.
2. Generar en el mismo evento de GEANT4 todas las partículas cuya información haya sido obtenida.
3. Repetir la generación de cada partícula el número de veces que haya sido establecido en la simulación GEANT4.

Aunque se ha demostrado que el reciclado de partículas debería ser evitado en la medida de lo posible (Walters et al., 2002), generalmente es una estrategia a la que se recurre con frecuencia, ya que permite mejorar la estadística de la simulación sin utilizar un número de repeticiones demasiado alto. Por ello, se ha implementado en esta clase un método público, `SetTimesRecycled()`, cuyo argumento es un entero cuyo valor, N_{rec} , indica que cada partícula se utilizará $(N_{\text{rec}} + 1)$ veces en la simulación. Asimismo, en casos en los que el espacio de fases presenta simetría rotacional alrededor de un determinado eje, es posible realizar el reciclado teniendo en cuenta dicha simetría, de manera que el ángulo azimutal cambia aleatoriamente en cada reutilización.

- El formato *IAEAphsp* ofrece la posibilidad de definir una variable extra conocida como *número incremental de historias* (n_stat), que puede ser utilizado tanto con EGSnrc como PENELOPE. Esta variable acompaña a cada partícula almacenada en el archivo *IAEAphsp* e indica el número de historias que han sido necesarias para almacenar esa partícula después de la partícula precedente almacenada en dicho archivo. Por lo tanto, una partícula que tenga $n_stat = 0$ se ha generado en la misma historia que la partícula almacenada previamente en el archivo *IAEAphsp* (por lo que ambas están correlacionadas).

Hay que mencionar que esta variable es opcional en ambos códigos. Si está activada, realiza la función que hemos explicado. Si no lo está, entonces n_stat sólo toma los valores 0 y 1 para distinguir qué partículas

están correlacionadas entre sí. Nuestra clase *G4IAEAphspReader* tiene en cuenta esta variable tal cual, de manera que si el archivo *IAEAphsp* que lee tiene activada esta variable, entonces la tiene en cuenta para controlar el número de historias que se simulan. Si no estuviese activada, sólo se tiene en cuenta para mantener las correlaciones.

- En el caso de configurar una simulación que se ejecute en diferentes máquinas en paralelo es necesario dividir previamente el archivo *IAEAphsp* en trozos. De esta manera cada ejecución paralela sólo tiene en cuenta un subconjunto determinado de partículas, manteniendo sus correlaciones. Esto se puede realizar con el método `SetTotalParallelRuns()` definido para tal efecto. Para elegir qué trozo utilizará una ejecución concreta, se ha definido el método `SetParallelRun()`.
- A las partículas generadas con la clase *G4IAEAphspReader* se le pueden aplicar transformaciones espaciales, concretamente traslaciones y rotaciones, de manera que este generador pueda utilizarse en cualquier sistema de referencia. Entre las rotaciones implementadas hay de dos tipos:
 1. Rotaciones sobre los ejes (x, y, z) del sistema de referencia global, siguiendo cualquier orden.
 2. Imitando a los aceleradores lineales de radioterapia, se pueden definir rotaciones cuyo eje pase por el *isocentro* (Fig. 3.2), en cuyo caso deben definirse la posición del isocentro y la dirección de los ejes de giro del cabezal y del *gantry* (brazo) del acelerador.

El orden en el que se aplican estas transformaciones es:

1. Traslación.
2. Rotaciones sobre los ejes del sistema de referencia global.
3. Rotación del cabezal y rotación del *gantry*.

De esta manera, sólo se necesita generar un determinado campo de radiación una única vez y en cada ocasión se utilizaría en la orientación que fuese necesaria.

Uso de esta clase

Para usar esta clase en una aplicación GEANT4 hay que realizar estos tres pasos:

1. Incluir como miembro de la clase “Primary Generator” implementada en la aplicación un puntero a objeto *G4IAEAphspReader*.



Figura 3.2: Rotaciones isocéntricas que puede realizar un acelerador para radioterapia (en la figura, modelo PRIMUS de Siemens). Se representan el eje de rotación del *gantry* (verde) y el eje de rotación de la parte móvil del cabezal (rojo).

2. En el constructor de la clase “Primary Generator”, crear dinámicamente el objeto *G4IAEAphspReader* pasando como argumento el nombre del archivo *IAEAphsp*, sin incluir la extensión. Para cada objeto sólo se puede registrar un único archivo.
3. En el método `GeneratePrimaries()` de la clase “Primary Generator” es donde debemos usar el método `GeneratePrimaryVertex()` de la clase *G4IAEAphspReader* para generar las partículas en la simulación.

Se puede obtener más información en la página web del proyecto del OIEA, donde se encuentra una guía de referencia de esta clase, acompañada de ejemplos concretos para su uso (Cortés-Giraldo et al., 2009).

3.2.2. Escritura de espacios de fases

La clase que se encarga de la creación de archivos *IAEAphsp* en GEANT4 la hemos denominado *G4IAEAphspWriter*, con la que se puede generar más de un archivo *IAEAphsp* durante la misma simulación. En esta ocasión, la clase se ha diseñado de manera que el mismo objeto se utilice en tres acciones de usuario de una determinada aplicación GEANT4. Ante esto, la clase *G4IAEAphspWriter* se ha desarrollado con un patrón de diseño de *instancia única* o *singleton*. El método estático con el que se accede al *singleton* es `G4IAEAphspWriter::GetInstance()`.

Tal y como se explica en la documentación del formato *IAEAphsp*

(Capote et al., 2006), el espacio de fases se genera en modo binario en un archivo cuya extensión es `.IAEAphsp`. Para cada partícula, se almacena la energía (E), el peso estadístico (w), las tres componentes de la posición (x, y, z), los cosenos directores del momento lineal (p_u, p_v, p_w) y algunas variables opcionales, ya sean representadas por números enteros (*extraints*) o por números reales de coma flotante (*extrafloats*). Cualquiera de estas variables puede declararse como un valor constante para ahorrar espacio durante el almacenamiento.

En nuestro caso particular, se define la coordenada z como constante ya que suponemos que en la simulación el plano de espacio de fases se define perpendicular al eje z , que es el establecido habitualmente en radioterapia como el eje de propagación del haz. Además, siempre se activa la variable `n_stat`, mencionada anteriormente. Con esta configuración, el registro de cada partícula en el archivo `IAEAphsp` ocupa 33 bytes en memoria.

Por otra parte, esta clase `G4IAEAphspWriter` considera la posibilidad de que durante la simulación la misma partícula cruce varias veces el plano de espacio de fases. Para ello, incorpora una salvaguarda de manera que cada partícula sólo se almacena la primera vez que cruza dicho plano.

Finalmente, hemos de comentar que en la versión actual los espacios de fases creados con esta clase se generan al final de la simulación. En una próxima versión se contemplará la posibilidad de almacenar la información acumulada cada número determinado de eventos para prevenir pérdidas de información debidas, por ejemplo, a cortes de suministro eléctrico.

Uso de esta clase

Para utilizar la clase `G4IAEAphspWriter` en una aplicación GEANT4 concreta, se deben realizar los cuatro pasos siguientes:

1. Definir en la aplicación estas tres acciones de usuario: “Run Action”, “Event Action” y “Stepping Action”.
2. En la clase “Run Action” debemos definir sus métodos `BeginOfRunAction()` y `EndOfRunAction()` realizando las siguientes acciones:
 - Dentro del método `BeginOfRunAction()` hay que utilizar el método `SetZStop()` de la clase `G4IAEAphspWriter` por cada plano de espacio de fases que vayamos a definir, pasando el valor de la coordenada z como argumento en cada llamada a este método. Tras esto, se debe invocar el método también denominado `BeginOfRunAction()` de la clase `G4IAEAphspWriter`.
 - Por otro lado, en el método `EndOfRunAction()` únicamente hay que llamar al método del mismo nombre definido en la clase `G4IAEAphspWriter`.

3. En la clase “Event Action” es necesario que la definición del método `BeginOfEventAction()` incluya una llamada al método del mismo nombre de la clase `G4IAEAphspWriter`.
4. Finalmente, en la clase “Stepping Action” debemos realizar una acción similar a la del paso anterior, incluyendo en la definición del método `UserSteppingAction()` una llamada al método del mismo nombre de la clase `G4IAEAphspWriter`.

Al igual que en el caso de la lectura de archivos *IAEAphsp*, en el manual de usuario disponible en la página web del OIEA (Cortés-Giraldo et al., 2009) se encuentra una guía de referencia de esta clase junto con explicaciones más detalladas y ejemplos.

3.3. Resultados

El funcionamiento de las clases presentadas en este capítulo ha sido comprobado usando algunos de los archivos *IAEAphsp* disponibles en la base de datos del OIEA (véase en la página web del proyecto). Para ello, diseñamos una aplicación de prueba GEANT4 cuyo objetivo era, en primer lugar, generar las partículas primarias a partir de un espacio de fases determinado y, en segundo lugar, crear otro archivo nuevo *IAEAphsp* definido en la misma posición z correspondiente al archivo *IAEAphsp* inicial. Gracias a esta prueba podemos verificar el correcto funcionamiento de estas clases, puesto que el nuevo archivo generado debe ser idéntico al ya existente en la base de datos.

En la práctica, no es posible definir el plano de espacio de fases exactamente en el mismo plano donde se crean las partículas, ya que la clase `G4IAEAphspWriter` necesita que las partículas *crucen* dicho plano para que sean almacenadas en el archivo *IAEAphsp*. Ante esto, la geometría de esta aplicación GEANT4 consiste en una lámina constituida por vacío, de $1 \mu\text{m}$ de espesor en la dimensión z . Esta lámina se centra en la posición $z = z_{\text{phsp}}$, donde z_{phsp} es el valor de la coordenada z en el archivo original *IAEAphsp*, de manera que todas las partículas sean creadas en el plano central de esta lámina. Las dimensiones transversales de la lámina son lo suficientemente grandes como para asegurar que todas las partículas se generen dentro de ella. Por otra parte, la lista de física sólo contempla el proceso de transporte de partículas, puesto que en esta ocasión sólo nos interesa transportarlas la distancia necesaria para que crucen el plano de espacio de fases.

Con esta configuración, la simulación del transporte de todas las partículas se realiza en un paso hasta llegar a la frontera de la lámina, que se encuentra en $z = z_{\text{phsp}} + 0,5 \mu\text{m}$. Entonces, usando la clase `G4IAEAphspWriter` definimos un nuevo plano de espacio de fases en $z_{\text{score}} = z_{\text{phsp}} + 0,25 \mu\text{m}$, de manera que todas las partículas crucen el plano de espacio de fases al realizar este paso pequeño de longitud $0,5 \mu\text{m}$. Finalmente,

para representar los histogramas que se muestran a continuación usamos la herramienta de análisis de datos ROOT.^c

Esta simulación de prueba se realizó con dos de los espacios de fases compilados en la base de datos del OIEA; concretamente consideramos los campos $3 \times 3 \text{ cm}^2$ y $10 \times 10 \text{ cm}^2$ correspondientes al acelerador PRIMUS de Siemens en modo de fotones de 6 MV de energía nominal (identificados en la base de datos con los códigos PHSP 109 y PHSP 100, respectivamente). Ambos espacios de fases, generados con el código BEAMnrc/EGSnrc, definen el plano de espacio de fases en $z_{\text{phsp}} = 95 \text{ cm}$. En las simulaciones que generaron ambos archivos *IAEAphsp* se aplicó la técnica de reducción de varianza conocida como DBS (*Directional Bremsstrahlung Splitting*), que consiste en multiplicar por un número determinado, N_{split} , el número de fotones que han sido generados por radiación de frenado de electrones y que apuntan a una determinada región de interés. Obviamente, el peso estadístico de estos fotones debe ser $1/N_{\text{split}}$ para evitar sesgos en el resultado. En estas simulaciones, la región de interés la define un círculo contenido en el plano $z = 100 \text{ cm}$ y centrado en el origen de coordenadas del mismo. Para el campo $3 \times 3 \text{ cm}^2$ el radio de este círculo era de 4 cm, mientras que para el campo $10 \times 10 \text{ cm}^2$ el radio era de 8 cm.

La Fig. 3.3 muestra las distribuciones que caracterizan a los fotones del campo $3 \times 3 \text{ cm}^2$. Todas ellas se generaron por lectura directa tanto del archivo *IAEAphsp* original como del creado con GEANT4. El histograma superior representa la distribución de energía correspondiente a los fotones cuya coordenada radial, r , es menor de 1 cm cuando cruzan el plano del espacio de fases. Por su parte, el histograma central representa el perfil en la dirección x correspondiente a los fotones que cumplen la condición $|y| < 5 \text{ mm}$. La forma de ambas gráficas es la que cabía esperar. Por último, el histograma inferior muestra la distribución radial de todos los fotones almacenados en el espacio de fases. En este último caso se puede observar que para $r > 4 \text{ cm}$ el valor de las incertidumbres aumenta. Este efecto está asociado al hecho de aplicar DBS para $r < 4 \text{ cm}$, ya que entonces esta técnica de reducción de varianza no ha sido aplicada para estos fotones, lo cual provoca que su peso estadístico sea mayor en comparación al de aquéllos dentro de la región $r < 4 \text{ cm}$. En consecuencia, la incertidumbre estadística aumenta fuera de la región de interés. En el argot se suele referir a estos fotones como fotones gordos (*fat photons*).

La comparación directa entre el archivo original y el creado por GEANT4 fue totalmente satisfactoria en el sentido de que todos los histogramas representados son idénticos, el número de partículas almacenado es el mismo en ambos casos (3 109 575) e igualmente ocurre con toda la información estadística presente en el archivo de cabecera del espacio de fases.

La Fig. 3.4 muestra los mismos histogramas que se representan en la

^cPágina web de ROOT: <http://root.cern.ch>.

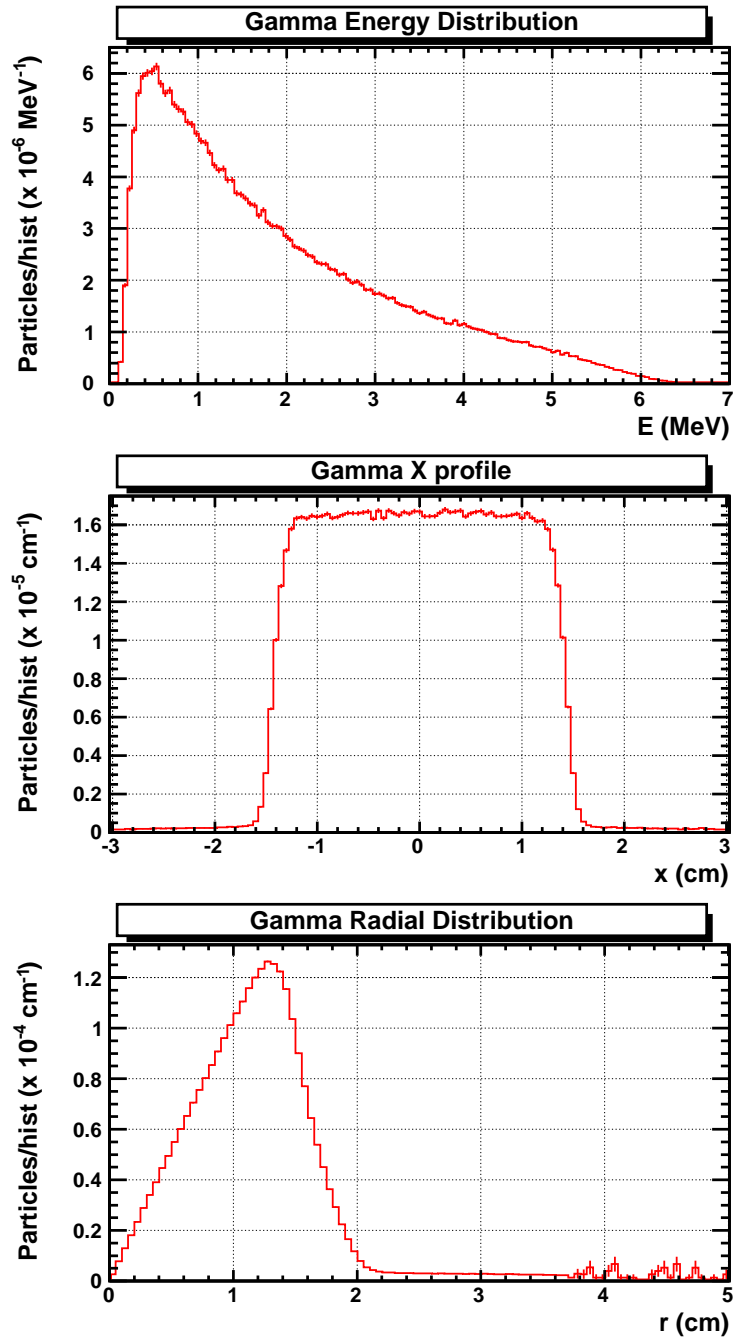


Figura 3.3: Histogramas obtenidos durante a partir de un archivo *IAEAphsp* correspondiente a un campo de radiación de 3×3 cm² para $z = 95$ cm (código PHSP 109). Las barras de error representan la incertidumbre estadística asociada a cada *bin*. Superior: distribución de energía de los fotones que atraviesan el plano a una distancia radial menor de 1 cm. Central: perfil en la dirección x de los fotones con $|y| < 0,5$ cm. Inferior: distribución radial de los fotones.

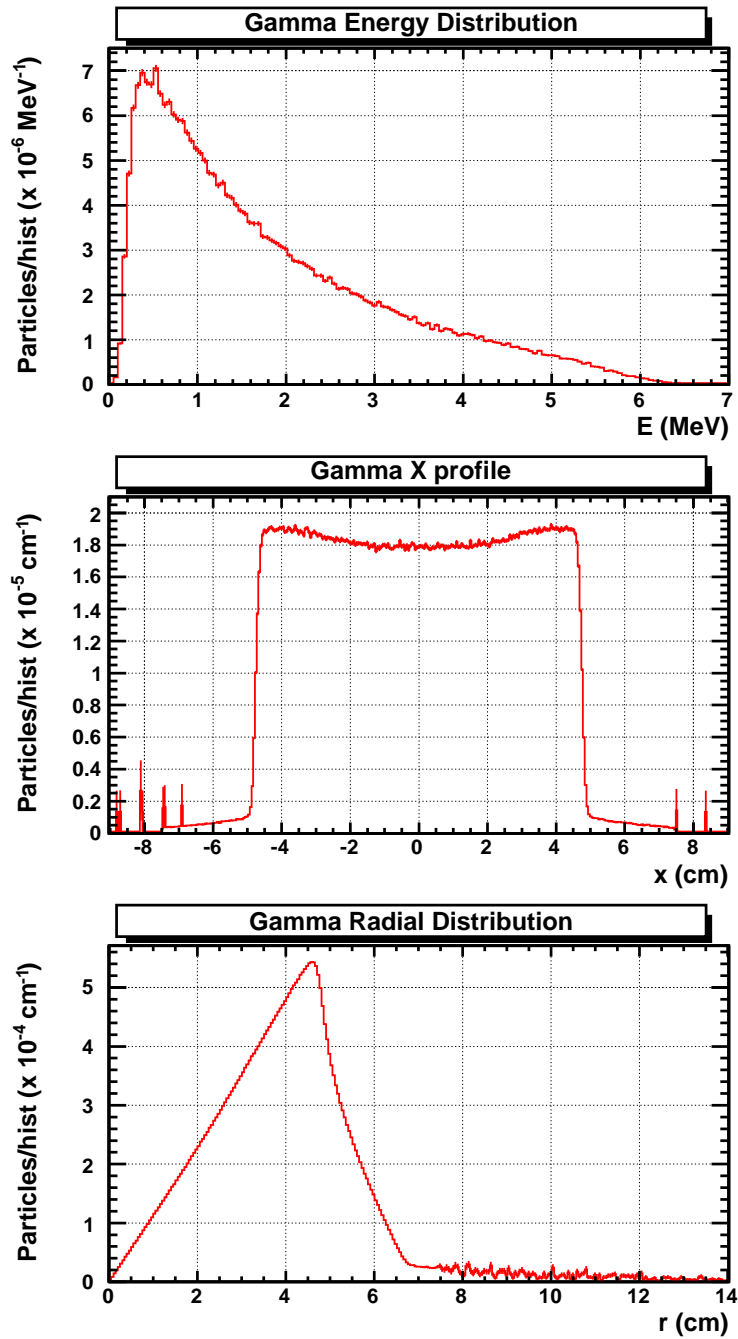


Figura 3.4: Histogramas obtenidos a partir de un archivo *IAEAphsp* correspondiente a un campo de radiación de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ para $z_{\text{phsp}} = 95 \text{ cm}$ (código PHSP 100). Las distribuciones representadas se han obtenido con los mismos criterios que en la Fig. 3.3.

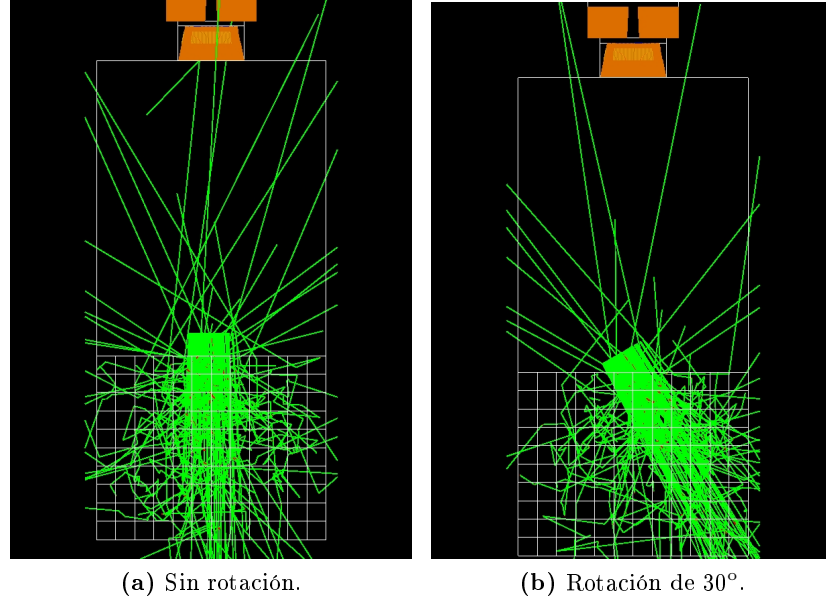


Figura 3.5: Ilustraciones gráficas como ejemplo de simulación que usa la clase *G4IAEAphspReader*. En la parte superior de ambas imágenes pueden observarse las mordazas y el colimador multiláminas del cabezal. En la parte inferior se observa la incidencia sobre un maniquí de agua voxelizado de 100 fotones generados a partir de un archivo *IAEAphsp*. El ángulo de rotación aplicado al *gantry* se especifica en cada caso.

Fig. 3.3 pero usando el espacio de fases correspondiente a un campo de $10 \times 10 \text{ cm}^2$, también para $z_{\text{phsp}} = 95 \text{ cm}$. Como en el caso anterior, los histogramas representados tienen la forma que se esperaba. En esta figura se vuelve a apreciar una incertidumbre asociada mayor para $r > 8 \text{ cm}$, que de nuevo corresponde al radio de la región de interés para aplicar DBS. Igualmente, el nuevo archivo *IAEAphsp* generado por GEANT4 almacena el mismo número de partículas que el archivo original (39 641 628) así como idéntico resumen estadístico.

Para concluir, mostramos en la Fig. 3.5 un ejemplo ilustrativo tomado de una aplicación GEANT4 que simula el cabezal del acelerador PRIMUS de Siemens (Cortés-Giraldo et al., 2010). En las ilustraciones se muestra el resultado de lanzar 100 fotones creados a partir de un archivo *IAEAphsp*, previamente generado a la salida del cabezal (a 90 cm de la fuente), sobre el maniquí de agua colocado a 100 cm de la fuente y cuyo voxelizado se representa con menos resolución para mejorar la claridad de la imagen. En la Fig. 3.5a se ha utilizado el espacio de fases tal cual, mientras que en la Fig. 3.5b se ha aplicado una rotación de 30° sobre el eje de giro del *gantry*. En cualquier caso, es especialmente llamativo ver cómo las partículas se generan en un plano “imaginario” sobre el maniquí.

De cualquier modo, los detalles de esta simulación GEANT4 se presentarán en el capítulo 5 de este trabajo, donde se recurre con frecuencia a esta herramienta y que, como veremos, permite ahorrar el tiempo de simulación necesario para obtener resultados a un nivel estadístico aceptable. Asimismo, en los capítulos 8 y 9 volvemos a hacer uso de esta herramienta en aplicaciones fuera del campo de la radioterapia, demostrando así la versatilidad y utilidad del trabajo presentado en este capítulo.

3.4. Conclusiones

Se ha desarrollado un código que permite leer y generar archivos de espacio de fases en formato del OIEA (*IAEAphsp*) con aplicaciones de GEANT4. Este desarrollo consiste en dos clases, *G4IAEAphspReader* y *G4IAEAphspWriter*, diseñadas de manera que sólo usan los métodos públicos de las clases desarrolladas por el OIEA. De esta manera podemos garantizar la estabilidad de este desarrollo frente a cambios internos en el formato del OIEA y la portabilidad entre aplicaciones GEANT4.

La clase *G4IAEAphspReader* respeta las correlaciones entre partículas y ofrece al usuario la posibilidad de realizar divisiones en el archivo para su lectura en simulaciones ejecutadas en paralelo y la posibilidad de aplicar las transformaciones espaciales (traslaciones y rotaciones) que sean necesarias. La clase *G4IAEAphspWriter* genera los archivos *IAEAphsp* respetando las correlaciones y conservando la variable *n_stat*.

Este código está a disposición de cualquier usuario de GEANT4 en la página web principal de este proyecto del OIEA (<http://www-nds.iaea.org/phsp>).

Capítulo 4

Desexcitación nuclear en GEANT4

RESUMEN: En GEANT4 se utilizan diversos modelos para desexcitar los fragmentos nucleares formados por la interacción inelástica entre un proyectil hadrónico y un núcleo del material. El modelo de núcleo precompuesto basado en el modelo de excitones es el responsable de emitir nucleones y fragmentos ligeros durante la etapa de pre-equilibrio. La desexcitación en la etapa de equilibrio se realiza considerando la competición entre diversos mecanismos: evaporación de nucleones y fragmentos ligeros, ruptura (*break-up*) de Fermi, multifragmentación estadística, fisión y emisión de fotones. En este capítulo, describimos un resumen de modificaciones realizadas recientemente en ambas etapas, las cuales son validadas frente a datos experimentales publicados.

ABSTRACT: GEANT4 uses several models to de-excite the nuclear fragments created by the inelastic interaction between a hadronic projectile and a target nucleus. The precompound nucleus model based on the exciton model is the responsible of the emission of nucleons and light fragments during the pre-equilibrium stage. Equilibrium de-excitation is performed by competition of different mechanisms: evaporation of nucleons and light fragments, Fermi break-up, statistical multifragmentation, fission and photon emission. In this chapter, we describe a summary of the modifications included recently in both stages, which have been validated against published experimental data.

4.1. Introducción

El código GEANT4 incluye diversos modelos para la simulación de las interacciones entre los hadrones y los núcleos atómicos del material por el

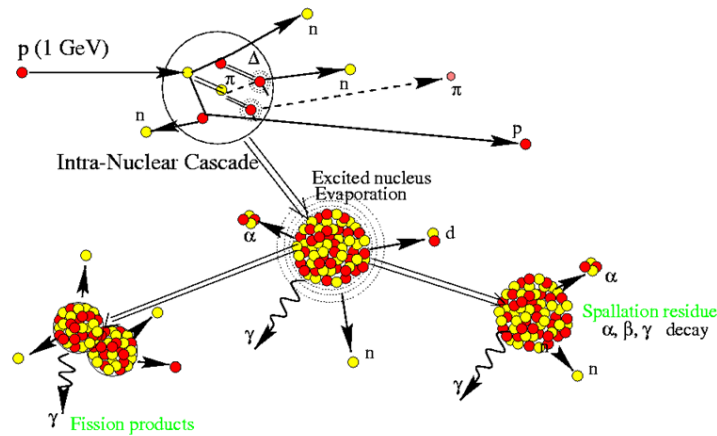


Figura 4.1: Cascada intra-nuclear provocada por la incidencia de un protón a 1 GeV. La posterior desexcitación del núcleo compuesto puede evaporar partículas o provocar una fisión del mismo. [Tomada de <http://nds121.iaea.org/alberto/mediawiki-1.6.10/index.php>]

que viajan. En concreto, para colisiones inelásticas a energías por debajo de los 10 GeV incluye generadores de fragmentos en el estado final de dicha interacción, en particular uno basado en el modelo de cascada binaria intra-nuclear, BIC (*Binary Cascade*) (Folger et al., 2004), y otro basado en el modelo cuántico de dinámica molecular, QMD (*Quantum Molecular Dynamics*) (Koi, 2008). En BIC la etapa final de la cascada intra-nuclear se reproduce con el modelo de pre-equilibrio (núcleo precompuesto) y posterior desexcitación del núcleo compuesto. En la Fig. 4.1 se muestra un esquema ilustrativo de esta secuencia. Por el contrario, en QMD la etapa final se reproduce directamente mediante los modelos de desexcitación de equilibrio. Para la descripción de las reacciones nucleares que se llevan a cabo en fenómenos de espalación y en tratamientos de terapia con hadrones (protones o iones ligeros) se considera que éstos son los modelos adecuados para describir las reacciones nucleares que se llevan a cabo en fenómenos de espalación y en tratamientos de terapia con hadrones cargados (protones e iones ligeros).

En el campo de la física nuclear se han realizado numerosos cálculos que utilizaban modelos dependientes de parámetros cuyos valores eran ajustados fenomenológicamente a los datos experimentales en cada situación. Sin embargo, hemos comprobado que mediante la utilización de modelos con alto contenido físico es posible obtener resultados que en general se ajustan a los datos experimentales, usando prescripciones globales en sus parámetros. Este hecho muestra la fiabilidad tanto de dichos modelos como de las prescripciones globales tomadas para calcular observables como son, por ejemplo, la sección eficaz de reacción inversa o la probabilidad de transición.

El código GEANT4 fue uno de los participantes en la comparación global con datos experimentales (*benchmark*) organizada por el OIEA para los modelos de reacciones nucleares de espalación,^a aportando resultados de simulación para todos los datos experimentales proporcionados por dicho organismo, incluyendo producción de neutrones, partículas ligeras cargadas, isótopos y piones, junto con funciones de excitación hasta los 3 GeV. Como consecuencia de esta reunión se ha llevado a cabo una serie de mejoras de los modelos nativos de GEANT4 para las etapas de pre-equilibrio y posterior desexcitación.

En este capítulo comparamos los resultados obtenidos con estos modelos frente a las predicciones realizadas con el modelo de cascada de Bertini (Heikkinen et al., 2003), que incluye sus propios modelos de pre-equilibrio y desexcitación, y algunos de los datos experimentales estudiados en el mencionado *benchmark*.

Estructura de este capítulo

En la sección 4.2 se presenta una revisión general de los modelos utilizados para reproducir la emisión en las etapas de pre-equilibrio y equilibrio de un núcleo compuesto. Dicha revisión incluye determinados aspectos de la versión 9.2.p01 de GEANT4 que debían mejorarse, los cuales han dado lugar a un trabajo de desarrollo cuyos resultados se presentan en la sección 4.3. Posteriormente, en la sección 4.4 presentamos las conclusiones.

4.2. Revisión de los modelos

4.2.1. Pre-equilibrio

El modelo nativo de pre-equilibrio de GEANT4 está basado en el modelo semiclásico de excitones (Griffin, 1966) en su versión del CEM (*Cascade Exciton Model*) (Gudima et al., 1983). La etapa de núcleo precompuesto se extiende hasta que el sistema nuclear alcanza el equilibrio en el sentido de que la energía de excitación ha sido repartida entre todos los grados de libertad de dicho sistema. Durante esta etapa, el núcleo precompuesto se caracteriza por el número másico, A , el número atómico, Z , su energía de excitación, E^* , y el número de excitones, n , que se obtiene sumando el número de partículas en estados por encima del nivel de Fermi, p , y el número de huecos por debajo de ese nivel, h . Este modelo considera todas las posibles interacciones en las que el número de excitones cambia un valor $\Delta n = 0, \pm 2$ en competición con la emisión de partículas y fragmentos ligeros (neutrones, protones, deuterones, núcleos de tritio, ^3He y ^4He).

^aIAEA Benchmark of Spallation Models, <http://nds121.iaea.org/alberto/mediawiki-1.6.10/index.php>.

La transición al estado de equilibrio estadístico se caracteriza por un número de excitones de equilibrio, n_{eq} , en el todas las transiciones que pueden tener lugar son equiprobables. Por lo tanto, n_{eq} está fijado por la condición

$$\lambda_{+2}(n_{\text{eq}}, E^*) = \lambda_{-2}(n_{\text{eq}}, E^*) , \quad (4.1)$$

donde $\lambda_{\pm 2}$ es la probabilidad de transición por unidad de tiempo a un estado con ± 2 excitones.

Las probabilidades de transición (un ingrediente clave del modelo) han sido calculadas tanto de manera semi-microscópica (Gudima et al., 1983) como mediante una parametrización estándar de los elementos de matriz (Gupta, 1981). En el caso de espectros de emisión de partículas doblemente diferenciales en energía y ángulo, ambos métodos conducen a resultados similares. Sin embargo, a la hora de reproducir la producción isotópica en reacciones típicas de espalación (Quesada, 2010) el método semi-microscópico (Gudima et al., 1983) produce mejores resultados. Por lo tanto, hemos elegido éste último como modelo por defecto.

A partir de (4.1) se puede obtener de forma muy aproximada el resultado

$$n_{\text{eq}} \simeq \sqrt{2gE^*} , \quad (4.2)$$

donde g es la densidad de niveles de partículas individuales. En la práctica, el factor 2 que aparece dentro de la raíz cuadrada es considerado como un parámetro ajustable en evaluaciones de datos nucleares.

Nuestros trabajos han puesto de manifiesto que se debe ser muy cuidadoso con la estimación (4.2) porque en ciertas circunstancias, como es el caso de proyectil incidiendo en blanco pesado a energías a las que los mecanismos de pre-equilibrio son significativos, la condición (4.1) se alcanza para $n < n_{\text{eq}}$. Por lo tanto, en GEANT4 hemos implementado directamente la condición (4.1), físicamente consistente, a pesar de penalizar un poco la rapidez del cálculo.

La sección eficaz de reacción inversa es otro ingrediente clave en el cálculo de las probabilidades de emisión de partículas. La formulación implementada inicialmente en el código GEANT4 (Dostrovsky et al., 1959) fue realizada antes de disponer de los datos experimentales obtenidos desde la década de 1960. Por lo tanto, varias parametrizaciones mucho más modernas, unas realizadas a partir de valores obtenidos experimentalmente (Wellisch y Axen, 1996) y otras calculadas a partir de potenciales ópticos ajustados a los datos disponibles de reacciones nucleares (Chatterjee et al., 1981; Kalbach-Walker, 2001) han sido incluidas como opciones en el código.

4.2.2. Desexcitación

El modelo de desexcitación nuclear implementado en GEANT4 incluye varios modelos semiclásicos que actúan definiendo canales competitivos de

reacción. A saber:

- Evaporación de nucleones y fragmentos ligeros. Hay dos opciones:
 - Modelo de Weisskopf-Ewing (Weisskopf y Ewing, 1940), evaporación de nucleones y núcleos ligeros hasta partículas α .
 - Según el modelo de evaporación generalizada, GEM (*Generalized Evaporation Model*) (Furihata et al., 2001), evaporación de fragmentos nucleares de masa intermedia, en inglés IMF (*Intermediate Mass Fragment*), hasta el ^{28}Mg ($Z \leq 12$, $A \leq 28$).
- Evaporación de fotones:
 - Discreta, de acuerdo a probabilidades de transición E1, M1 y E2 tabuladas.
 - Continua, a partir de la distribución de la resonancia dipolar gigante E1.
- Fisión, basado en el modelo semiclásico Bohr-Wheeler (Bohr y Wheeler, 1939).
- Multifragmentación estadística (Bondorf et al., 1995).
- Mecanismo de ruptura, *break-up*, de Fermi (Fermi, 1950).

Como se ha comentado previamente, a raíz de la reciente participación en el *benchmark* de reacciones nucleares de espalación del OIEA se ha llevado a cabo una revisión de los modelos nucleares de bajas energías implementados en GEANT4, especialmente en la etapa de la desexcitación de equilibrio. Ya desde un principio, a partir del análisis de la producción de isótopos en determinadas reacciones, quedó patente que había problemas en la versión de GEANT4 existente en aquel momento (versión 9.2.p01), dado que:

- La reproducción de fragmentos de masa intermedia (núcleos ligeros con $2 < Z \leq 12$ y $A \leq 28$) calculada con GEANT4 no era la correcta.
- La implementación del modelo de fisión era incapaz de reproducir la altura y forma de la *campana* de fisión.
- La pendiente de la región de espalación (el *hombro* que aparece para fragmentos más pesados) era demasiado elevada.

Para ello, hemos repasado el algoritmo de desexcitación implementado en la clase `G4ExcitationHandler`, que es la encargada de seleccionar el canal de desexcitación de acuerdo con los fundamentos de cada modelo. La Fig. 4.2 muestra, en forma de diagrama de flujo, la estructura del algoritmo implementado en la versión actual del código (versión 9.4). Los pasos que se consideran son:

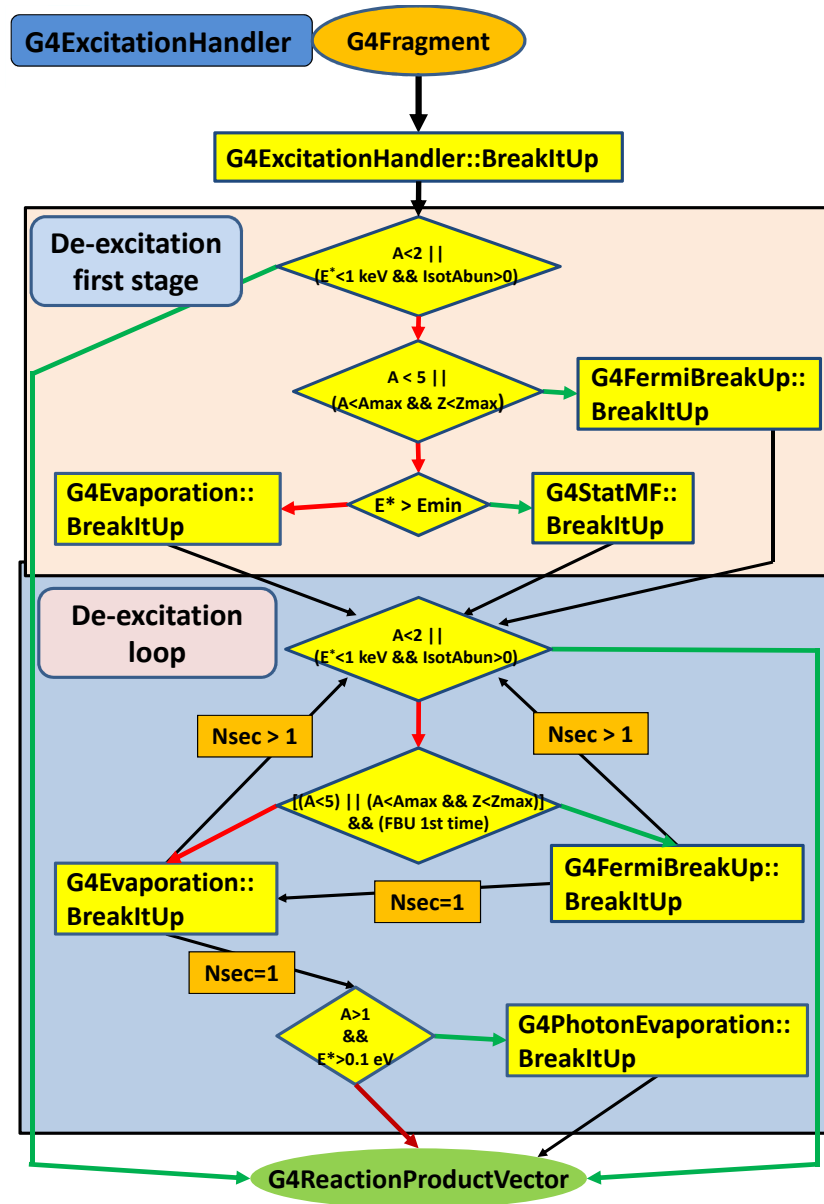


Figura 4.2: Diagrama de flujo del algoritmo de desexcitación implementado en la versión 9.4 de GEANT4. Las flechas verdes indican el flujo en caso afirmativo de cada condición (rombos). Las flechas rojas indican el flujo en caso contrario.

1. Se estudia el número de nucleones, A , del núcleo compuesto. Si el núcleo compuesto es un nucleón ($A < 2$), entonces se almacena directamente como producto de reacción en un vector representado por un objeto de la clase `G4ReactionProductVector`. Lo mismo se aplica, en caso de que el núcleo compuesto exista en la naturaleza ($IsotAbun > 0$) y su energía de excitación, E^* , sea menor de 1 keV. En caso de no satisfacerse ninguna de las dos condiciones anteriores, se aplica el paso siguiente.
2. En caso de que el número de nucleones, A , y el número de protones, Z , satisfagan las condiciones $A \leq A_{\max}^{\text{FBU}}$ y $Z \leq Z_{\max}^{\text{FBU}}$, se desexcita mediante el modelo de *break-up* de Fermi. También se aplica en cualquier caso si $A < 5$ (para romper fragmentos ligeros “exóticos” excitados que pudieran haberse originado en etapas previas, tales como ${}^5_1\text{H}$). En caso contrario se aplica el paso siguiente. Los valores por defecto son $A_{\max}^{\text{FBU}} = 16$ y $Z_{\max}^{\text{FBU}} = 8$, aunque ambos pueden cambiarse de manera externa desde la lista de física.
3. Si la energía de excitación E^* es mayor que un determinado umbral E_{\min}^{SMF} , se aplica desexcitación mediante el modelo de multifragmentación estadística. En caso contrario se considera la emisión de nucleones por evaporación. En la versión actual, $E_{\min}^{\text{SMF}} = 3$ MeV/u.
4. Para cada uno de los fragmentos obtenidos se consideran las condiciones descritas en el paso 1. En caso de no cumplirse ninguna, se aplica el paso siguiente.
5. Si el fragmento cumple las condiciones de aplicación del mecanismo de *break-up* de Fermi y éste no se consideró en el paso 2, entonces se modela la desexcitación a través de dicho mecanismo. En caso de no cumplirse alguna de las dos condiciones anteriores, se procede a la desexcitación por evaporación de nucleones.
6. Si en el paso anterior se consiguió romper el núcleo, indicado porque el número de fragmentos secundarios, N_{sec} , es mayor que la unidad, se le vuelve a aplicar a cada fragmento el paso 4. En caso contrario, ($N_{\text{sec}} = 1$), si el mecanismo de desexcitación fue el *break-up* de Fermi se intenta desexcitar el núcleo compuesto por evaporación y se vuelve a estudiar si se produce más de un fragmento. En el caso de que el mecanismo de evaporación no consiga producir nuevos fragmentos, se realiza el siguiente paso.
7. En este punto se verifica que el sistema esté compuesto por más de un nucleón ($A > 1$) y tenga energía de excitación $E^* > 0,1$ eV. Si ambas condiciones se cumplen, se considera la desexcitación por emisión de

fotones, cuyos productos finales se almacenan. En caso contrario, se almacena directamente el fragmento como producto final.

Sobre la Fig. 4.2, hay que comentar también que la razón por la que el mecanismo de desexcitación por fisión no aparece explícitamente es debido a que compete únicamente con el mecanismo de evaporación de nucleones. Por lo tanto, en este procedimiento “evaporación” realmente significa estudiar la desexcitación mediante evaporación o fisión.

Teniendo en cuenta la secuencia mostrada en esta figura, en las reacciones de espalación referidas anteriormente el núcleo compuesto original es demasiado pesado para ser desexcitado mediante el mecanismo de Fermi *break-up*, puesto que el núcleo más ligero que se forma es un isótopo de hierro (véase en los resultados, sección 4.3). Asimismo, los núcleos compuestos que se forman son demasiado fríos como para poder considerar el modelo de multifragmentación estadística. Por lo tanto, el único candidato para realizar la evaporación de fragmentos de masa intermedia que se observa experimentalmente es el GEM (Furihata et al., 2001). No obstante, ha sido necesario un esfuerzo intenso de desarrollo para conseguir la plena operatividad del modelo dentro del código para reproducir los datos experimentales de producción de fragmentos de masa intermedia.

Sobre el segundo problema existente en la versión anterior de GEANT4 (9.2.p01), uno debe considerar un aspecto importante resaltado por el grupo del LANL que trabaja en el desarrollo del código MCNPX (Mashnik et al., 2008): en los generadores de estados finales de las interacciones hadrónicas de nuestros códigos de transporte se implementan simultáneamente diversos modelos, cada uno de ellos dependiente de parámetros ajustados fenomenológicamente, que actualmente se usan en entornos que habitualmente son diferentes de aquéllos en los que se optimizó el modelo originalmente. En otras palabras, se usan en competición con diferentes modelos de mecanismos de desexcitación. Además, la distribución de energía en la población inicial del núcleo compuesto excitado, que puede cambiar fuertemente de un modelo a otro (por ejemplo entre QMD y BIC) es de una importancia crítica para el proceso de desexcitación. Por lo tanto, no hay razón para esperar que esos valores *efectivos* de los parámetros produzcan buenos resultados cuando se usan en diferentes escenarios. De acuerdo con estas ideas, hemos realizado un ajuste particular a los parámetros de la fórmula de Bohr-Wheeler. De acuerdo con esta teoría, la probabilidad de fisión por unidad de tiempo, W_{fis} , es proporcional a la densidad de niveles en el punto de silla, $\rho_{\text{fis}}(U)$,

$$W_{\text{fis}} = \frac{1}{2\pi\hbar\rho(U)} \int_0^{U_f - B_{\text{fis}}} \rho_{\text{fis}}(U_f - B_{\text{fis}} - T) dT, \quad (4.3)$$

donde $U_f = E^* - \Delta_f$ es la energía de excitación disponible de fisión, con Δ_f la energía de apareamiento en fisión y B_{fis} la altura de la barrera de potencial

en el proceso de fisión. Si consideramos la bien conocida expresión (Gilbert y Cameron, 1965)

$$\rho(U) = C \exp(2\sqrt{aU}) , \quad (4.4)$$

donde a es el parámetro de la densidad de niveles, entonces se obtiene el resultado

$$W_{\text{fis}} = \frac{1 + (C_f - 1) \exp(C_f)}{4\pi a_{\text{fis}} \exp(2\sqrt{a(E^* - \Delta)})} , \quad (4.5)$$

donde $C_f = 2\sqrt{a_{\text{fis}}(U_f - B_{\text{fis}})}$, Δ es la energía de apareamiento utilizada en evaporación, a el parámetro de la densidad de niveles del núcleo compuesto y a_{fis} el parámetro de la densidad de niveles en el punto de silla de fisión. Siguiendo este formalismo, en GEANT4 optamos por ajustar el cociente a_{fis}/a de acuerdo con criterios ya publicados (Iljinov et al., 1994).

En cuanto al tercer problema citado, en la sección 4.3 se discute una posible mejora en los resultados como muestra del estado actual de desarrollo. Este trabajo no ha sido incluido aún en la versión oficial de GEANT4.

En consideración a las secciones eficaces de reacción, debemos comentar que aquéllas que se obtuvieron mediante ajuste a datos experimentales, de manera directa o indirecta mediante potenciales ópticos (Chatterjee et al., 1981; Wellisch y Axen, 1996; Kalbach-Walker, 2001), mejoran la descripción de la evaporación de fragmentos ligeros con $Z \leq 2$ y $A \leq 4$ con respecto a la parametrización de Dostrovsky et al. (1959) cuando el mecanismo de evaporación se describe según el modelo de Weisskopf-Ewing (Weisskopf y Ewing, 1940). Sin embargo, en el GEM, que es necesario para conseguir la producción de fragmentos de masa intermedia, se utiliza una generalización de la parametrización de Dostrovsky et al. (Furihata et al., 2001). Por ello, para preservar la mejora obtenida en la descripción de la evaporación de fragmentos ligeros ($Z \leq 2$, $A \leq 4$) e incluir la producción de fragmentos de masa intermedia se ha implementado un nuevo modelo *híbrido* en GEANT4 que usa:

1. Modelo de evaporación de Weisskopf-Ewing para nucleones y fragmentos ligeros ($Z \leq 2$, $A \leq 4$) considerando las secciones eficaces de reacción ajustadas a datos experimentales.
2. GEM para fragmentos más pesados, con $Z \leq 12$ y $A \leq 28$, considerando la parametrización de Dostrovsky et al. (1959).

4.3. Resultados

Las Figs. 4.3-4.11 muestran una selección de los resultados obtenidos para las reacciones contenidas en la base de datos de espalación del OIEA.^b

^bPágina web: <http://nds121.iaea.org/alberto/mediawiki-1.6.10/index.php/Benchmark:ExpDataSets>.

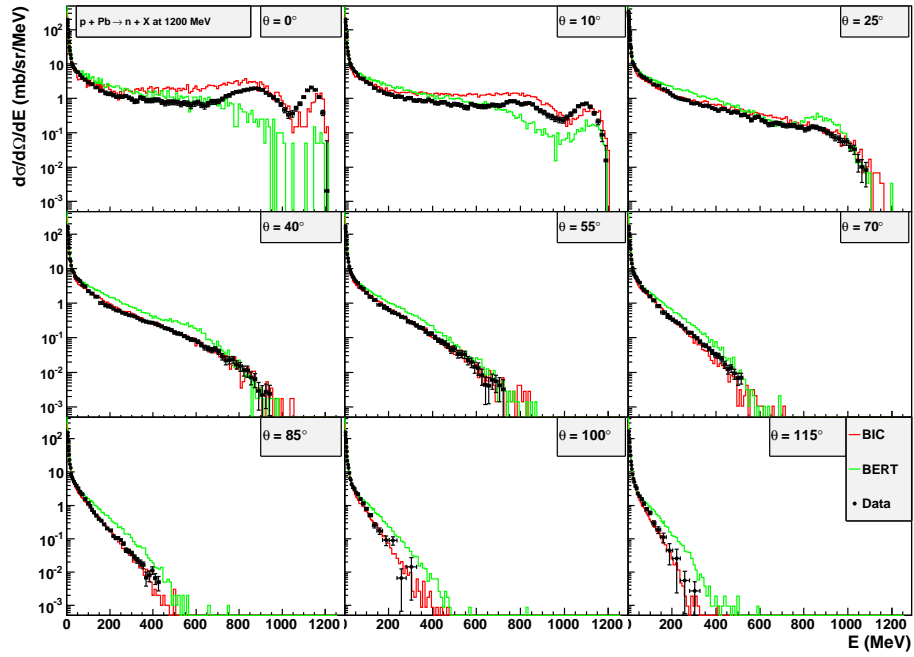


Figura 4.3: Sección eficaz diferencial en ángulo y energía de producción de neutrones en la reacción $p+Pb$ a 1200 MeV. Los puntos negros representan los datos experimentales (Leray et al., 2002) y los histogramas el cálculo con GEANT4 mediante BIC (rojo) y mediante el modelo de Bertini (BERT) de cascada intra-nuclear (verde).

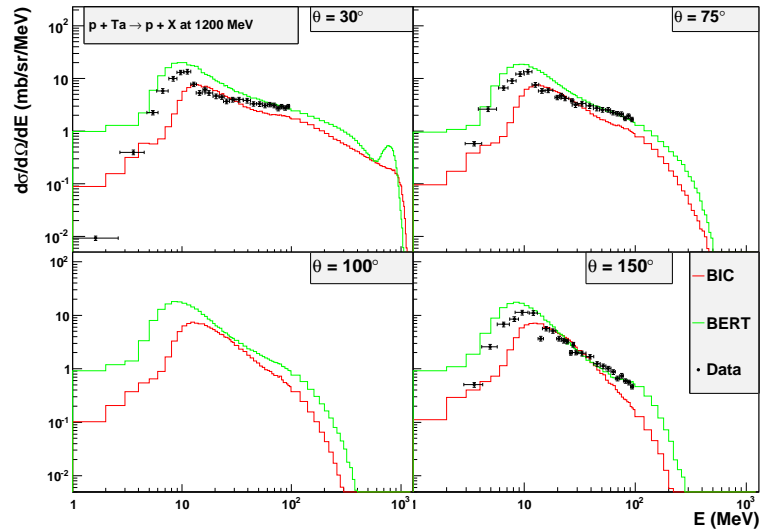


Figura 4.4: Sección eficaz diferencia en ángulo y energía de producción de protones en la reacción $p+Ta$ a 1200 MeV (Herbach et al., 2006). Se sigue el mismo criterio de representación que en la Fig. 4.3.

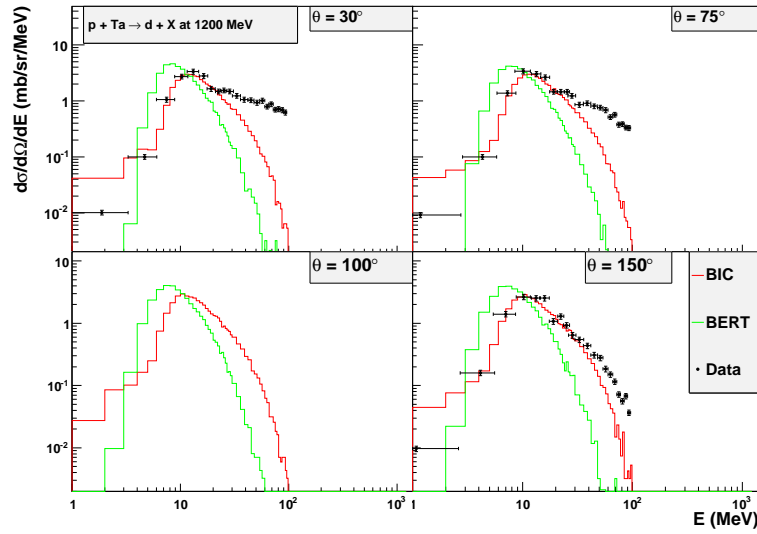


Figura 4.5: Sección eficaz diferencial en ángulo y energía de producción de deuterones en la reacción $p+Ta$ a 1200 MeV (Herbach et al., 2006). Se sigue el mismo criterio de representación que en la Fig. 4.3.

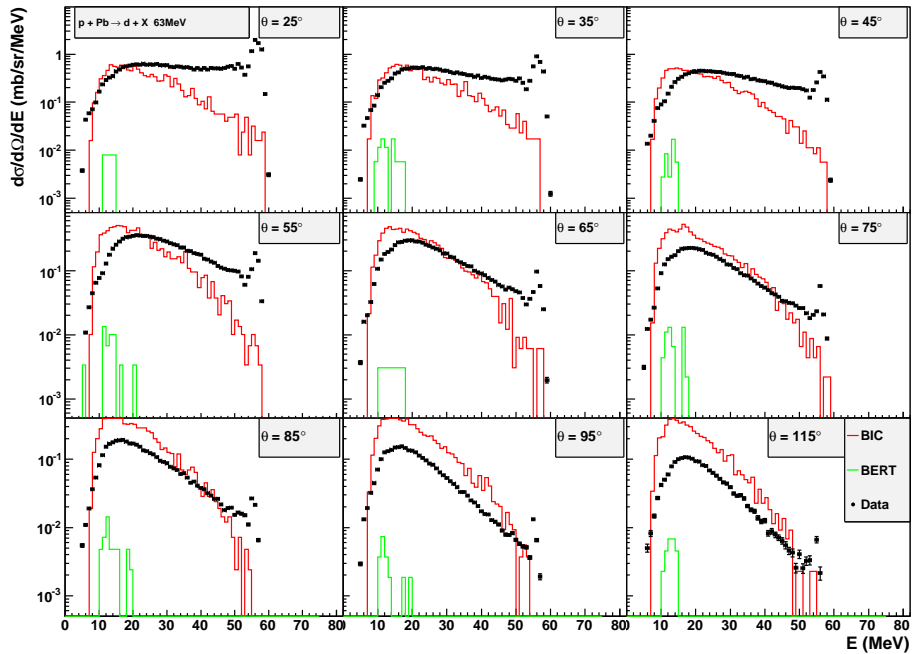


Figura 4.6: Sección eficaz diferencial en ángulo y energía de producción de deuterones en la reacción $p+Pb$ a 63 MeV (Guertin et al., 2005). Se sigue el mismo criterio de representación que en la Fig. 4.3.

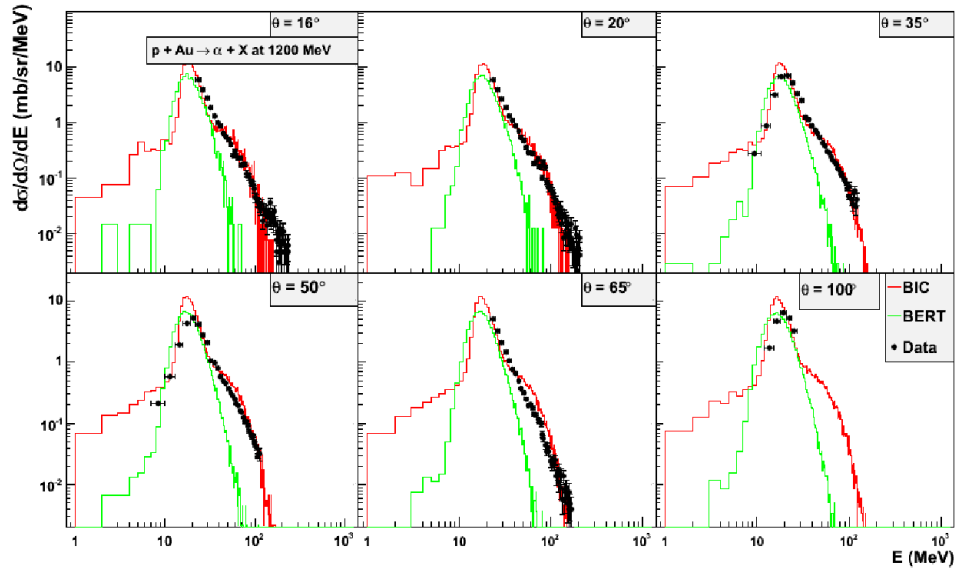


Figura 4.7: Sección eficaz diferencial en ángulo y energía de producción de ${}^4\text{He}$ en la reacción $p+\text{Au}$ a 1200 MeV (Budzanowski et al., 2008). Se sigue el mismo criterio de representación que en la Fig. 4.3.

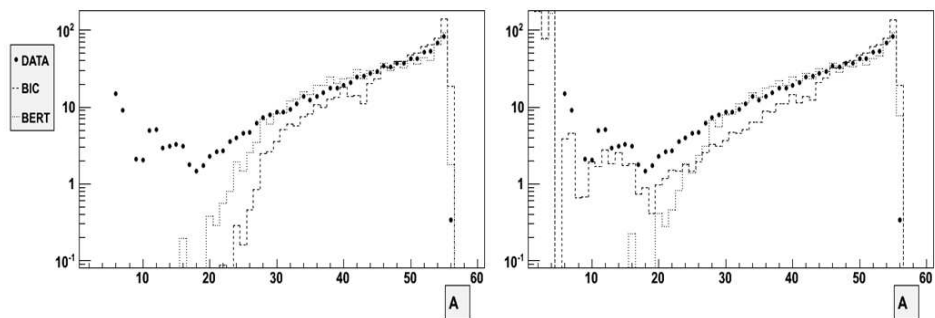


Figura 4.8: Producción isotópica en función del número másico A para la reacción $\text{Fe}+\text{H}$ a 1 GeV en cinemática inversa (Napolitani et al., 2004; Villagrasa-Canton et al., 2007). El convenio de representación es el mismo que el tomado en la Fig. 4.3.

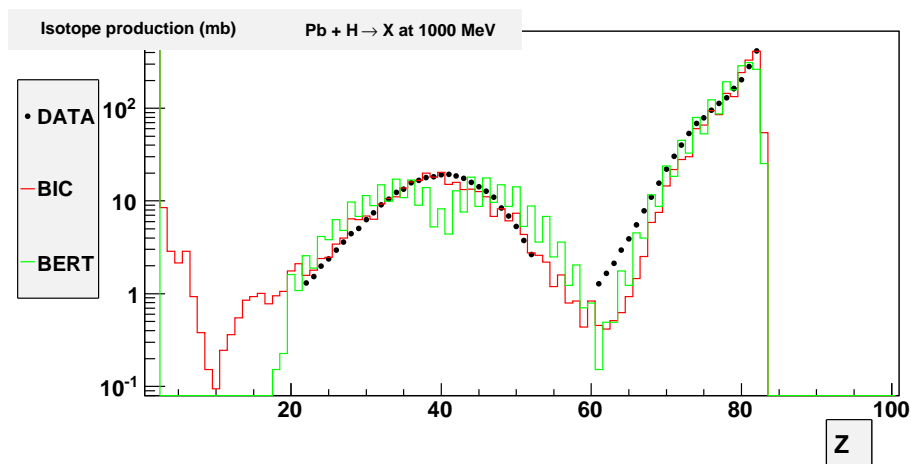


Figura 4.9: Producción isotópica en función del número atómico Z para la reacción $\text{Pb}+\text{H}$ a 1 GeV en cinemática inversa (Enqvist et al., 2001). El convenio de representación es el mismo que el tomado en la Fig. 4.3.

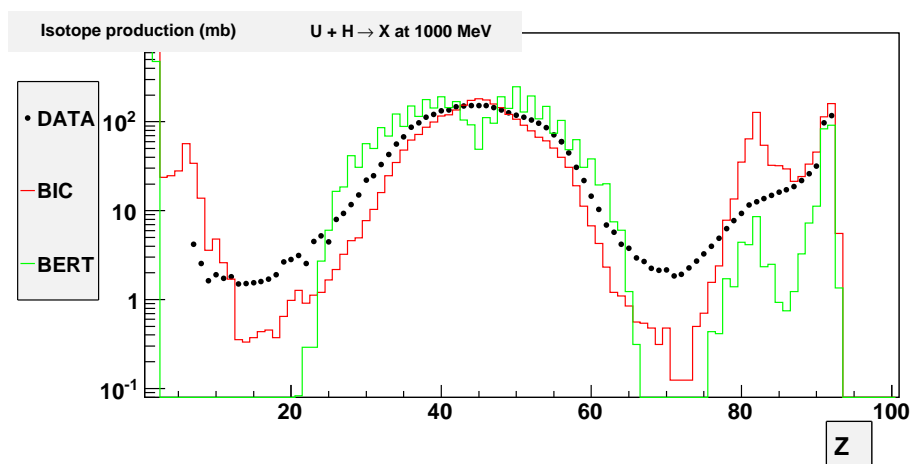


Figura 4.10: Producción isotópica en función del número atómico Z para la reacción $\text{U}+\text{H}$ a 1 GeV en cinemática inversa (Taïeb et al., 2003; Bernas et al., 2003, 2006; Ricciardi et al., 2006). El convenio de representación es el mismo que el tomado en la Fig. 4.3.

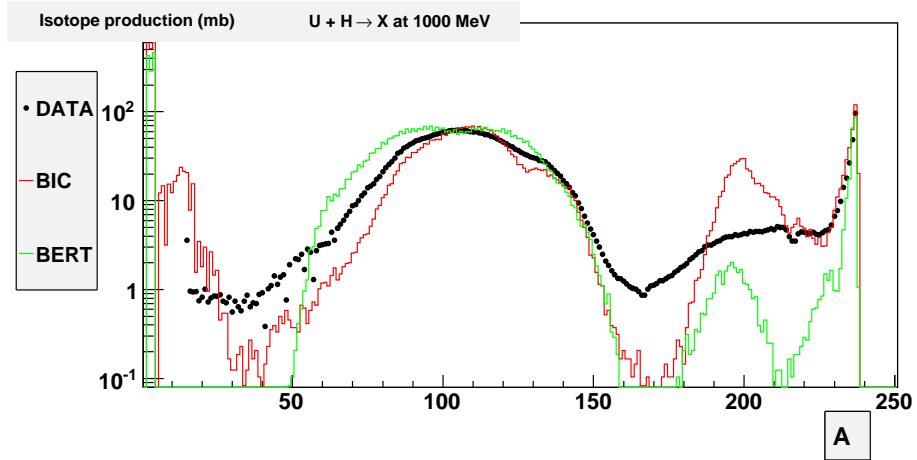


Figura 4.11: Producción isotópica en función del número másico A para la reacción $U+H$ a 1 GeV en cinemática inversa. El convenio de representación es el mismo que el tomado en la Fig. 4.3

Todos estos cálculos se han realizado con la versión 9.3.p01 del código GEANT4 considerando un total de 10^5 eventos para cada caso. En todas ellas se comparan los resultados obtenidos considerando tanto el mecanismo de cascada binaria intra-nuclear basado en el modelo de excitón, BIC, como el modelo de cascada de Bertini, BERT (Heikkinen et al., 2003). A raíz de los resultados se puede afirmar que, en general, el mecanismo de cascada intra-nuclear basado en el modelo de excitones se comporta globalmente mejor que el modelo de Bertini. En algunas ocasiones los resultados de ambos modelos son similares, pero en otros casos el modelo de excitón arroja resultados mucho mejores que Bertini (Figs. 4.3, 4.5-4.7).

Por otra parte, en las Figs. 4.5-4.6 no se observa un ajuste satisfactorio de ninguno de los modelos con respecto a los datos experimentales correspondientes a ángulos pequeños. Estos resultados muestran una limitación típica de estos modelos de cascada intra-nuclear y pre-equilibrio: la ausencia de mecanismos de *coalescencia*. Dicho mecanismo, que consiste en la formación del fragmento previa a su emisión, debe ser considerado adecuadamente para conseguir reproducir la emisión de ciertos fragmentos ligeros, como el deuterón, pero hasta la fecha no se ha incorporado a ningún código Monte Carlo de transporte de radiación. Esta limitación ha sido puesta de manifiesto en el *benchmark* para reacciones de espalación del OIEA. En este sentido, se prevé un esfuerzo de desarrollo por parte del grupo hadrónico de la colaboración GEANT4. A pesar de ello, puede observarse que la producción de fragmentos de ${}^4\text{He}$ no se ve afectada por la ausencia de mecanismos de coalescencia (Fig. 4.7).

Por otra parte, las Figs. 4.9-4.11 muestran los resultados obtenidos tras

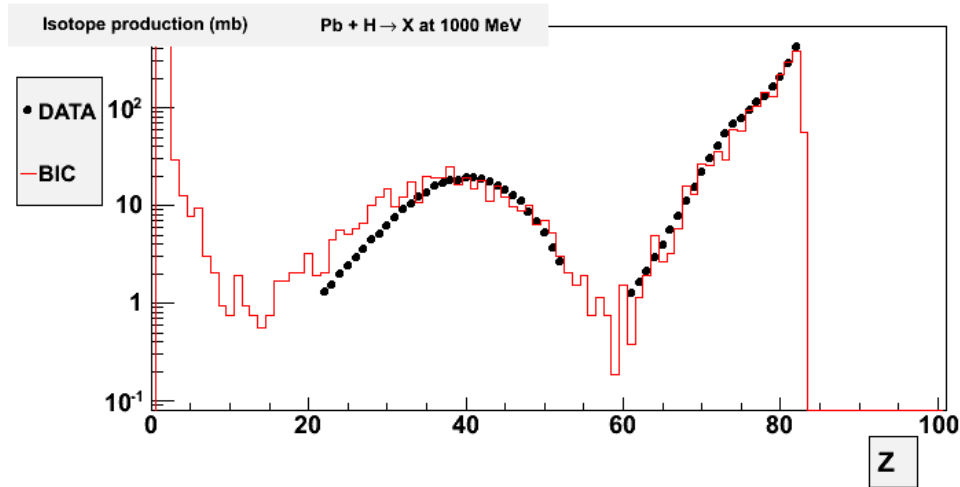


Figura 4.12: Producción isotópica en función del número atómico Z para la reacción $Pb+H$ a 1 GeV en cinemática inversa obtenida para nuestra versión en pruebas del modelo de pre-equilibrio (histograma rojo) comparada frente a datos experimentales (puntos).

desarrollar el nuevo modelo de evaporación generalizado, GEM, mencionado en la sección 4.2.2. El acuerdo conseguido con los resultados experimentales en cuanto a la producción de fragmentos de masa intermedia resulta sorprendente. No obstante, en estas gráficas puede observarse la limitación referida anteriormente (sección 4.2.2) con respecto a la región de espalación profunda, que es el *hombro* que se observa para valores altos de Z y A . Aunque inicialmente se consideraba en GEANT4 una transición *suave* alrededor de n_{eq} entre las etapas de pre-equilibrio y equilibrio (Mashnik et al., 2006), en nuestros estudios se descartó tal transición como opción por defecto porque concluimos que empeoraba los resultados (Quesada et al., 2008). Sin embargo, en nuestros estudios posteriores de producción de fragmentos residuales hemos observado que el mecanismo de transición *suave* es necesario en cierta medida.

Los mejores resultados se han conseguido considerando una versión más consistente del algoritmo de transición *suave*, es decir, en torno al n_{eq} deducido a partir de (4.1), que permite una *difusividad* mucho menor en la región de transición que la inicialmente considerada. Sin embargo, este procedimiento implica una penalización en tiempo de CPU debido a que para cada núcleo excitado es necesario realizar, en primer lugar, un bucle mudo (i. e. sólo transiciones sin emisión de partículas) para obtener n_{eq} a partir de (4.1) y, posteriormente, todo el procedimiento de transiciones y emisiones de nucleones durante las fases de pre-equilibrio y equilibrio. Sin embargo, esta nueva estrategia mejora la descripción de la producción de fragmentos en la región de espalación, tal y como se muestra en las Figs. 4.12-4.13, sin

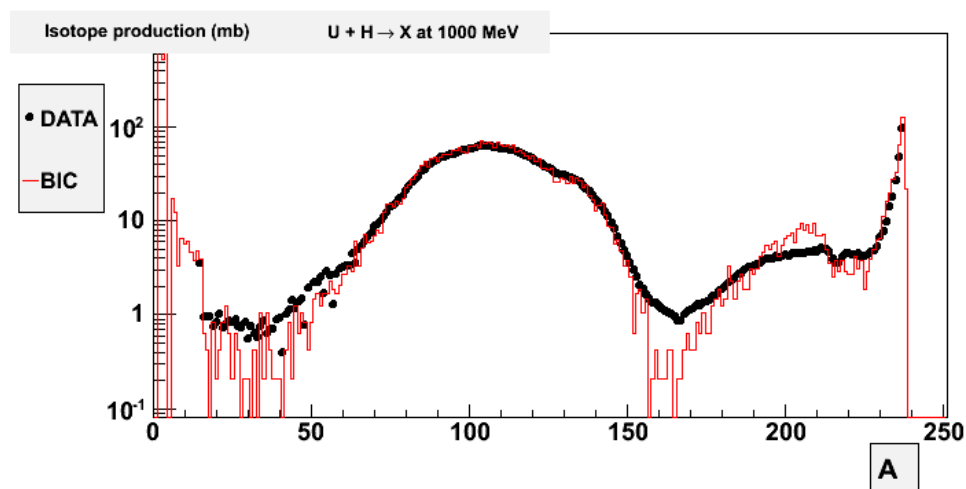


Figura 4.13: Producción isotópica en función del número másico A para la reacción $U+H$ a 1 GeV en cinemática inversa. El criterio de representación es el mismo que en la Fig. 4.12.

deteriorar los espectros en ángulo y energía de emisión de neutrones. Esta prescripción se encuentra actualmente en proceso de prueba y aún no ha sido incluida en la distribución oficial de GEANT4.

4.4. Conclusiones

En este capítulo se ha descrito la revisión realizada de los modelos implementados en GEANT4 que describen los mecanismos de desexcitación de pre-equilibrio y equilibrio de un núcleo compuesto. Gracias a dicha revisión se ha conseguido, de manera global, una reproducción satisfactoria del conjunto de datos experimentales compilados por el OIEA como *benchmark* de reacciones nucleares de espalación.

No obstante, algunas discrepancias todavía existentes requieren un trabajo de desarrollo adicional que actualmente se está llevando a cabo.

Parte III

Aplicaciones

Capítulo 5

Viabilidad de un detector de silicio para verificar tratamientos complejos de radioterapia

RESUMEN: En este capítulo mostramos una aplicación GEANT4 desarrollada para calcular la energía depositada en un detector de silicio dividido en tiras, en inglés SSSSD (*Single-Sided Silicon Strip Detector*), irradiado por el acelerador lineal Siemens PRIMUS del Hospital Universitario Virgen Macarena (HUVVM – Sevilla, España), operando en modo de fotones de 6 MV de energía nominal. En primer lugar, describimos la aplicación con la que simulamos el cabezal del acelerador PRIMUS, cuya geometría implementamos siguiendo la filosofía del código BEAMnrc/EGSnrc, y comparamos los cálculos de dosis obtenidos en agua con medidas experimentales de caracterización del acelerador. Posteriormente, explicamos las características de la simulación GEANT4 del SSSSD colocado dentro de un maniquí plano de agua sólida y otro cilíndrico de polietileno. Para cada uno, comparamos los cálculos Monte Carlo de la dosis depositada con la señal calibrada experimentalmente y con dosis en agua en varios modos de irradiación: uniforme, en penumbra y a distintos ángulos de incidencia. En el último caso también comparamos con cálculos realizados con el sistema de planificación Philips Pinnacle³ TPS.

ABSTRACT: In this chapter we show a GEANT4 application developed to calculate the energy deposited in a SSSSD (*Single-Sided Silicon Strip Detector*), irradiated with the Siemens PRIMUS linac used at Hospital Universitario Virgen Macarena (HUVVM – Seville, Spain), operating in the 6 MV photon mode. First, we

describe an application which simulates the Siemens PRIMUS treatment head, which geometry has been implemented following the BEAMnrc/EGSnrc design; then, we compare the Monte Carlo dose calculations in water with experimental measurements. Further, we present the GEANT4 simulation of the SSSSD placed within a solid-water plane phantom and a polyethylene cylindrical one. For each one, we compare the Monte Carlo dose calculation with the calibrated experimental signal and dose in water in several irradiation modes: uniform, penumbra and various angles of incidence. For the last case we also compare with calculations performed with Philips Pinnacle³ TPS.

5.1. Introducción

La creciente sofisticación y complejidad de los tratamientos de radioterapia con fotones de intensidad modulada, en inglés IMRT, representa un gran desafío para los sistemas de planificación, que en determinadas situaciones pueden realizar cálculos erróneos (Van Dyk et al., 1993; Cadman et al., 2002). Ésta es la razón por la que una verificación empírica de la distribución de dosis es altamente aconsejable antes de lanzar el tratamiento al paciente.

La resolución espacial de los detectores denominados *arrays* bidimensionales (2D) (ya sean basados en cámaras de ionización o diodos) está aún lejos de la que se necesita para verificar un tratamiento. Por el contrario, la dosimetría de película está ampliamente aceptada como dosímetro 2D (Niroomand-Rad et al., 1998; Zeidan et al., 2006; Arráns et al., 2009). Sin embargo, tanto su medida intrínseca como su proceso de lectura hacen que las películas no sean adecuadas como sistema de detección *on line*. Una alternativa excelente podría ser la tecnología de detectores de silicio de microtiras, pero éstos necesitan un alto número de canales, con la consiguiente y compleja lectura electrónica multicanal, para obtener una resolución espacial del orden de la de las películas (Redondo-Fernández et al., 2007).

El detector propuesto en este trabajo, junto con el maniquí cilíndrico, va a ser la base, una vez validado, de una nueva técnica de obtención de mapas de dosis en planos axiales, paralelos al haz de radiación, útiles para la verificación de tratamientos de radioterapia.

Los fotones no ionizan directamente al ser partículas neutras; son los electrones puestos en movimiento por ellos los que lo hacen, siendo responsables por tanto de la dosis depositada en la materia. Así, la dosis va creciendo rápidamente conforme penetramos en el medio hasta una determinada profundidad del orden del rango de estos electrones secundarios. A partir de esa profundidad en adelante, si no cambia el medio se está

en condiciones de equilibrio electrónico, en inglés CPE (*Charged-Particle Equilibrium*), y la dosis varía más suavemente. En general, una calibración en dosis absoluta se realiza en este régimen CPE ya que en él, por un lado, es más fiable la medida y, por otro lado, existen teorías que calculan la perturbación introducida por el detector y pueden por tanto eliminarla. Con lo cual, es conveniente colocar el detector en una zona donde exista CPE.

De acuerdo con lo anterior, hemos utilizado dos maniqués para albergar un detector de silicio dividido en tiras, SSSSD (*Single-Sided Silicon Strip Detector*). Para estudiar el comportamiento dosimétrico del detector, contamos con un maniquí compuesto por láminas fabricadas en agua sólida. Por otro lado, para verificar la distribución o *mapa* de dosis 2D del tratamiento hemos diseñado otro maniquí, esta vez cilíndrico, realizado en polietileno que puede girar sobre su eje de simetría. En ambos casos la densidad del material es similar a la de la mayoría de los tejidos del cuerpo humano. El sistema completo se irradia con el acelerador lineal Siemens PRIMUS del HUVN (Hospital Universitario Virgen Macarena – Sevilla, España) en el modo de fotones de 6 MV de energía nominal.

En este capítulo presentamos la simulación con GEANT4 de la dosis depositada en este detector SSSSD. La utilidad de las simulaciones Monte Carlo para averiguar la influencia de los diferentes factores involucrados en el proceso de medida de cualquier experimento, en particular de verificación de tratamientos por IMRT ya ha sido descrita en la introducción (capítulo 1). En este capítulo, aprovechamos la versatilidad que GEANT4 proporciona en cuestiones geométricas para realizar un modelo detallado tanto del cabezal del acelerador lineal Siemens PRIMUS, como de los maniqués y el SSSSD.

Este trabajo está incluido en un proyecto más amplio en colaboración con Instalaciones Inabensa, S. A.^a El objetivo final es aumentar la precisión geométrica de un detector de silicio dividido en tiras, acompañado de una lectura electrónica discreta, por medio de un algoritmo desarrollado por nosotros que está pendiente de ser patentado. Asimismo, el proyecto constituye una aproximación a la tecnología de detectores de silicio para estudiar las ventajas e inconvenientes del uso de este tipo de detectores en condiciones clínicas y proporcionar un método para encontrar el montaje experimental más apropiado en su uso como sistema de verificación de dosis en 2D.

Estructura de este capítulo

En la sección 5.2 describimos el desarrollo de la simulación con GEANT4 del cabezal del acelerador lineal PRIMUS, cuyos resultados se comparan con datos experimentales. Posteriormente, en la sección 5.3 describimos la aplicación GEANT4 con la que se simulan tanto los maniqués como

^aPágina web de Inabensa: <http://www.inabensa.com>.



Figura 5.1: Acelerador lineal PRIMUS de Siemens.

el detector. En esta ocasión, los resultados se contrastan con los datos experimentales y los cálculos obtenidos mediante el sistema de planificación Philips Pinnacle³ TPS,^b utilizado en el HUVM. Finalmente, la sección 5.4 muestra las conclusiones del trabajo.

5.2. Simulación del cabezal del acelerador PRIMUS de Siemens

5.2.1. Modelo geométrico del cabezal

En la Fig. 5.1 puede observarse una fotografía del acelerador lineal PRIMUS, fabricado por Siemens, utilizado en el HUVM. El brazo del acelerador, conocido normalmente como *gantry*, alberga en su interior los elementos principales del acelerador. En la parte situada delante del estativo contiene un generador de microondas *Klystron* que produce el campo eléctrico oscilante que acelera los electrones. En la parte superior del *gantry* se encuentra la *estructura aceleradora*, que consiste en una guía de onda estacionaria, que conduce a los electrones hacia un *imán deflector* de 270° cuya misión es definir la energía y focalización del haz de electrones a su entrada en el *cabezal* (o cabeza de tratamiento) del acelerador, situado al final de la parte superior del *gantry*. Los electrones se generan en el *cañón inyector*, que obviamente está situado al comienzo de la estructura aceleradora. Toda esta estructura está totalmente sellada y blindada al exterior.

El cabezal contiene los sistemas de absorción, dispersión y/o colimación

^bPágina web: <http://www.healthcare.philips.com/main/products/ros/products/pinnacle3/index.wpd>.

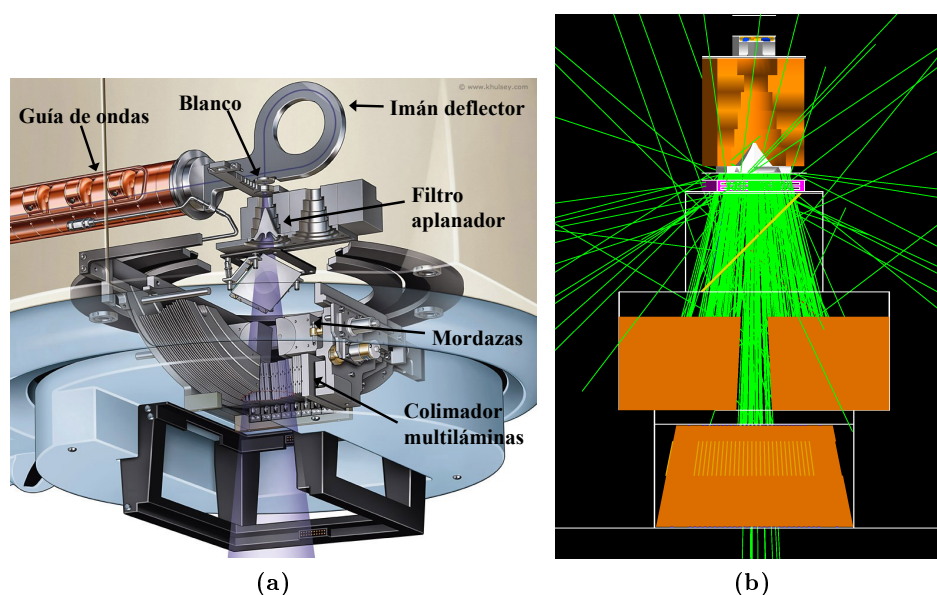


Figura 5.2: (a) Esquema del interior del cabezal del acelerador clínico PRIMUS operando en modo de fotones. (b) Geometría introducida en GEANT4 del cabezal del acelerador PRIMUS del HUVM en modo de fotones de energía nominal de 6 MV. El haz de electrones entra desde la parte superior. En verde se representa la trayectoria seguida por 100 fotones tras cruzar el filtro aplanador.

de electrones y fotones para definir el campo de radiación específico de cada tratamiento de radioterapia. La Fig. 5.2a muestra un esquema donde se pueden apreciar los diferentes elementos que lo componen, los cuales dependen del tipo de tratamiento que se realice. El diagrama de la figura representa una configuración concreta de tratamiento con fotones. En este caso se coloca un *blanco* con número atómico Z alto cuya misión es frenar bruscamente los electrones para que éstos generen fotones por radiación de frenado (conocida como *bremstrahlung*). El material utilizado en este cabezal es wolframio. Seguidamente se coloca un *filtro aplanador*, compuesto de acero inoxidable y cuya forma ha sido diseñada para conseguir un campo de dosis plano bajo determinadas condiciones de referencia. Posteriormente, las *mordazas* en una dirección y el colimador multiláminas, MLC (*Multi-Leaf Collimator*), en la otra, son los elementos con los que se define la forma y tamaño del campo de radiación. El material en ambos casos es un material de Z alta, como el wolframio.

La Fig. 5.2b muestra una imagen de nuestro modelado del cabezal con GEANT4 para el modo de fotones de 6 MV de energía nominal. En esta figura cada material está representado por un color determinado, que no tiene por qué corresponderse con el real. Comenzando desde arriba, encontramos el *blanco*, que consiste en una lámina de wolframio (naranja) colocada sobre

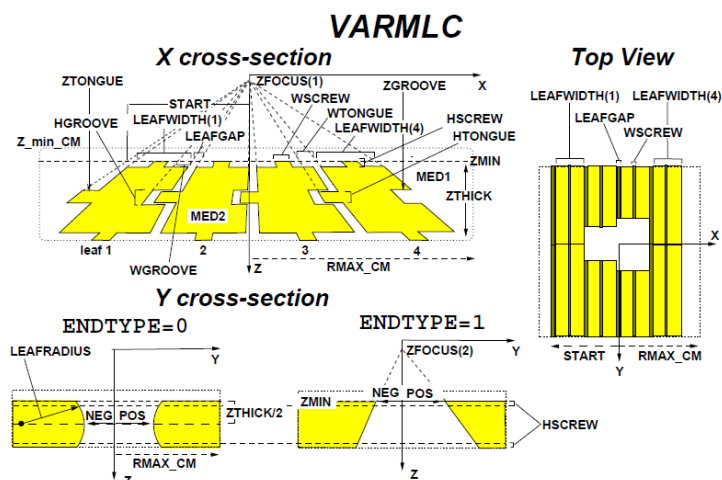


Figura 5.3: Geometría del módulo VARMLC del código BEAMnrc. (Rogers et al., 2009)

un soporte de cobre (naranja claro) por el cual circula agua (azul). Todo el conjunto reposa sobre un cilindro de grafito (gris) y está recubierto por acero inoxidable (gris claro). Posteriormente se representa el *colimador primario*, realizado en wolframio, en cuyo interior y al final se encuentra el *filtro aplanador*, de acero inoxidable. Tanto a esta estructura como a la anterior se le ha aplicado un corte para mostrar su interior. A continuación se encuentran la *cámara monitora*, que es una estructura cilíndrica realizada en óxido de aluminio (Al_2O_3 , morado) que se usa para controlar la intensidad del haz, y el *espejo*, que se utiliza para graduar el tamaño del campo de luz^c y está compuesto por una lámina de óxido de silicio (SiO_2 , amarillo) y otra muy fina de aluminio que no se percibe. Por último, se aprecian las dos *mordazas* de wolframio que delimitan el campo en la dirección horizontal de la figura y uno de los bancos del MLC (el otro estaría detrás), también de wolframio, que conforma el tamaño de campo en la dirección perpendicular al plano de la figura. Cada banco del MLC tiene un total de 29 láminas, siendo la proyección sobre el plano del isocentro (situado a 100 cm del blanco del cabezal) de 1 cm para cada una de las láminas, excepto para las dos situadas a los extremos, cuya anchura es mayor. En la simulación, los materiales han sido generados utilizando las definiciones de la base de datos del NIST (*National Institute of Standards and Technology*) implementada en GEANT4, excepto para el acero inoxidable y el Al_2O_3 , que los hemos definido a partir de la composición de materiales y elementos definidos en dicha base de datos en las proporciones correspondientes.

^cEl campo de luz está delimitado por la sombra proyectada por las mordazas y el MLC mientras que el campo de radiación está definido por el lugar geométrico en el que el nivel de dosis es el 50 % de la dosis depositada en el centro geométrico del mismo.

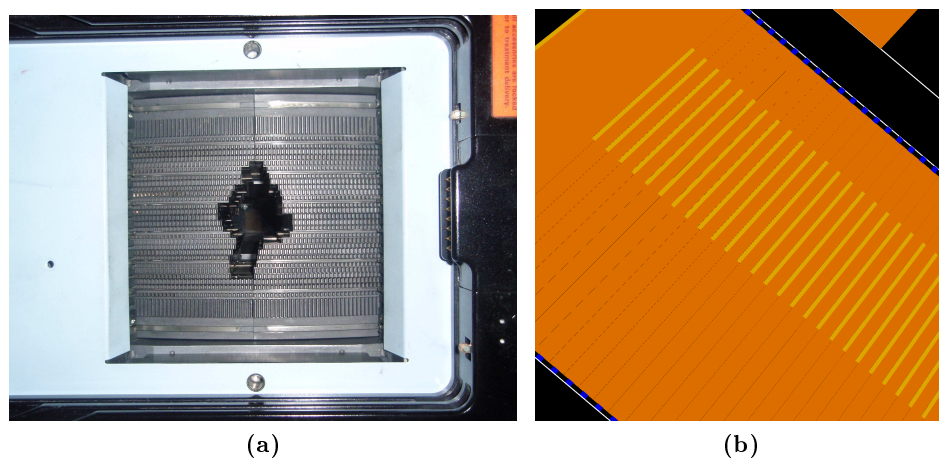


Figura 5.4: (a) Imagen tomada desde el punto de vista del paciente del colimador multiláminas, desarrollado por Toshiba, instalado en el acelerador Siemens PRIMUS del HUVIM. (b) Imagen lateral del correspondiente modelo geométrico implementado en la aplicación GEANT4, incluyendo el machihembrado entre láminas.

El modelado lo realizamos siguiendo las instrucciones del fabricante, las cuales estaban ajustadas para el código BEAMnrc. Por ello, el modelo geométrico del cabezal, presentado en la Fig. 5.2b, es idéntico al modelo realizado con BEAMnrc que se utiliza en el Departamento de Fisiología Médica y Biofísica de la Universidad de Sevilla (Leal et al., 2004a,b; Salguero, 2008). Hay que destacar la complicación que supuso realizar en GEANT4 el modelo del MLC debido a la dificultad a la hora de reproducir el módulo *VARMLC* del código BEAMnrc. En la Fig. 5.3 se muestra el esquema tomado del manual de usuario de BEAMnrc (Rogers et al., 2009), donde se detalla el significado de cada una de las variables que definen la geometría. Una de las fortalezas de este módulo es la posibilidad de modelar el machihembrado y el hueco entre láminas. A cambio, la forma geométrica de cada lámina está definida por la unión de seis trapezoides. Precisamente fue ésta la estrategia seguida con GEANT4, puesto que proporciona la posibilidad de definir trapezoides irregulares usando la clase `G4Trap`. En la Fig. 5.4b se muestra un detalle del resultado obtenido para el MLC, en el que se pueden apreciar unas finas líneas oscuras que corresponden al hueco entre láminas, que también puede observarse en la fotografía de la Fig. 5.4a. En esta ocasión las partes sobresalientes de cada lámina se han representado con otro color para dar claridad a la imagen (amarillo la parte lateral, azul las partes superior e inferior).

Por otra parte, hemos realizado el modelo geométrico del blanco, colimador primario y filtro aplanador utilizando la forma definida por la clase `G4Polycone`, que permite describir una unión de secciones cónicas que comparten el mismo eje. Asimismo, toda la estructura del cabezal se

construye dentro de un volumen que actúa de blindaje ideal, puesto que en la simulación se termina el seguimiento de cualquier partícula que salga de él (Cortés-Giraldo et al., 2010).

5.2.2. Características de la simulación con GEANT4

Dado que hemos simulado el modo de 6 MV de energía nominal, sólo hemos considerado en la lista de física procesos de interacción electromagnética, ya que a esta energía podemos descartar la producción de neutrones debido a la absorción de fotones en el blindaje del acelerador. GEANT4 proporciona diferentes paquetes para reproducir las interacciones electromagnéticas. A saber:

- *Standard EM* (Electromagnetic): Incluye modelos obtenidos a partir de parametrizaciones de secciones eficaces. Aunque fueron desarrollados para física de altas energías, el límite inferior del rango de validez es de 1 keV (Burkhardt et al., 2005; Apostolakis et al., 2010).
- *Livermore Low-Energy EM*: Estos modelos han sido diseñados para mejorar la precisión de los resultados a bajas energías, en particular en el rango en el que los efectos de la estructura de la corteza atómica son importantes (Chauvie et al., 2004). Usa secciones eficaces extraídas de las librerías de datos evaluados, publicados el LLNL (*Lawrence Livermore National Laboratory* – Livermore, California, EE.UU.), EPDL97 (Cullen et al., 1991), EEDL (Perkins et al., 1991b) y EADL (Perkins et al., 1991a), para fotones, electrones y niveles atómicos, respectivamente. Extiende su rango de validez hasta los 250 eV.
- *Penelope*: Constituye una implementación en GEANT4 de los modelos de interacción incluidos en el código PENELOPE para electrones, positrones y fotones con la materia.^d

La elección del modelo de dispersión de partículas cargadas en general, y de electrones en particular, es independiente del paquete electromagnético elegido. En GEANT4 existen implementados varios modelos, la mayoría basados en el principio de *historias condensadas* (Berger, 1963), aunque también se puede optar por utilizar modelos de dispersión simple (Ivanchenko et al., 2010).

En nuestro caso, hemos utilizado la opción por defecto para el modelo de dispersión múltiple, que es el modelo de historias condensadas desarrollado por L. Urban para electrones y positrones.^e En cuanto al paquete de modelos,

^dPágina TWiki del grupo de trabajo que desarrolla la implementación de PENELOPE en GEANT4: <https://twiki.cern.ch/twiki/bin/view/Geant4/LowePenelope>.

^e*GEANT4 Physics Reference Manual*, capítulo 7. Disponible en: <http://geant4.cern.ch/>, enlace “guides”.

utilizamos el de *Livermore Low-Energy EM* siguiendo las recomendaciones de la colaboración GEANT4 para aplicaciones médicas, las cuales además se han visto corroboradas en algunos trabajos (e. g. Faddegon et al., 2008a). Como excepción, para positrones utilizamos los modelos del paquete *Standard EM* puesto que para estas partículas no hay modelos definidos en el paquete *Livermore Low-Energy EM*.

Hemos establecido el corte de producción de secundarias en 0,1 mm para toda la geometría. Dicho valor es significativamente más pequeño que las dimensiones típicas de la simulación. Como ya se ha comentado en la sección 2.3.2, esto quiere decir que no se considera el seguimiento de una partícula secundaria si el rango esperado dentro del material en el que se encuentra es menor que el valor considerado para el corte de producción. Como excepción (y salvaguarda del código), si la partícula secundaria se genera en una zona próxima a una frontera, entonces se considera su seguimiento aunque su rango esperado sea inferior al valor seleccionado. Sobre este aspecto se incide con más profundidad en el capítulo 8, donde esta excepción juega un papel mucho más importante debido a la escala sub-micrométrica de los elementos del circuito que se simula en dicho capítulo.

En estas simulaciones hemos utilizado las clases de lectura y escritura de archivos de espacio de fases en formato *IAEAphsp* presentadas en el capítulo 3. Con el fin de evitar simulaciones repetitivas de las mismas partes del cabezal, especialmente de aquéllas que carecen de movimiento, optamos por seguir una estrategia análoga a la mostrada por Chetty et al. (2007), que consiste en tres pasos:

1. Simulación de la parte independiente del paciente del cabezal (compuesto por el blanco, colimador primario, filtro aplanador y cámara monitora) para caracterizar la fluencia tras la cámara monitora. Para ello definimos el plano de espacio de fases justo bajo la cámara monitora y simulamos la incidencia sobre el blanco de 4×10^9 electrones (historias). Su espectro energético^f responde a una distribución gaussiana de valor medio 5,8 MeV y anchura $\sigma_E = 0,29$ MeV. La distribución espacial se modela por una gaussiana 2D centrada en el origen y anchura a mitad de altura, $FWHM = 1,0$ mm. No se considera divergencia en el haz. Estos datos del haz incidente son parámetros obtenidos por aproximación a los resultados experimentales de dosis, ya que no se conocen los valores exactos de los parámetros del haz real en el acelerador, que además pueden variar ligeramente con respecto a los valores nominales facilitados por el fabricante tras la *sintonización* de la guía de onda, que se realiza *in situ* durante la instalación del acelerador clínico.

^fFacilitado por A. Leal y F. J. Salguero (Dpto. Fisiología Médica y Biofísica, Universidad de Sevilla).

2. Usamos como generador de primarias el espacio de fases *IAEAphsp* creado en el paso anterior y simulamos el transporte de partículas a través de las mordazas y el MLC para caracterizar la fluencia a la salida del acelerador, incluyendo la parte dependiente del paciente (mordazas y MLC). Para incrementar la estadística reciclamos cada partícula del espacio de fases 5 veces, aplicando que existe simetría rotacional con respecto al eje de propagación del haz. Finalmente, en este paso definimos un nuevo plano de espacio de fases situado a $SSD = 70$ cm, donde SSD (*Source Surface Distance*) es la distancia de la fuente (blanco del cabezal) a la superficie.
3. Por último, el archivo *IAEAphsp* creado en el paso anterior se utiliza como generador de primarias para la simulación del transporte sobre la cuba de agua (y posteriormente los maniqués). En esta ocasión, cada partícula del espacio de fases se recicla un total de 25 veces para conseguir en total un número de historias efectivo de 5×10^{11} .

Todos los cálculos que se presentan a continuación han sido realizados en un *cluster* linux (Ubuntu Server 8.04 64-bit y Debian Etch 64-bit) compuesto por tres servidores Dell PowerEdge 2970, cada uno con dos procesadores Intel Xeon de cuádruple núcleo a 2.66 GHz y con 8 GB de memoria RAM (*Random-Access Memory*).

5.2.3. Resultados

La verificación de la correcta simulación del cabezal del acelerador PRIMUS se ha realizado mediante la comparación de los resultados de GEANT4 con datos experimentales de caracterización del cabezal, facilitados por el Servicio de Radiofísica del HUVIM. Concretamente, los datos bajo estudio son curvas de dosis en profundidad, o PDD (*Percentage Depth Dose*), y perfiles de dosis a profundidades, d , de 1,5 cm, 5,0 cm, 10,0 cm y 20,0 cm para campos de radiación de 10×10 cm² y 5×5 cm².

El PDD se obtiene a partir de la dosis depositada a lo largo del eje central (eje de propagación del haz) de una cuba de agua de $50 \times 50 \times 40$ cm³, cuya superficie se encuentra a 100 cm de la fuente bajo el cabezal, el cual se dispone en posición vertical hacia abajo (ángulo del *gantry* igual a 0°). Por otra parte, los perfiles se miden a una determinada profundidad fija en las direcciones *inplane* y *crossplane*. Por *inplane* se entiende la dirección de movimiento de las mordazas (si el cabezal no ha sido rotado y la camilla no ha sido movida, corresponde a la dirección definida a lo largo de la camilla), mientras que *crossplane* es la dirección perpendicular a aquélla, definida por el movimiento de las láminas del MLC. En las simulaciones, el eje x corresponde al *inplane*, el eje y al *crossplane* y el eje z al eje de propagación del haz.

Para las medidas experimentales de estas dosis se utiliza un detector de cámara de ionización, o también un detector de diodo semiconductor.

Los resultados presentados en esta sección corresponden a un detector semiconductor de 2,5 mm de diámetro y 0,5 mm de espesor, encapsulado en resina epoxy. Por su parte, con GEANT4 calculamos la dosis considerando la energía depositada en cilindros con un radio de 4 mm y altura 1 mm colocados de manera que el eje del cilindro coincide con el eje de medida correspondiente a cada curva de dosis. El punto efectivo del cálculo se considera en el centro geométrico del cilindro.

A la hora de comparar las medidas con los cálculos de GEANT4, debemos tener en cuenta que las curvas PDD experimentales presentan valores de dosis relativa al máximo, cuyo valor asignado es 100 %. Por su parte, la dosis obtenida con Monte Carlo viene dada en unidades de Gy por historia (Gy/hist); con lo cual, debemos primero establecer el valor máximo de los datos de dosis en profundidad de GEANT4 para utilizarlo como referencia. Dado que la dosis calculada mediante Monte Carlo presenta fluctuaciones debidas a la incertidumbre estadística, hemos optado por ajustar los valores comprendidos entre las profundidades 1,0 cm y 2,0 cm a una función polinómica de tercer orden, $f_{\text{PDD}}(d)$, centrada en la profundidad donde se encuentra el máximo, d_M , que naturalmente se encuentra entre las profundidades mencionadas. La forma de esta función es

$$f_{\text{PDD}}(d) = a_0 + a_1(d - d_M) + a_2(d - d_M)^2 + a_3(d - d_M)^3 . \quad (5.1)$$

Una vez realizado el ajuste, el parámetro a_0 corresponde a la dosis máxima de referencia de la curva de dosis en profundidad de GEANT4. Por lo tanto, para obtener el PDD de GEANT4 debemos multiplicar los resultados de Monte Carlo por $1/a_0$. Si particularizamos para un campo concreto, “f”, su factor de normalización, k^f , es

$$k^f = \frac{1}{a_0^f} . \quad (5.2)$$

En las figuras presentadas a continuación, los datos experimentales se representan con una línea continua para mayor claridad. Los cálculos de Monte Carlo aparecen con círculos vacíos.

En la Fig. 5.5 se muestra la primera comparación de las medidas y los cálculos GEANT4. En este caso se trata de una curva PDD para un campo $10 \times 10 \text{ cm}^2$, cuyos valores están normalizados al máximo, situado en esta configuración a una profundidad $d_M^{10 \times 10} = 1,5 \text{ cm}$. El factor de normalización de GEANT4, $k^{10 \times 10}$, es según (5.2)

$$k^{10 \times 10} = (9,322 \pm 0,024) \times 10^{13} \text{ hist/cGy} . \quad (5.3)$$

En esta figura, las barras de error de los datos de GEANT4 indican el nivel 1σ de la incertidumbre estadística asociada, calculada siguiendo el método de Walters et al. (2002). En la figura también se ha representado la banda

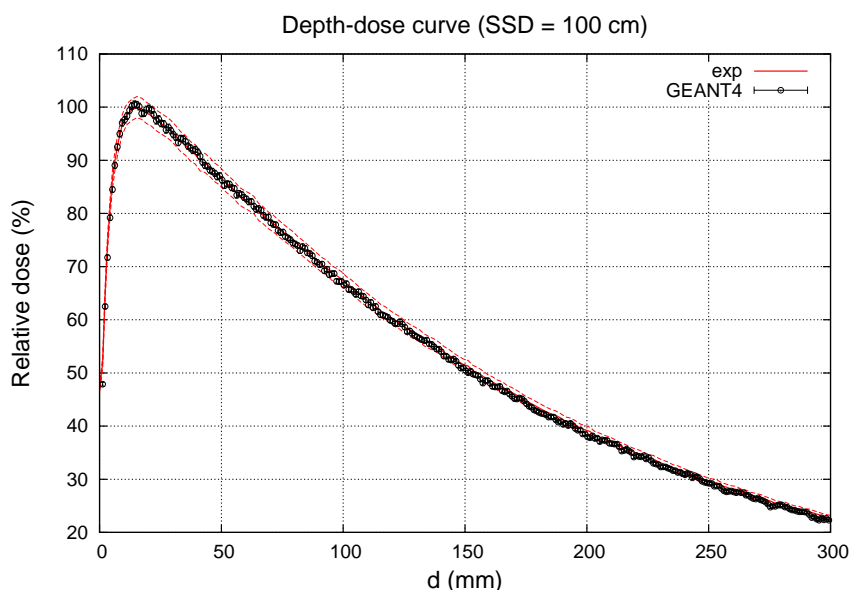


Figura 5.5: Curva PDD obtenida en agua para un campo $10 \times 10 \text{ cm}^2$ ($SSD = 100 \text{ cm}$). Las líneas discontinuas indican los niveles $\pm 2\%$ de las medidas experimentales. Las barras de error que acompañan a los valores calculados con GEANT4 indican la incertidumbre estimada a nivel 1σ .

de $\pm 2\%$ de los resultados experimentales para dotar de mayor claridad a la comparación. Este nivel de acuerdo sugerido ($\pm 2\%$) se inspira en el informe ICRU24, el cual exige que la dosis debe ser administrada con una incertidumbre no mayor del 5% (ICRU, 1976). Esto implica una precisión del algoritmo de cálculo de dosis del orden del 2% si tenemos en cuenta las restantes fuentes de error presentes durante el tratamiento, tal y como se expuso en la sección 1.2.2. Con una incertidumbre estadística del $0,6\%$ (1σ) en el entorno del máximo, puede observarse que los valores calculados con GEANT4 muestran un acuerdo dentro del 2% de la dosis para profundidades menores de 15 cm . Por encima de este valor puede apreciarse que GEANT4 tiende a subestimar el resultado, aunque siempre dentro del límite del $2\text{-}3\%$. Este pequeño desacuerdo puede ser consecuencia de que la energía media del haz de electrones simulado incidiendo en el blanco ($E = 5,8 \text{ MeV}$) sea algo menor que el valor real (Sheikh-Bagheri y Rogers, 2002), por lo que se puede corregir mediante un ajuste más fino.

La medida a una profundidad de $1,5 \text{ cm}$ en agua, con $SSD = 100 \text{ cm}$, campo $10 \times 10 \text{ cm}^2$ y modo de fotones de 6 MV constituye las condiciones de referencia para cálculo de dosis absoluta. Las *unidades monitor* o MU (*Monitor Unit*) del acelerador están ajustadas para que 1 MU deposite en este punto de referencia una dosis de 1 cGy . Así pues, el factor $k^{10 \times 10}$ establecido en (5.3) puede ser asociado al factor de normalización k que

convierte los resultados Monte Carlo en dosis absoluta una vez conocidas las MU aplicadas. En base a esto, k viene dado por

$$k = (9,322 \pm 0,024) \times 10^{13} \text{ hist/MU} . \quad (5.4)$$

En la Fig. 5.6 se presentan los perfiles obtenidos en agua, a profundidades de 1,5 cm, 5,0 cm, 10,0 cm y 20,0 cm con $SSD = 100$ cm, en las direcciones *crossplane* e *inplane* tanto experimentalmente como con GEANT4. El centro de los perfiles experimentales se ha normalizado al nivel de dosis de la curva PDD correspondiente a esa profundidad. Por otro lado, los cálculos Monte Carlo han sido normalizados de acuerdo con el factor discutido anteriormente, $k^{10 \times 10}$ (5.3). Las barras de error indican el nivel 1σ de la incertidumbre estimada en los valores de GEANT4. Esta incertidumbre estadística (1σ) en el centro de los perfiles está comprendida entre 0,7% (a 1,5 cm) y 1,0% (a 20,0 cm). Existe un buen acuerdo con los datos experimentales dentro de la banda de $\pm 2\%$, representada para cada perfil. En cuanto a la posición de las penumbras (zonas de caída brusca de dosis en los extremos del perfil) el acuerdo entre el cálculo con GEANT4 y las curvas experimentales está dentro de la tolerancia experimental de ± 1 mm, pudiéndose apreciar un mejor resultado para los perfiles *inplane* que para los *crossplane*, donde la caída en la simulación es más abrupta. Asimismo, para los perfiles calculados a la profundidad $d = 1,5$ cm puede observarse una ligera tendencia a sobreestimar la dosis experimental en los “hombros” del perfil (zona próxima a las penumbras), aunque dentro del límite del 2%. En general, la presencia de estas leves discrepancias pueden explicarse considerando que el tamaño del haz primario de electrones simulado ($FWHM = 1,0$ mm) es menor que el tamaño de haz real en el acelerador (Pena et al., 2007). En un trabajo futuro exploraremos esta posibilidad.

Además del campo 10×10 cm², se ha estudiado un campo menor, 5×5 cm², más cercano a las tendencias de tratamientos actuales. En la Fig. 5.7 se presenta el PDD calculado mediante simulación junto con los datos experimentales de dosis relativa con respecto al valor máximo, obtenido a una profundidad de 1,5 cm. La normalización respecto al máximo de los valores calculados con GEANT4 se realizó de manera análoga al caso anterior de campo 10×10 cm², considerando que la función $f_{\text{PDD}}(d)$ (5.1) debe estar centrada a la profundidad del máximo para este campo, $d_M^{5 \times 5}$. En este caso no existe diferencia cuantitativa en este sentido porque la profundidad del máximo de nuevo es de 1,5 cm. Así pues, el factor de normalización para este caso, $k^{5 \times 5}$, es

$$k^{5 \times 5} = (9,881 \pm 0,020) \times 10^{13} \text{ hist/cGy} , \quad (5.5)$$

y con él, se obtiene el resultado mostrado en la Fig. 5.7. La incertidumbre estadística asociada al cálculo Monte Carlo es $< 0,7\%$ (1σ) para la región del

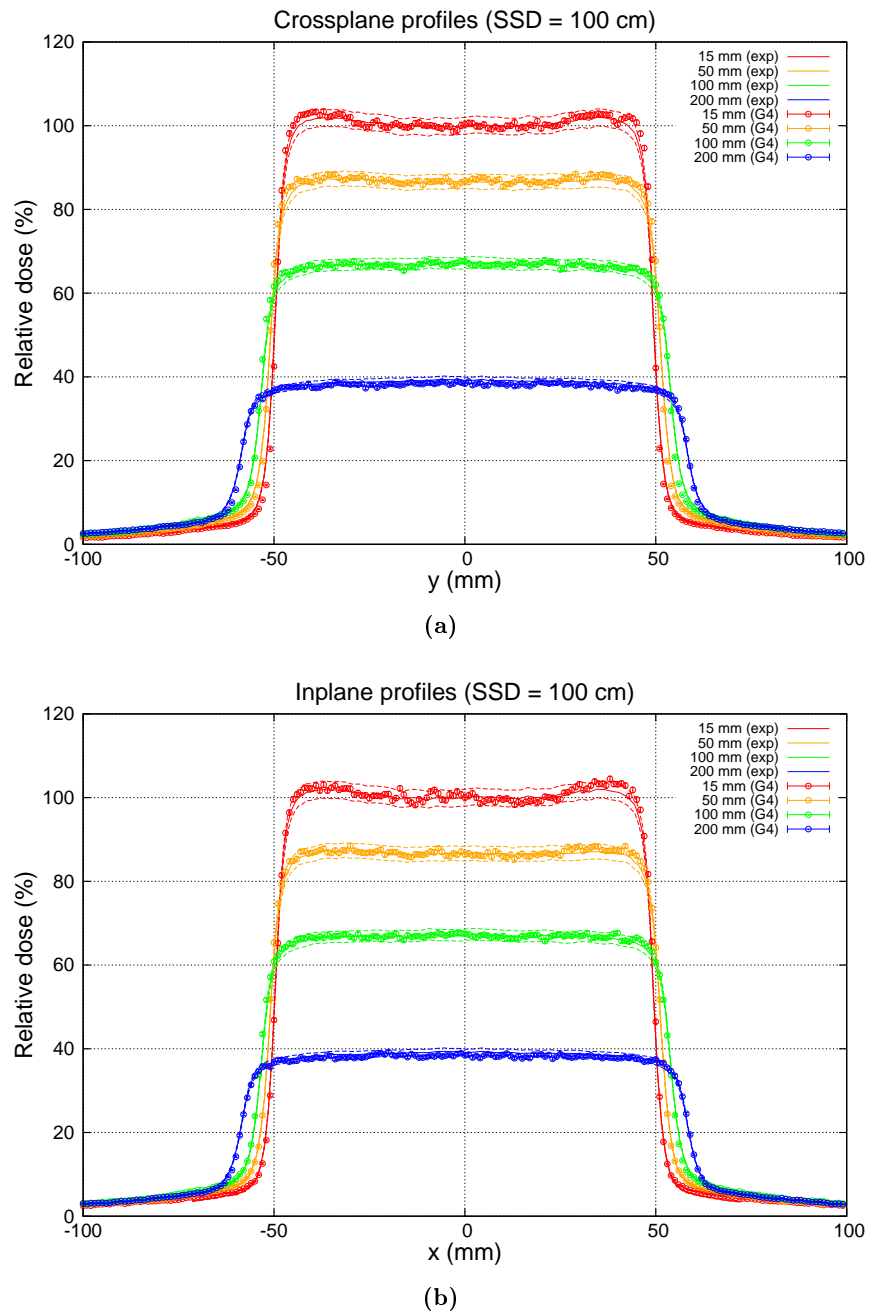


Figura 5.6: Perfiles *crossplane* (a) e *inplane* (b) correspondientes a un campo $10 \times 10 \text{ cm}^2$ obtenidos en agua ($SSD = 100 \text{ cm}$) a profundidades de 1,5 cm, 5,0 cm, 10,0 cm y 20,0 cm. La representación de los distintos datos es similar a la de la Fig. 5.5.

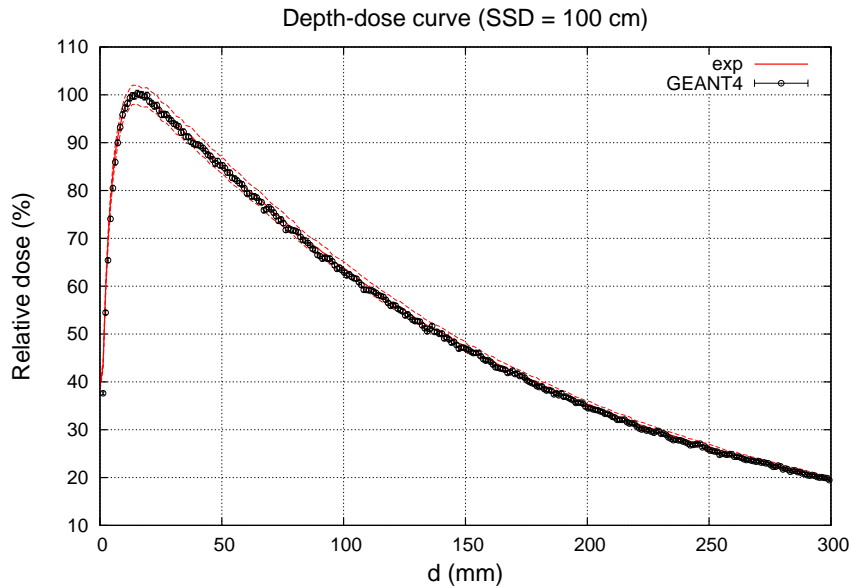


Figura 5.7: Curva PDD obtenida en agua para un campo $5 \times 5 \text{ cm}^2$ ($SSD = 100 \text{ cm}$). Se sigue la misma representación que en la Fig. 5.5.

máximo. Con este nivel estadístico puede apreciarse un acuerdo general del 2% con la dosis relativa experimental. Al igual que en la Fig. 5.5, también parece existir una pequeña subestimación por parte de GEANT4, más ligera en este caso. Esto apoyaría la idea de tener en la simulación un espectro de menor energía media que el real, ya que el efecto se aprecia más en campos mayores.

Finalmente, la Fig. 5.8 presenta los perfiles *crossplane* e *inplane* obtenidos a profundidades de 1,5 cm, 5,0 cm, 10,0 cm y 20,0 cm para este campo de radiación de $5 \times 5 \text{ cm}^2$. Los resultados de GEANT4 tienen una incertidumbre estadística asociada comprendida entre 0,7% (1,5 cm) y 1,1% (20,0 cm). El acuerdo general entre los cálculos de la simulación y los datos experimentales obtenidos en agua es del 2-3%. Al igual que en el caso anterior, hemos conseguido reproducir la posición de las penumbras dentro de la precisión experimental de $\pm 1 \text{ mm}$. También puede observarse que las penumbras calculadas con GEANT4 son un poco más abruptas que las obtenidas experimentalmente, especialmente para los perfiles *crossplane*. Como ya se comentó anteriormente, este pequeño desacuerdo puede desaparecer utilizando un tamaño de haz con *FWHM* ligeramente mayor.

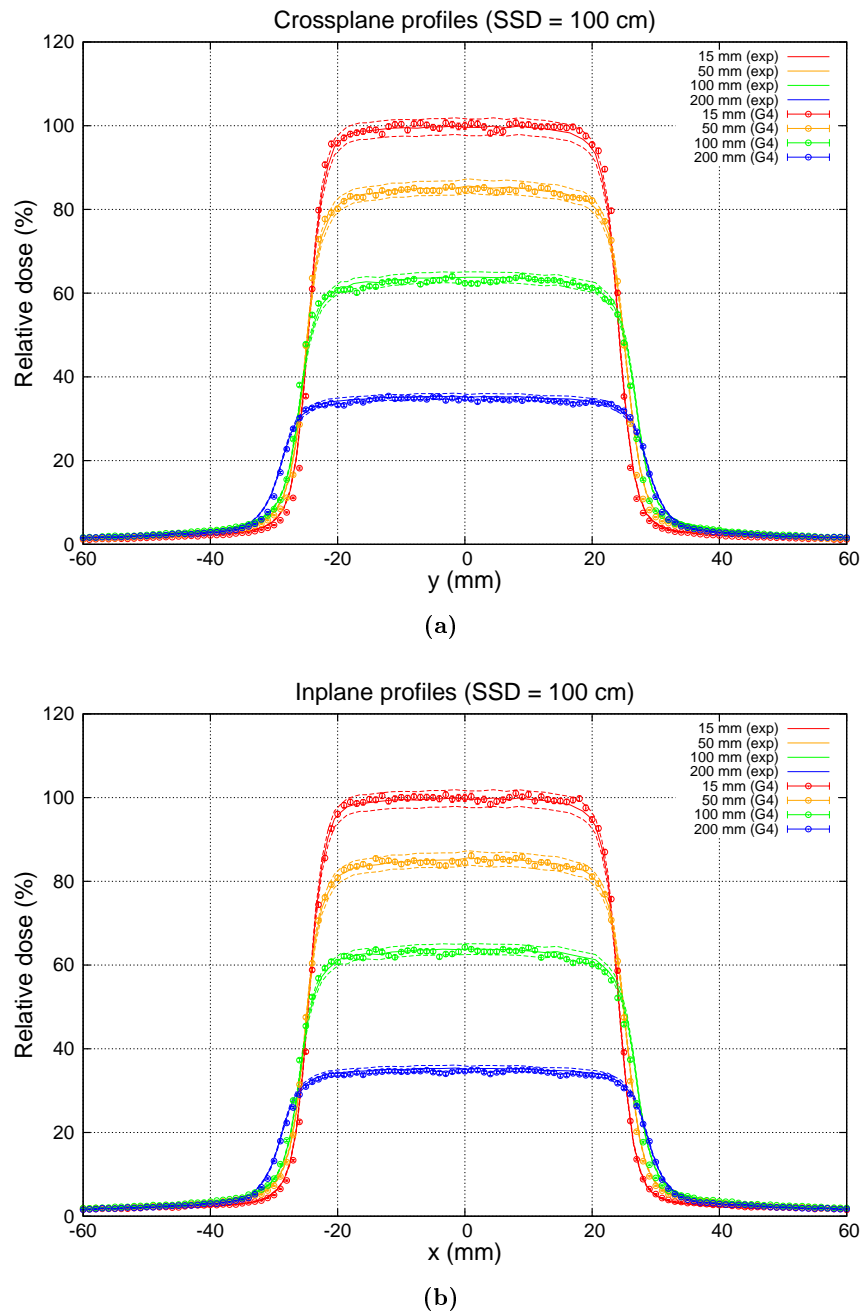


Figura 5.8: Perfiles *crossplane* (a) e *inplane* (b) correspondientes a un campo $5 \times 5 \text{ cm}^2$ obtenidos en las mismas condiciones que los presentados en la Fig. 5.6. La representación coincide con la descrita en la Fig. 5.5.

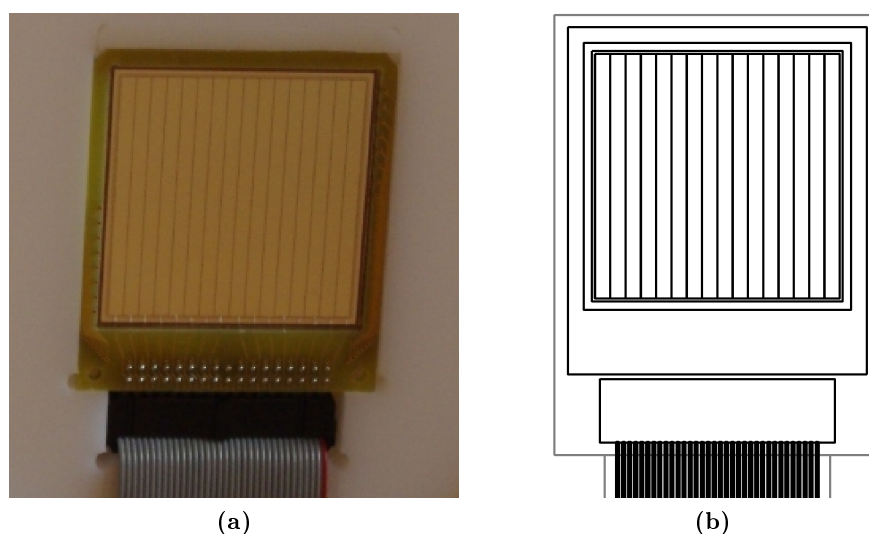


Figura 5.9: (a) Fotografía frontal del detector SSSSD. (b) Modelo geométrico desarrollado para las simulaciones con GEANT4.

5.3. Simulación del sistema de detección

5.3.1. Modelado del detector SSSSD

La Fig. 5.9a muestra una fotografía del detector utilizado. Se trata de un SSSSD, modelo W1(SS)-500, fabricado por Micron Semiconductor Ltd. (Sussex, Reino Unido).[§] Su volumen activo de silicio cubre un área de $50,0 \times 50,0 \text{ mm}^2$, tiene $500 \mu\text{m}$ de espesor y presenta dos capas muertas en sus superficies frontal y trasera, ambas de $0,5 \mu\text{m}$ de espesor, una de ellas de silicio dopado con boro y la otra con fósforo. Tal y como se aprecia en la fotografía, el área activa está dividida en 16 tiras de $3,1 \text{ mm}$ de anchura. Todo este conjunto presenta una fina capa de metalizado en aluminio tanto en la superficie frontal como en la trasera, ambas de $0,3 \mu\text{m}$ de espesor. El marco del detector, que constituye el PCB (*Printed Circuit Board*), está realizado en FR4. Su espesor es de $3,2 \text{ mm}$ y sus dimensiones transversales son $61 \times 71 \text{ mm}^2$. El área activa está colocada de manera que los bordes superior y lateral de PCB tengan la misma anchura. Todos estos detalles han sido incluidos en el modelo geométrico utilizado en GEANT4, cuyo esquema frontal se muestra en la Fig. 5.9b. Pueden apreciarse tanto el detalle de las tiras como de los márgenes existentes entre la zona activa del detector y el borde del marco.

Para reproducir los materiales recurrimos a la base de datos del NIST implementada en GEANT4, considerando en cada caso la composición

[§]Página web del fabricante: <http://www.micronsemiconductor.co.uk/>.

adecuada entre elementos o materiales. En el caso del FR4, utilizamos la composición mostrada en la Tabla 5.1, con una densidad global de $1,85 \text{ g/cm}^3$.

Elemento	Abundancia (%)	Elemento	Abundancia (%)
O	40,5633	H	6,8442
C	27,8042	Br	6,7109
Si	18,0774		

Tabla 5.1: Composición en peso del FR4.

El conector, situado en la parte inferior de esa misma figura, fue modelado considerando como material un derivado de poliuretano de densidad $1,2 \text{ g/cm}^3$ de composición química aproximada $\text{C}_{25}\text{H}_{42}\text{N}_2\text{O}_6$. Finalmente, para los hilos de cobre que salen del conector (hacia abajo en la figura) se consideró un diámetro aproximado de $0,6 \text{ mm}$.

5.3.2. Geometría de los maniqués

5.3.2.1. Maniquí plano de agua sólida

El primero de los maniqués utilizados se compone de láminas de agua sólida de superficie $30 \times 30 \text{ cm}^2$ entre las que se intercala una lámina de polietileno APM-500 (densidad de $0,94 \text{ g/cm}^3$), especialmente diseñada para albergar el detector, con las mismas dimensiones laterales y espesor de $2,0 \text{ cm}$. El espesor total del maniquí es de 25 cm . La Fig. 5.10a muestra una fotografía de detalle de la lámina de polietileno con el SSSSD colocado en su interior. Por otro lado, el modelo geométrico utilizado en GEANT4 puede observarse en la Fig. 5.10b, donde puede apreciarse una configuración en la que el detector está colocado a una profundidad $d = 10 \text{ cm}$. Finalmente, la fotografía mostrada en la Fig. 5.10c ilustra el montaje experimental correspondiente a este maniquí. Dicha fotografía recoge una configuración con $SSD = 90 \text{ cm}$ y $d = 10 \text{ cm}$.

Como veremos a continuación, este maniquí se utiliza para realizar las medidas de calibración y una verificación de la respuesta del detector en condiciones de penumbra.

5.3.2.2. Maniquí cilíndrico de polietileno

El segundo maniquí que se utiliza en este trabajo fue diseñado por nuestro grupo y fabricado por Instalaciones Inabensa, S. A., en el marco de un convenio de colaboración. Está realizado en polietileno APM-500 y consiste en un cilindro con una altura de $17,0 \text{ cm}$ y un radio de $7,9 \text{ cm}$. Tal y como se observa en la Fig. 5.11a, el maniquí está dividido en dos mitades, conteniendo

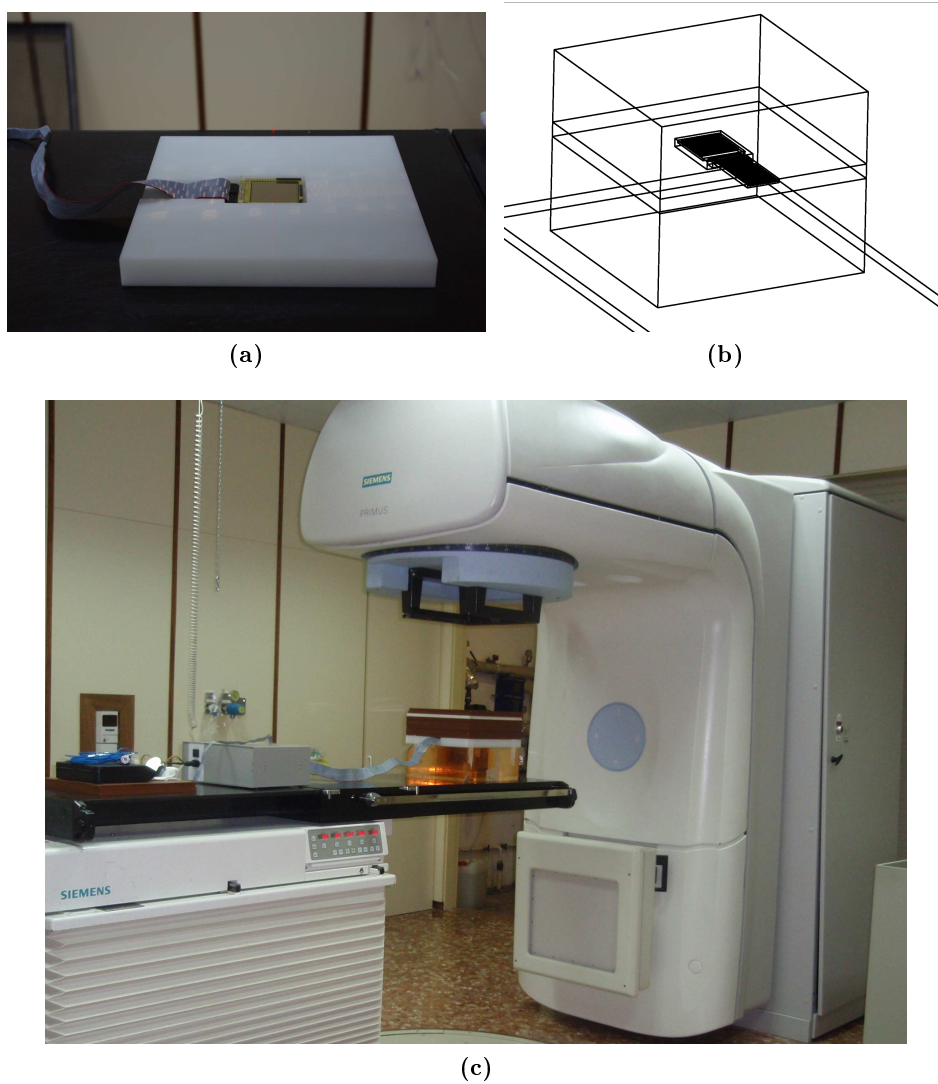


Figura 5.10: Maniquí plano de agua sólida. (a) Detalle de la lámina de polietileno que alberga al detector. (b) Modelo GEANT4 del maniquí laminado con el detector colocado a 10 cm del plano superior. (c) Montaje experimental para una irradiación a $SSD = 90$ cm y $d = 10$ cm.

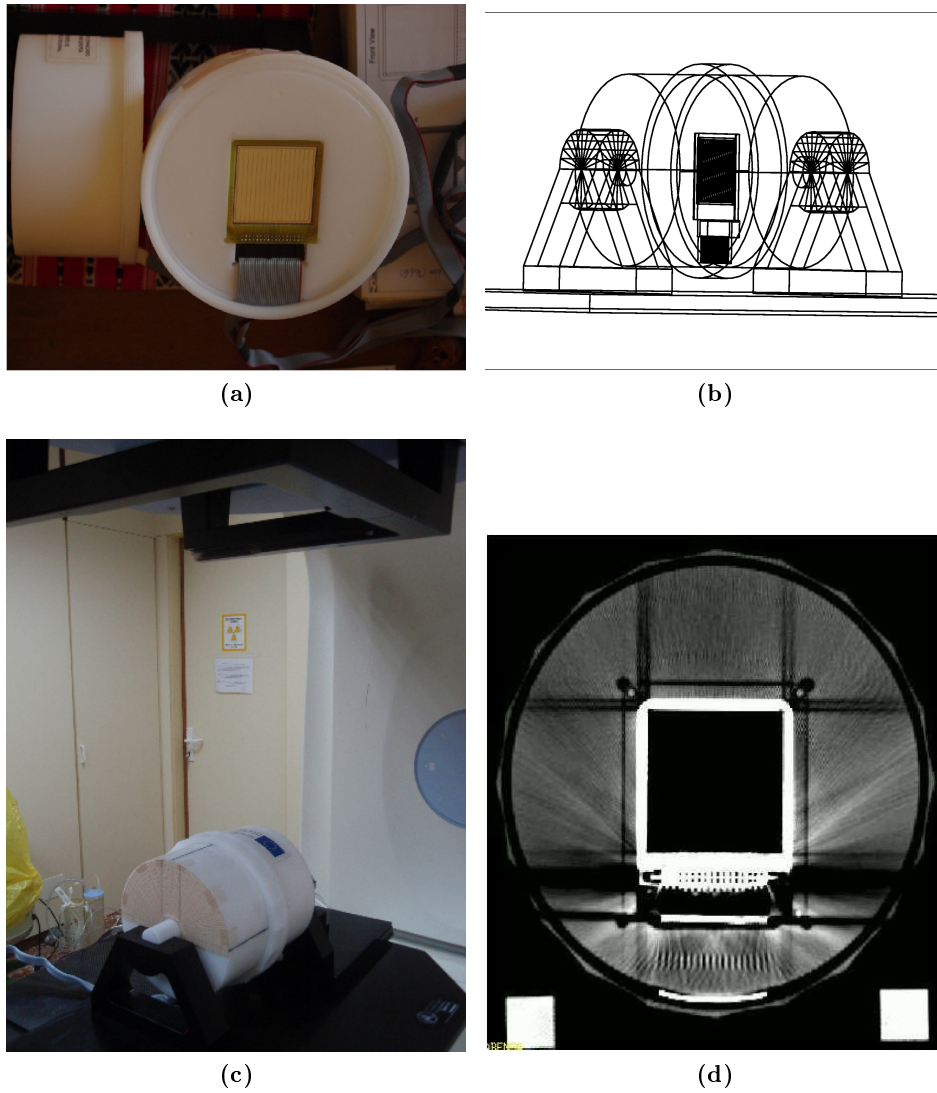


Figura 5.11: Maniquí cilíndrico de polietileno, diseñado por nuestro grupo y fabricado por Inabensa, S. A. (a) Maniquí cilíndrico con el detector colocado en su interior antes de cerrarse. (b) Modelo GEANT4 del maniquí cilíndrico, en el que pueden distinguirse la colocación del detector en su interior, el anillo que simula la tuerca de cierre y los soportes laterales del maniquí. (c) Disposición experimental del maniquí, con su eje de simetría paralelo a la dimensión mayor de la camilla (dirección *inplane*). (d) Corte transversal obtenido mediante TAC donde se aprecia el sistema de detección dentro del maniquí.

una de ellas el hueco que alberga el detector. Este conjunto se cierra mediante una tuerca exterior, también realizada en polietileno APM-500, de espesor medio 9 mm y anchura de 28,5 mm, que puede ser observada en la Fig. 5.11c. En la Fig. 5.11b se presenta una imagen del modelo geométrico implementado para la simulación con GEANT4, en la que se pueden apreciar la posición del detector centrado en el cilindro, la corona circular con la que se modela la tuerca exterior de cierre y los soportes laterales del maniquí. Estos soportes, que también se observan en la Fig. 5.11c (en negro), presentan una forma de triángulo redondeado y su material es resina acetálica Delrin POMNP040. Por otra parte, en la Fig. 5.11d se muestra una imagen obtenida por TAC correspondiente al plano transversal que contiene al SSSSD. En ella, pueden distinguirse claramente la zona activa del detector, el marco PCB, el conector y los cables, además del maniquí de polietileno. Los artefactos que se observan en la imagen están causados por el alto gradiente de densidad existente entre el detector y el polietileno.

La razón por la que se ha fabricado este maniquí es acercar en lo posible el montaje experimental a un caso clínico. Los planos más utilizados para planificar un tratamiento de radioterapia corresponden a cortes axiales del paciente, por lo que es interesante para la verificación de éste obtener los mapas de dosis en esos planos. El maniquí está diseñado para albergar al detector en esa orientación. Por otro lado, su forma cilíndrica imita burdamente el aspecto de una cabeza y el material elegido, polietileno, no resulta muy costoso y tiene una densidad próxima a la del agua y a la de los tejidos del cuerpo humano.

La disposición del maniquí en la camilla es la que se muestra en la Fig. 5.11c. Es decir, con el eje del cilindro coincidiendo con el de la camilla, simulando de nuevo la posición de un hipotético paciente en ella.

5.3.3. Detalles técnicos de las simulaciones con GEANT4

La lista de física utilizada para simular el transporte de partículas en los maniqués y el SSSSD es la misma que la descrita anteriormente en la sección 5.2.2, basada en el paquete *Livermore Low-Energy EM*. El corte de producción elegido para los maniqués es, como en los cálculos anteriores, 0,1 mm. Sin embargo, dadas las pequeñas dimensiones de algunos volúmenes presentes en el modelo geométrico del SSSSD (en particular, el espesor del volumen sensible es de 500 μm), hemos rebajado dicho valor hasta 0,02 mm dentro de la región definida por el hueco que alberga al SSSSD. No obstante, debemos recordar que el código GEANT4 considera el seguimiento de partículas secundarias cuyo rango esperado esté por debajo del corte establecido siempre y cuando hayan sido creadas en zonas próximas a fronteras entre volúmenes.

Los campos de radiación estudiados han sido generados siguiendo la estrategia descrita en la sección 5.2.2. Obviamente, en el tercer paso de ese

esquema se ha simulado el transporte de radiación sobre el maniquí y el detector. Para ello, en esta ocasión hemos reutilizado cada partícula del espacio de fases obtenido a $SSD = 70$ cm un total de 10 veces, estableciendo un número de historias efectivo de 2×10^{11} .

El volumen que define cada tira en la simulación se registra como *volumen sensible* independiente de los demás. En cada uno de ellos, se calcula la dosis acumulada usando el *scorer* definido en la clase `G4PSDoseDeposit`.

5.3.4. Resultados

Presentamos los resultados en tres bloques. Los dos primeros se refieren al maniquí plano, en los que el detector se irradia perpendicularmente y se efectúa la caracterización inicial de éste. En concreto, se realiza una calibración en estas condiciones y un estudio de la detección en situaciones de penumbra. El último apartado incluye los resultados del detector colocado en una disposición más cercana a un caso clínico; es decir, en un plano axial del maniquí cilíndrico y recibiendo la radiación a lo largo de su plano principal. Esta configuración requiere una nueva calibración del detector.

A continuación mostramos, además de los resultados de la simulación Monte Carlo, medidas experimentales tomadas con el detector SSSSD cuya discusión detallada se puede encontrar en (Bocci et al., 2011). Asimismo, se hace uso de datos de cámaras de ionización, diodos y de cálculos con el sistema de planificación facilitados por el Servicio de Radiofísica del HUVM.

5.3.4.1. Calibración del detector irradiado perpendicularmente

La primera calibración en agua de la dosis depositada en cada tira del detector se ha realizado con el maniquí de láminas de agua sólida (Fig. 5.10) en condiciones de referencia de medida, esto es, campo de radiación de 10×10 cm², maniquí colocado a $SSD = 100$ cm y detector situado (su superficie superior) a la profundidad $d_M = 1,5$ cm. De esta manera la irradiación puede considerarse uniforme en todas las tiras.

En la Fig. 5.12 se presenta el resultado obtenido utilizando el factor k (5.3) y considerando una irradiación de 100 MU. Los datos experimentales se han obtenido a partir del perfil de dosis relativa. Como se observa en la Fig. 5.10c, el SSSSD está orientado de tal manera que el lado mayor de las tiras es paralelo a la dirección *inplane* (eje x), por lo que la dosis calculada corresponde a un valor determinado de la coordenada y . Se percibe claramente que la dosis depositada en cada tira de silicio es aproximadamente un 20 % superior a la dosis calculada en agua bajo las mismas condiciones de referencia (datos idénticos a los de la Fig. 5.6a). La incertidumbre estadística del cálculo de dosis para cada tira es aproximadamente 0,4 % (1σ); el símbolo usado es mayor que las barras de error.

Esta diferencia nos proporciona el factor de calibración a dosis en agua

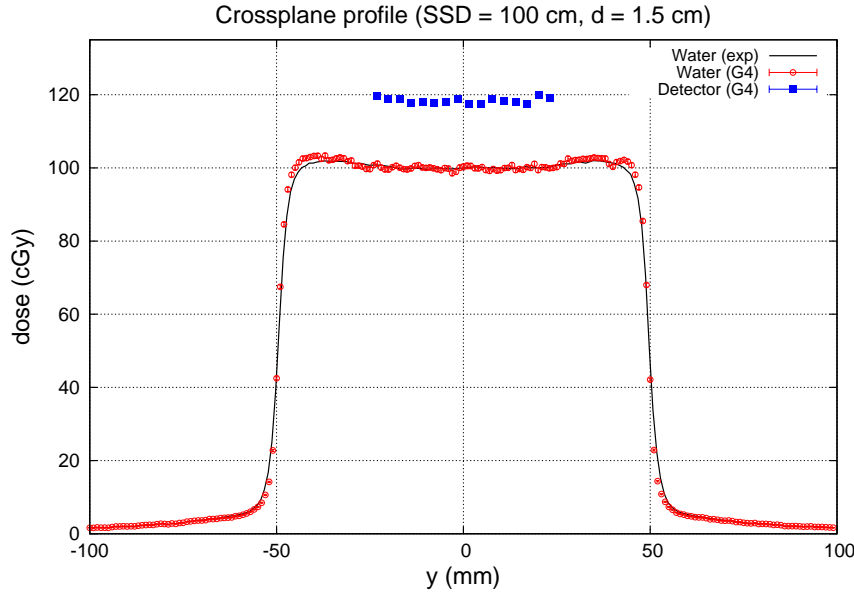


Figura 5.12: Perfil *crossplane* en condiciones de referencia (campo $10 \times 10 \text{ cm}^2$, $SSD = 100 \text{ cm}$, $d = 1,5 \text{ cm}$) obtenido experimentalmente (línea negra), calculado con GEANT4 en agua (puntos rojos) y calculado para cada tira del detector situado en ese punto (puntos azules). La posición de estos últimos corresponde a la posición del centro geométrico de cada tira en la coordenada y . Las barras de error indican la incertidumbre estadística estimada a nivel 1σ .

para el SSSSD, K_{Si} . Éste se define mediante el cociente

$$K_{Si} = \frac{D^{\text{ref}}}{D_{Si,G4}^{\text{ref}}}, \quad (5.6)$$

donde $D_{Si,G4}^{\text{ref}}$ es la dosis depositada en la zona central del detector en estas condiciones de referencia y D^{ref} es la dosis depositada en el mismo punto sin la presencia del detector, o sea, en agua. Por lo tanto, recordando que $D^{\text{ref}} = 1 \text{ cGy}$ y considerando $D_{Si,G4}^{\text{ref}}$ como el valor medio de las cuatro tiras centrales, obtenemos el resultado

$$K_{Si} = 0,849 \pm 0,007. \quad (5.7)$$

La calibración experimental del SSSSD, se ha llevado a cabo calculando un factor de conversión independiente para cada tira, de manera que su lectura se corresponda con 100 cGy para 100 UM , que es la dosis absoluta en agua en esas condiciones de referencia.

Una vez calibrado el SSSSD tanto en GEANT4 como experimentalmente, se ha procedido a comparar su respuesta a diferentes profundidades dentro del maniquí de agua sólida con el PDD mostrado anteriormente en la Fig. 5.5. Para ello se ha considerado el detector situado a una profundidad de $1,5 \text{ cm}$,

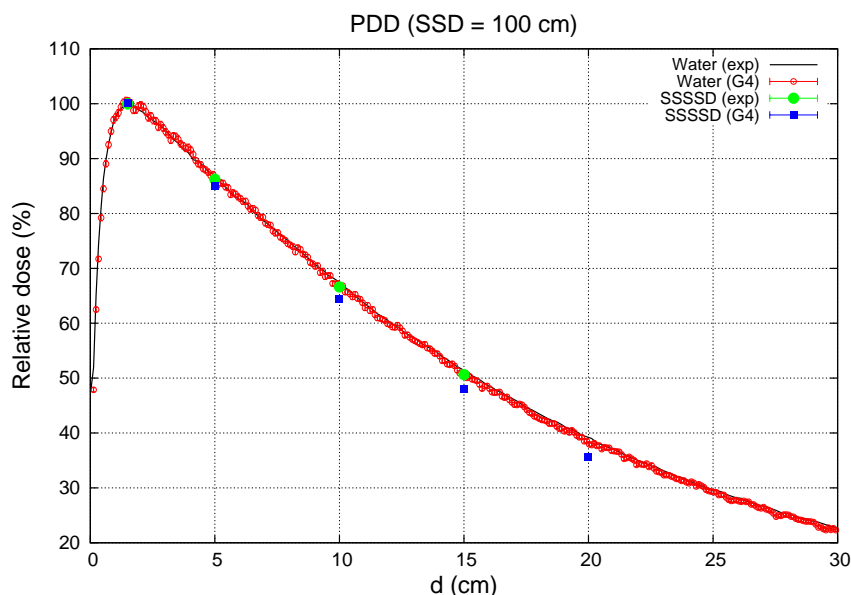


Figura 5.13: PDD en condiciones de referencia (campo $10 \times 10 \text{ cm}^2$, $SSD = 100 \text{ cm}$) medido experimentalmente con detector de diodo (línea negra), calculado con GEANT4 en agua (círculos rojos), obtenido experimentalmente con el SSSSD (círculos verdes) y por simulación GEANT4 del SSSSD (cuadrados azules).

5,0 cm, 10,0 cm, 15,0 cm y 20,0 cm. Los resultados obtenidos se muestran en la Fig. 5.13. Para los cálculos por simulación Monte Carlo, las barras de error son menores que el símbolo utilizado e indican la incertidumbre estimada a 1σ , que es del orden de 0,4 %. Para los resultados experimentales, las barras de error representan las incertidumbres estimadas para la medida, entre el 0,4 % y 0,9 %, que se han calculado mediante propagación cuadrática de las incertidumbres de la señal y del factor de calibración.

Aunque obviamente la dosis calculada a 1,5 cm aparece normalizada correctamente, podemos apreciar una caída ligeramente más acusada para la dosis obtenida simulando el SSSSD con GEANT4 de hasta un 8 % del valor de la dosis a 20 cm profundidad. Esta discrepancia, no observada experimentalmente, podría deberse a una sobre-respuesta conocida para los detectores de silicio ante la irradiación de fotones con energías menores de 400 keV (Rikner y Grusell, 1985; Yin et al., 2004), que experimentalmente compensaría la caída en dosis que observamos en la simulación. Sin embargo, necesitamos profundizar en este análisis.

5.3.4.2. Respuesta en condiciones de penumbra

La respuesta en penumbra del SSSSD se ha realizado para diferentes configuraciones experimentales en las que con un hemicampo de tamaño $5 \times 10 \text{ cm}^2$ se irradia la parte derecha o izquierda del maniquí. En la Fig. 5.14

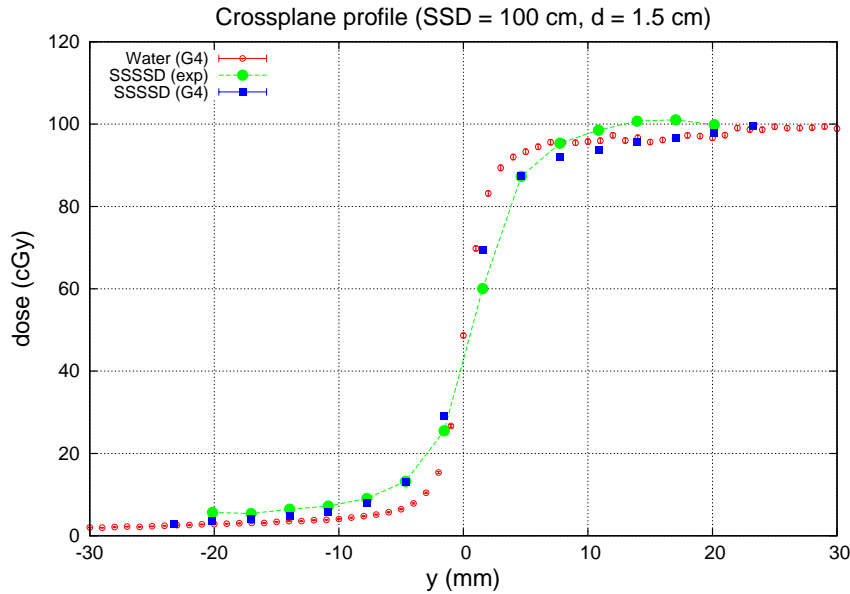


Figura 5.14: Penumbra medida con el detector SSSSD (círculos verdes) en configuración de hemicampo derecho $5 \times 10 \text{ cm}^2$ con el maniquí de agua sólida a $SSD = 100 \text{ cm}$ y profundidad del detector de $1,5 \text{ cm}$ (la línea discontinua se añade como guía). También se presentan los cálculos de GEANT4 para este montaje experimental (cuadrados azules) y para agua (círculos rojos).

se muestra el resultado para el maniquí de agua sólida a $SSD = 100 \text{ cm}$ y el SSSSD colocado a $1,5 \text{ cm}$ de profundidad irradiado por un hemicampo derecho. Los datos experimentales medidos con el SSSSD se representan con círculos verdes, los calculados con GEANT4 para un montaje idéntico con cuadrados azules y el cálculo GEANT4, supuesto que todo el maniquí es agua y no hay detector (nivel estadístico idéntico a los presentados en la sección 5.2), se presenta con círculos rojos. Los símbolos empleados para los cálculos Monte Carlo son mayores que las barras de error, dadas por la incertidumbre estadística (1σ). Todos los datos se corresponden a 100 MU y han sido calibrados en agua según los resultados de la sección 5.3.4.1.

Definimos la penumbra como la región entre los niveles de 20% y 80% de dosis máxima. Para calcularla, consideramos para cada caso un ajuste no lineal a la función

$$f_{\text{pen}}(y) = a_d + \frac{a_u - a_d}{1 + 10^{(y_0 - y)p}}, \quad (5.8)$$

tomada del programa Origin.^h Los parámetros a_d y a_u son las asíntotas inferior y superior, respectivamente, y_0 es el punto donde se alcanza el 50% de la asíntota superior y p está relacionado con el valor de la pendiente en

^hPágina web: <http://www.originlab.com>.

y_0 . La penumbra obtenida para el SSSSD es de $(6,2 \pm 0,6)$ mm, mientras que la que se ha calculado por simulación GEANT4 del dispositivo es de $(5,58 \pm 0,25)$ mm. Considerando las incertidumbres, ambos datos son compatibles. Sin embargo, tal y como se observa en la Fig. 5.14, ambos valores son significativamente mayores que el obtenido en agua tanto con GEANT4, que es de $(4,1 \pm 0,1)$ mm, como experimentalmente usando el detector de diodo de 2,5 mm de diámetro, $(4,00 \pm 0,02)$ mm.¹ Por lo tanto, existe un factor $\sim 1,5$ de discrepancia, atribuible a la diferencia de materiales y en parte también debido a la pérdida de precisión espacial debida a la anchura de las tiras del SSSSD (3,1 mm).

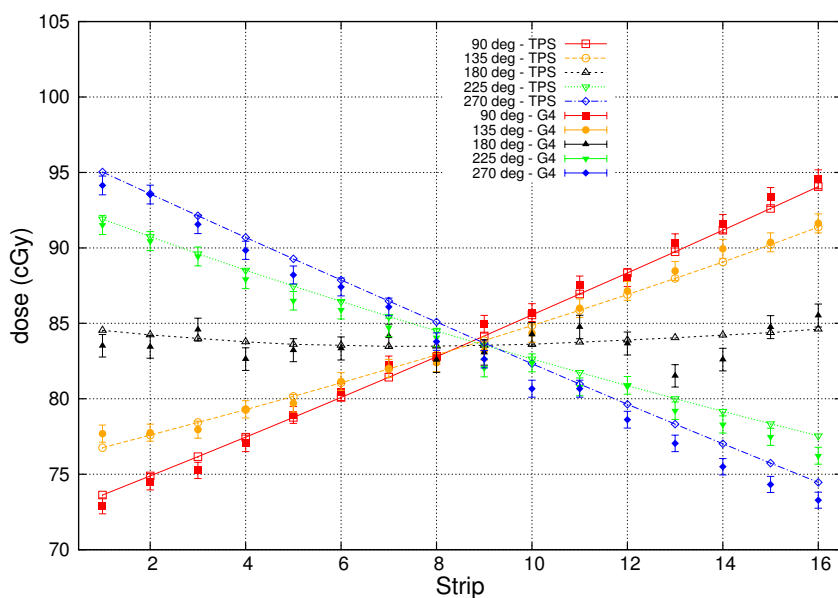
5.3.4.3. Respuesta en configuración paralela al haz

Una vez calibrado el SSSSD en la configuración en la que se irradia perpendicularmente a su plano y comprobada su respuesta en la zona de penumbra, hemos estudiado su comportamiento en el maniquí cilíndrico de polietileno. Ahora la disposición geométrica del detector cambia; ya que el plano que contiene a la superficie del detector está en orientación axial (véase Fig. 5.11c) y recibe por tanto la radiación a lo largo de su superficie sensible. Para tener medidas de dosis en esta configuración hay que realizar una nueva calibración. Sin embargo, en este caso no disponemos del montaje experimental que nos permita tener una medida de dosis absoluta; esto es: una cuba cilíndrica de agua cuyo interior pueda albergar un detector de referencia. La solución que hemos adoptado es basarnos en los valores de dosis calculados por el sistema de planificación Philips Pinnacle³ TPS, que está totalmente verificado para los campos estándares utilizados para nuestra calibración. Estos cálculos han sido también facilitados por el Servicio de Radiofísica del HUVM.

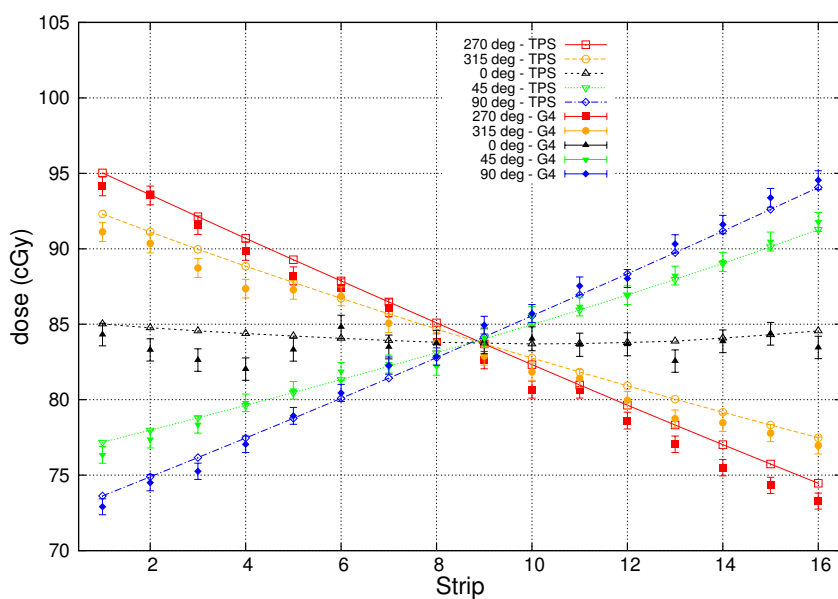
Realizamos entonces una primera comparación entre Pinnacle³ y GEANT4 considerando que todo el conjunto del maniquí, incluido el SSSSD y los cables, está compuesto por agua. De esta manera podemos comprobar que el modelo geométrico implementado en GEANT4 es correcto y que, a su vez, hemos delimitado correctamente las áreas definidas por cada una de las tiras sobre la imagen por TAC del maniquí (Fig. 5.11d) con la que se calcula la dosis con Pinnacle³. En concreto hemos calculado con ambos métodos la dosis media en los distintos volúmenes (en este caso de agua) que definen las tiras del detector. Esto se ha realizado para 8 orientaciones de las tiras respecto al eje del haz de radiación: 0° , 45° , 90° , 135° , 180° , 225° , 270° y 315° .

La Fig. 5.15 muestra los resultados obtenidos. En ellas, el sentido positivo de giro coincide con el del *gantry*, que es en el sentido de las agujas del reloj si miramos el montaje desde los pies de la camilla (en la Fig. 5.11c también es el

¹Datos del HUVM.



(a) Maniquí rotado 90°, 135°, 180°, 225°y 270°.



(b) Maniquí rotado 270°, 315°, 0°, 45°y 90°.

Figura 5.15: Comparación de los resultados obtenidos mediante Pinnacle³ (símbolos huecos unidos con líneas) y GEANT4 (símbolos rellenos) a diferentes ángulos de rotación del maniquí cilíndrico. Las barras de error indican la estimación del error estadístico (1σ).

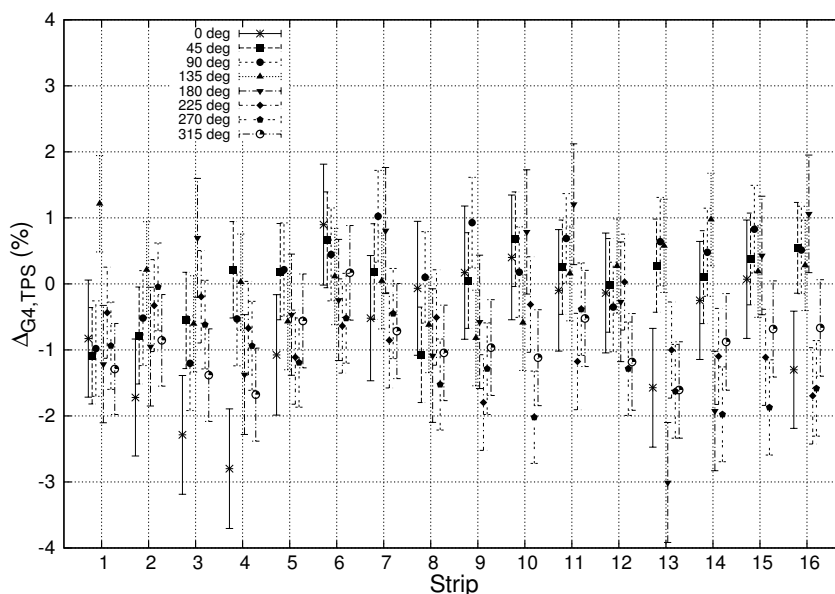


Figura 5.16: Desviación relativa (en porcentaje) de la dosis calculada por GEANT4 para cada ángulo y tira del detector con respecto al valor calculado por Pinnacle³.

sentido horario). Podemos comprobar que existe un acuerdo general, dentro de la tolerancia marcada por las incertidumbres, para todas las orientaciones estudiadas. La incertidumbre estadística en los cálculos con GEANT4 está comprendida entre 0,6 % (para cálculos a 90° y 270°) y 0,9 % (para 0° y 180°) a nivel 1σ, representada en la gráfica por sus correspondientes barras de error. En cuanto al cálculo realizado con Pinnacle³, la incertidumbre viene dada por su principal fuente de error, que es el posicionamiento de las tiras en la malla de la imagen por TAC, cuya precisión es de 0,5 mm (Fig. 5.11d). Según esto y teniendo en cuenta que, aproximadamente, la curva PDD presenta una caída aproximada de 0,4 cGy/mm a profundidades medias (5 cm < d < 10 cm), podemos estimar la precisión del cálculo con Pinnacle³ en ±0,2 cGy.

La Fig. 5.16 muestra la diferencia relativa, $\Delta_{G4,TPS}$, existente entre la dosis calculada con GEANT4, D_{G4} , y la dosis calculada con Pinnacle³, D_{TPS} , estimada mediante

$$\Delta_{G4,TPS} = \frac{D_{G4} - D_{TPS}}{D_{TPS}} . \quad (5.9)$$

En ella puede apreciarse que las diferencias oscilan entre -3% y +1,5%, siendo la discrepancia media de todos los puntos del orden de -0,5%, la cual es ligeramente superior a la precisión estimada para el cálculo realizado con Pinnacle³. Sin embargo, no hemos tenido en cuenta otras posibles fuentes de error, como la precisión intrínseca del cálculo con Pinnacle³ o una mayor incertidumbre de posicionamiento de las tiras en la imagen por TAC que la estimada anteriormente. En cualquier caso, la diferencia relativa media

encontrada entra dentro de los límites aceptables.

Una vez validado el cálculo Monte Carlo de dosis en agua del maniquí, consideramos la simulación de todo el montaje experimental con sus materiales reales. En este caso, los datos de Pinnacle³ se han obtenido simulando que todo el volumen del maniquí es polietileno. Estas dosis, así calculadas, pueden tomarse como dosis de referencia para la calibración en dosis absoluta del detector en este material, ya sea del simulado con GEANT4 como del real. El resultado obtenido para las mismas orientaciones del maniquí se muestra en la Fig. 5.17. Junto con estos cálculos, en la Fig. 5.17 también se muestran la dosis depositada en cada tira del SSSSD medida experimentalmente y calculada mediante GEANT4. Para las medidas experimentales, las barras de error representan la incertidumbre total asociada, estimada entre 0,8 cGy y 1,4 cGy. La incertidumbre estadística de los cálculos Monte Carlo es $\sim 0,7\%$ (1σ). Estas últimas dosis corresponden a dosis calibradas en agua en la disposición del detector perpendicular al haz de radiación según lo discutido en la sección 5.3.4.1.

Claramente el detector no responde igual a la radiación recibéndola a lo largo de su plano. Es necesario recalibrarlo. Para la simulación Monte Carlo, el nuevo factor $K_{G4,\parallel}(i, \alpha)$, viene dado por el cociente

$$K_{G4,\parallel}(i, \alpha) = \frac{D^{\text{TPS}}(i, \alpha)}{D_{G4}^{\text{SSSSD}}(i, \alpha)} \quad (5.10)$$

que en principio puede ser diferente para cada tira i y para cada ángulo tira-haz (α). En esta expresión, $D^{\text{TPS}}(i, \alpha)$ es la dosis calculada para la tira i formando un ángulo α con la dirección del haz y $D_{G4}^{\text{SSSSD}}(i, \alpha)$ es la correspondiente dosis obtenida con GEANT4 calibrada según el resultado obtenido en orientación perpendicular (5.7).

Lo primero que se aprecia en la figura es que este factor puede considerarse constante con respecto al ángulo y a cada tira, lo que va a simplificar mucho el uso del sistema en situaciones reales. El valor medio obtenido para este cociente es

$$K_{G4,\parallel} = 1,54 \pm 0,04 , \quad (5.11)$$

cuya incertidumbre corresponde a la desviación estándar de los cocientes calculados para todas las tiras a todas las orientaciones.

Esta uniformidad también se observa experimentalmente, obteniéndose en este caso el valor (Bocci et al., 2011)

$$K_{\text{det},\parallel} = 1,18 \pm 0,03 , \quad (5.12)$$

cuya incertidumbre se ha estimado tomando también la desviación estándar de los cocientes calculados.

El hecho de que $K_{\parallel} > 1$ proviene de que la perturbación introducida por el detector en esta configuración paralela al haz es mayor que la que

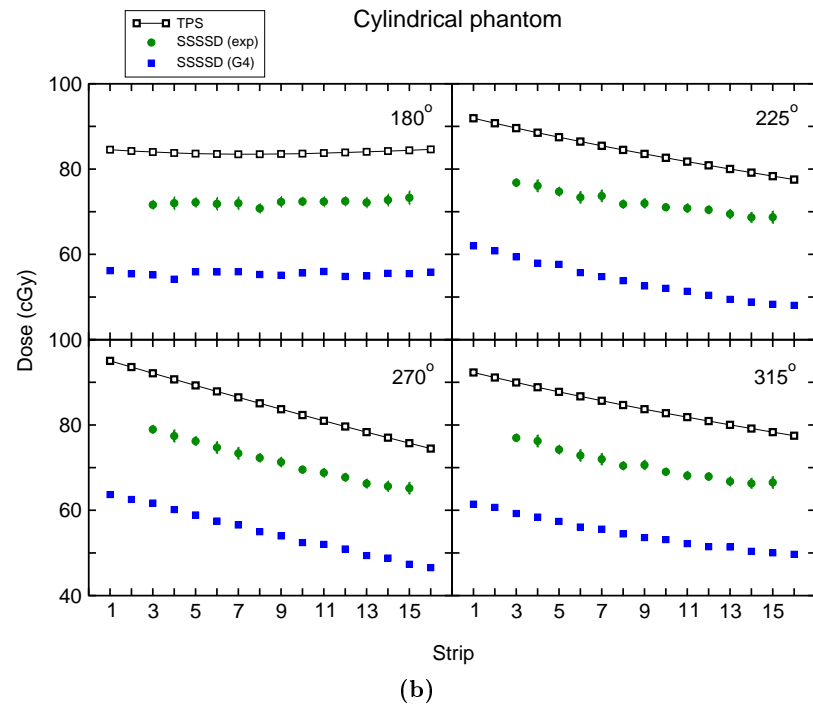
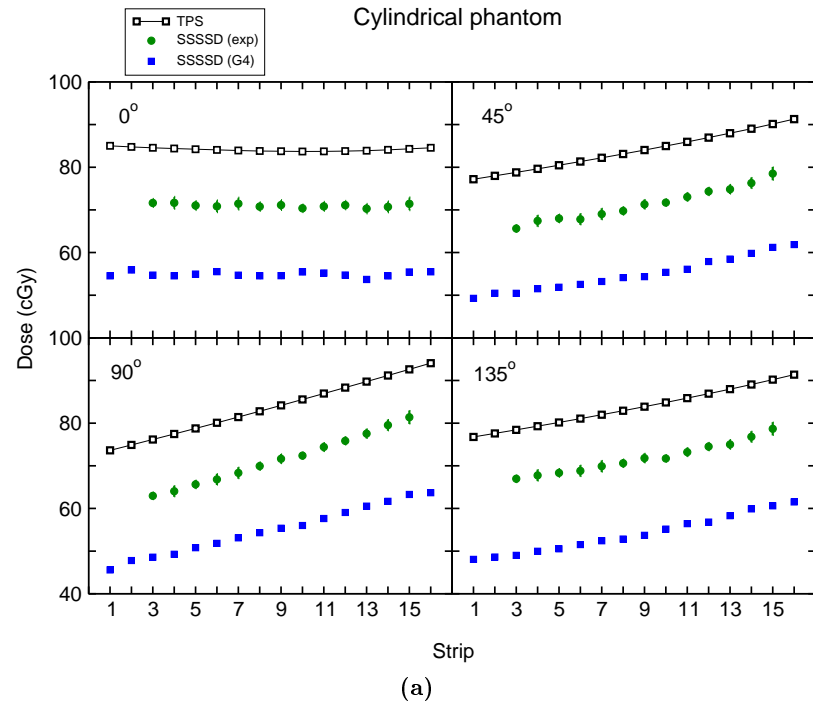


Figura 5.17: Comparación de la dosis calculada por Pinnacle³ para el maniquí cilíndrico de polietileno (cuadrados huecos), por la simulación GEANT4 del detector dentro del maniquí (cuadrados azules) y la obtenida experimentalmente a partir de la señal calibrada del SSSSD (círculos verdes) para diferentes ángulos de rotación del maniquí.

se introduce cuando la radiación incide perpendicularmente. Este resultado es lógico ya que, entre otros factores, en este caso el marco del detector, de material más denso, absorbe parte de la radiación.

Sin embargo, los valores $K_{G4,\parallel}$ y $K_{\text{det},\parallel}$ difieren en un 30 %. Este resultado puede deberse a varias razones:

- La respuesta del detector no está incluida en la simulación y es previsible que ésta sea diferente entre las configuraciones paralela y perpendicular. Por lo tanto, esto explica que la señal generada varíe entre ambas situaciones.
- La ya mencionada sobre-respuesta del silicio para fotones por debajo de 400 keV, que puede superar el 10 % debido a un incremento del coeficiente de absorción másica (Rikner y Grusell, 1985; Yin et al., 2004).
- Se ha estudiado la posibilidad de que la dosis calculada con Monte Carlo en orientación paralela estuviese subestimada. En este sentido, hemos disminuido el valor del corte de producción de secundarias en un orden de magnitud, sin observar una variación en los resultados. También hemos contemplado la posibilidad de que el hueco de aire que rodea al detector implicase una disminución de los electrones que inciden sobre el área sensible del SSSSD; no obstante, hemos considerado que el material de dicho hueco era polietileno, obteniendo los mismos resultados en la simulación. Por lo tanto este mecanismo ha sido descartado.
- En el mismo sentido del párrafo anterior, se ha estudiado el hecho de que la perturbación introducida por el marco en la simulación no fuese la correcta. Para ello, hemos considerado diferentes valores de su densidad (1,6-1,9 g/cm³), sin observar cambios mayores del 3 % en los resultados. En cualquier caso, el hecho de que la tendencia de todas las tiras sea esencialmente la misma a todos los ángulos sugiere que las diferencias absolutas observadas no provienen del marco.
- Otro factor que puede influir de manera diferente en la configuración con el detector perpendicular a la radiación o paralelo a la misma es el posible uso en la simulación de un espectro menos energético que el real. De hecho, en esta última configuración, el marco puede absorber más esta radiación de baja energía y disminuir la dosis en la parte sensible del SSSSD simulado.

La determinación de la contribución relativa de cada uno de estos factores es actualmente objeto de estudio en este trabajo.

5.4. Conclusiones

En primer lugar, hemos descrito el desarrollo de una aplicación GEANT4 para simular el cabezal del acelerador lineal Siemens PRIMUS instalado en el HUVIM, obteniendo un acuerdo del 2% con respecto a los valores experimentales obtenidos en agua en condiciones de referencia ($SSD = 100$ cm) con campos 10×10 cm² y 5×5 cm². Con estos datos se ha obtenido la normalización de los cálculos de Monte Carlo a dosis absoluta.

Posteriormente, hemos mostrado los resultados obtenidos mediante simulación con GEANT4 del estudio de viabilidad de un montaje novedoso para la verificación de tratamientos complejos de radioterapia, basado en la tecnología de detectores de silicio divididos en tiras, utilizando concretamente un SSSSD.

Hemos realizado una caracterización del detector con un maniquí plano. Tras una primera calibración del SSSSD en esta configuración, hemos realizado un estudio de respuesta en condiciones de penumbra con el SSSSD colocado perpendicularmente al haz dentro del maniquí de agua sólida. Se ha obtenido una penumbra 2 mm mayor que la que se mide en agua, debido a la diferencia de materiales y a la precisión espacial del SSSSD, determinada por la anchura de cada tira (3,1 mm).

Finalmente hemos evaluado la dosis medida por el SSSSD dentro del maniquí cilíndrico de polietileno y paralelo al haz, considerando diferentes ángulos de rotación, a fin de calibrar el detector en la nueva configuración. Aunque se observan diferencias significativas entre el cálculo de dosis experimental obtenido a partir de la señal del SSSSD y los valores calculados por GEANT4, cuyo origen es objeto de estudio, los resultados presentados demuestran que el montaje es viable para ser utilizado como sistema de verificación de tratamientos de radioterapia. Por ello, hemos comenzado un trabajo de análisis detallado de la simulación, en el que se incluya un modelo de respuesta del detector dentro de la propia simulación GEANT4, con el fin de disponer de más datos. En cualquier caso, el uso del código GEANT4 como un laboratorio virtual ha sido muy útil para el desarrollo de este trabajo y verificar la bondad de nuestro montaje experimental.

Capítulo 6

Caracterización de un acelerador clínico Siemens ONCOR

RESUMEN: En este capítulo mostramos la validación de una aplicación GEANT4 realizada para simular el cabezal de un acelerador lineal ONCOR de Siemens. La geometría del cabezal ha sido modelada con precisión sub-milimétrica, incluyendo un modelo geométrico de su colimador multiláminas MLC-160, construido automáticamente mediante un programa que hemos creado para reproducir exactamente su geometría. La validación ha sido realizada tanto en dosis relativa como en dosis absoluta frente a curvas experimentales de dosis en agua obtenidas para el modo de fotones de 6 MV de energía nominal, facilitadas por el Servicio de Radiofísica del HUVM. Por lo tanto, este trabajo también presenta una validación del código GEANT4 de interés en radioterapia.

ABSTRACT: In this chapter, the validation of a GEANT4 application made to simulate the Siemens ONCOR linac treatment head is presented. The treatment head geometry was modelled with sub-millimetric accuracy, including a geometric model of the MLC, named MLC-160, which was created automatically by means of a program developed in our group to reproduce exactly its geometry. The validation has been performed either in relative and absolute dose against experimental dose curves in water obtained for the 6-MV photon mode, provided by the Radiophysics Service at HUVM. Thus, this work also constitutes a validation of the GEANT4 code of interest in radiotherapy.

6.1. Introducción

Recientemente, el HUVM ha adquirido un nuevo acelerador lineal para radioterapia, fabricado por Siemens, modelo ONCOR. Este acelerador presenta una prestaciones tecnológicas más avanzadas que los aceleradores PRIMUS, también fabricados por Siemens, que hasta ahora eran los únicos disponibles en el Servicio de Radiofísica del HUVM. En concreto, permite realizar radioterapia guiada por imagen, en inglés IGRT, ya que incorpora un sistema de imagen portal de silicio amorfo y un *software* capaz de hacer reconstrucciones tomográficas del paciente con megavoltaje, permitiendo fusionar la imagen TAC de planificación de tratamiento con la imagen del paciente el día que está recibiendo el tratamiento y, por lo tanto, hace posible la corrección en el posicionamiento con mucha mayor precisión.

Por otra parte, el acelerador ONCOR incorpora el nuevo colimador multiláminas MLC-160 diseñado y fabricado por Siemens (Tacke et al., 2006, 2008). Tanto la estructura del colimador como la forma de las láminas, incluidas sus bordes internos (*leaf ends*) son extremadamente complejas. En particular, los bordes interiores de las láminas presentan un patrón que alterna zonas cóncavas y convexas. Este patrón influye en la forma y anchura de la penumbra en función de la posición de la lámina con respecto al eje del haz. Esto implica que sea necesario modelar con gran precisión el funcionamiento de este colimador para poder caracterizar con la precisión requerida las penumbras de campos pequeños, utilizados sobre todo en tratamientos de IMRT.

Hasta ahora no existe ningún módulo implementado en el código BEAMnrc (Rogers et al., 1995) que reproduzca su geometría con precisión. Asimismo, el sistema de planificación utilizado en el HUVM, Philips Pinnacle³, no contempla la posibilidad de modelar la forma de este tipo de láminas, con lo que hay que acudir a aproximaciones en los módulos de modelización para considerar colimadores con penumbras variables con respecto a la posición. Tacke et al. (2006) simularon el MLC-160 con GEANT4, aprovechando las prestaciones de este código en cuanto a la reproducción de geometrías complicadas. Para ello utilizaron la herramienta de importación de datos obtenidos mediante una aplicación CAD (*Computer-Aided Design*).

Nuestra estrategia para simular el MLC-160 ha sido implementar un algoritmo matemático en una aplicación GEANT4 que permite reproducir la forma de las láminas a partir de los datos facilitados por Siemens. Además, este programa ha sido desarrollado siguiendo un diseño generalizado, de tal modo que permite reproducir la geometría de cualquier MLC cuya geometría pueda ser descrita con los mismos parámetros que definen la del MLC-160. Por lo tanto, el trabajo que presentamos ofrece una gran versatilidad en este sentido.

Una vez reproducida toda la geometría del cabezal del acelerador ONCOR con GEANT4, hemos validado la simulación frente a medidas experimentales de dosis en agua, realizadas para la caracterización del aparato funcionando en modo de fotones de 6 MV de energía nominal. Dicha validación ha sido realizada tanto en dosis relativa como en dosis absoluta.

Estructura de este capítulo

En la sección 6.2 describimos la geometría del cabezal del acelerador Siemens ONCOR con especial atención al modelo geométrico diseñado para reproducir con exactitud la compleja geometría que presenta el MLC-160. Posteriormente, en la sección 6.3 se describe el procedimiento llevado a cabo para calibrar la apertura tanto de las mordazas como de las láminas del MLC-160, mediante la comparación con los resultados experimentales. Asimismo, describimos brevemente la manera en la que hemos ajustado los parámetros del haz de electrones a la entrada del cabezal. En la sección 6.4 comparamos las curvas de dosis obtenidas con GEANT4 con las medidas experimentales de caracterización del acelerador. Dicha comparación se realiza tanto en dosis relativa como en dosis absoluta, incluyendo la comparación de los factores de salida obtenidos. Finalmente, en la sección 6.5 exponemos las conclusiones de este trabajo.

6.2. Simulación del cabezal del acelerador con el colimador MLC-160

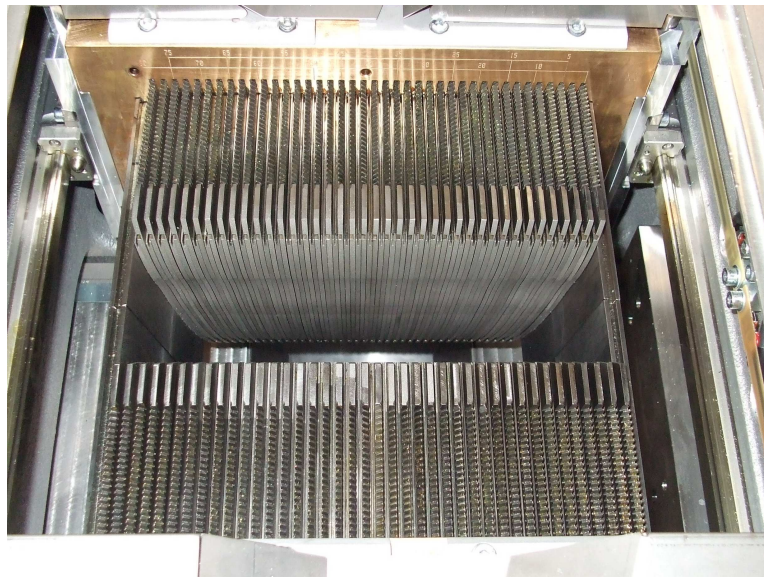
6.2.1. Geometría del cabezal y el MLC-160

En la Fig. 6.1a mostramos una fotografía del acelerador lineal ONCOR, fabricado por Siemens, idéntico al instalado en el HUVVM. Como ya avanzamos en la introducción, utiliza el nuevo colimador de Siemens, modelo MLC-160, mostrado en la Fig. 6.1b. Su denominación se debe a que cada uno de los bancos del MLC presenta un total de 80 láminas. Cada una de ellas tiene una anchura proyectada sobre el plano del isocentro (situado a 100 cm del blanco) de 5 mm, frente a la anchura proyectada de 1 cm del colimador instalado en el PRIMUS, descrito en la sección 5.2.1. Esto, junto con otras prestaciones técnicas descritas por Tacke et al. (2006, 2008), hace que el MLC-160 sea un colimador con mejores prestaciones para la aplicación de tratamientos por IMRT, ya que presenta una capacidad mayor para conformar campos de radiación irregulares que reproduzcan la forma del volumen que queramos irradiar.

La Fig. 6.2a muestra el modelo realizado en GEANT4 para simular el cabezal del ONCOR funcionando en modo de fotones de 6 MV de energía nominal. Los componentes fijos del mismo (blanco, filtro aplanador, cámara



(a)



(b)

Figura 6.1: (a) Fotografía del acelerador lineal Siemens ONCOR. (b) Imagen del colimador multiláminas MLC-160, también de Siemens.

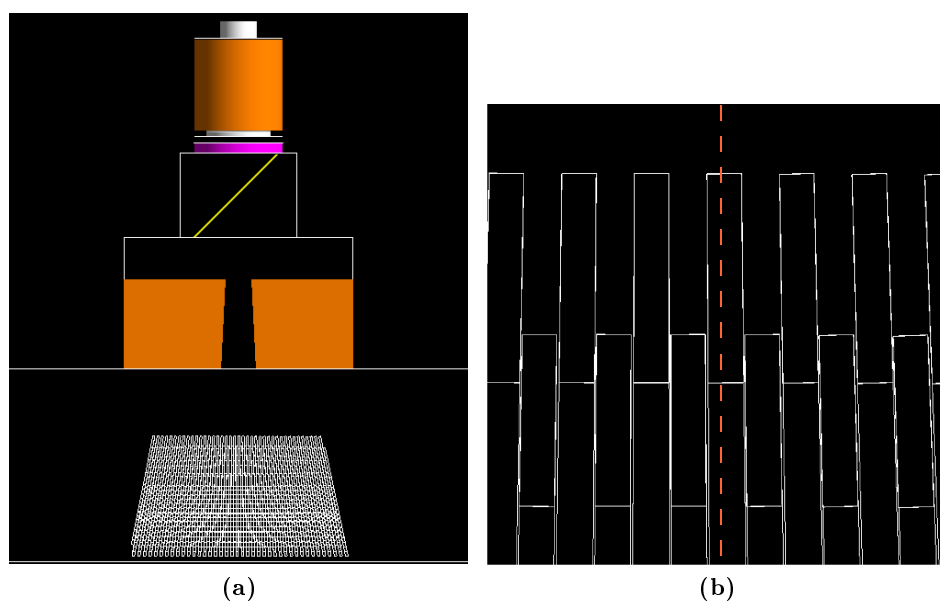


Figura 6.2: Modelado del cabezal del acelerador lineal ONCOR en el modo de fotones de 6 MV de energía nominal. (a) Elementos del cabezal reproducidos con GEANT4. (b) Detalle del colimador MLC-160, donde se aprecian los huecos entre láminas y la inclinación de éstas con respecto al rayo trazado desde el centro de la fuente (representado para la lámina central).

monitora y espejo) son iguales que los del PRIMUS, ya descritos en la sección 5.2.1. Las mordazas del ONCOR también son idénticas a las del PRIMUS, si bien en el caso de éste último su distancia a la fuente de radiación (punto donde los electrones primarios inciden sobre el blanco de wolframio) es ligeramente diferente. Finalmente, en la parte inferior de la Fig. 6.2a se observa uno de los bancos del MLC-160, quedando el otro detrás de éste en la imagen.

La reproducción de la geometría del MLC-160 es una tarea difícil debido a las complejas características de este colimador. Las principales son:

- Ausencia de machihembrado entre láminas. En este colimador las láminas no presentan salientes ni hendiduras. Entonces, dado que debe existir un pequeño hueco ($< 0,2$ mm) entre láminas para que éstas se puedan desplazar independientemente una de la otra, la solución que se adoptó en su diseño fue la de posicionar cada lámina con una ligera inclinación con respecto al rayo trazado desde el centro de la fuente de radiación (en modo de fotones es el blanco de wolframio).
- Las láminas pares están situadas a una distancia de la fuente distinta de la de las impares, debido a restricciones mecánicas del diseño. Como las láminas deben ser muy finas ($< 2,5$ mm) para que su proyección en el plano del isocentro sea de 5 mm, no es posible colocar en el mismo

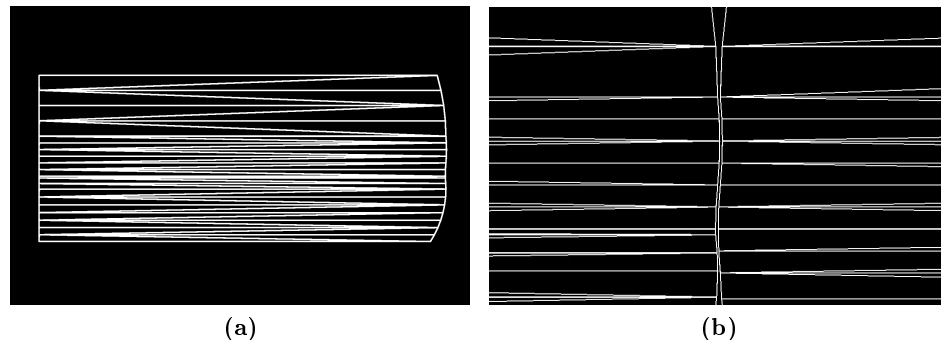


Figura 6.3: Láminas del colimador MLC-160. (a) Imagen lateral de una de las láminas inferiores, mostrando la trayectoria curva que define la forma del borde de la lámina. (b) Detalle de la posición de cierre de dos láminas, donde se aprecia que los bordes encajan de manera que no exista un hueco de aire entre láminas opuestas alineado con el haz directo.

plano todos los componentes mecánicos encargados del movimiento de todas las láminas.

- El borde interno de las láminas está definido por una composición de cuatro arcos de circunferencia, de manera que los dos arcos de circunferencia centrales siguen un patrón de curvatura cóncava-convexa que encaja con el borde interno de la lámina situada en el banco opuesto. De esta manera se crea un ligero solapamiento entre ambas láminas que evita que el pequeño hueco de aire que queda entre éstas ($< 0,3$ mm) cuando se cierran pueda estar alineado con el haz directo, minimizando por tanto la radiación debida a fugas entre láminas opuestas.

Las dos primeras características pueden observarse en la Fig. 6.2b, que muestra una imagen ampliada de la parte superior de uno de los bancos del MLC-160. Por su parte, en la Fig. 6.3 presentamos la forma de una de las láminas junto con una imagen ampliada del aspecto que presenta una lámina y su opuesta cuando se encuentran cerradas, donde se observa claramente el patrón de curvatura cóncava-convexa del pequeño hueco de aire que queda entre ambas.

Debido a la complejidad manifiesta de la geometría del MLC-160, hasta ahora, según nuestra exhaustiva revisión bibliográfica, el MLC-160 sólo había sido simulado con GEANT4 mediante la importación de archivos de datos generados mediante un programa CAD que almacenaba la información del posicionado exacto de los vértices de cada una de las láminas (Tacke et al., 2006). Sólo de esta manera se ha conseguido reproducir tanto la posición que ocupaba cada lámina como su correspondiente ángulo de inclinación.

En este trabajo se ha reproducido la geometría completa del MLC-160

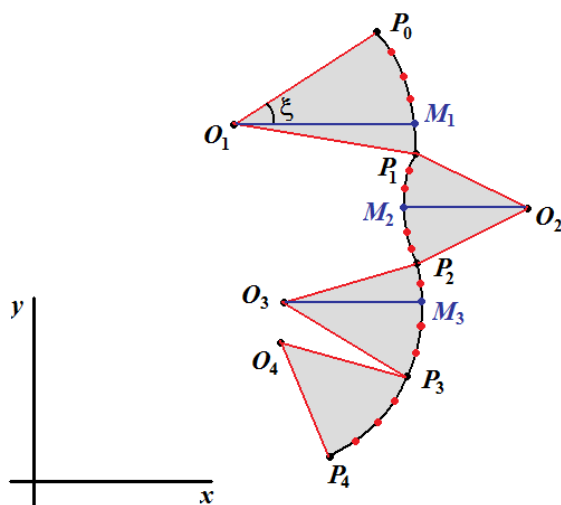


Figura 6.4: Esquema conceptual del procedimiento seguido para discretizar los arcos de circunferencia que definen el borde de las láminas del MLC-160.

a partir de la información facilitada por el fabricante,^a sin necesidad de recurrir a la importación de datos generados mediante una aplicación CAD. La estrategia fue:

- Reproducción matemática de la forma del borde interno de las láminas a partir de la información facilitada por Siemens. Como ya hemos mencionado, la forma del borde viene determinada por la intersección de cuatro arcos de circunferencia. Entonces, hemos diseñado un algoritmo que discretiza la curva que define el borde a partir de la información relacionada con la posición del centro (O_i) y el radio (R_i) de cada uno de estos arcos. Un esquema conceptual del procedimiento se muestra en la Fig. 6.4. Los pasos que se siguen son:
 1. Obtenemos de los puntos de corte entre cada pareja de arcos de circunferencia, P_i . Evidentemente, los puntos extremos vienen dados por la intersección con los bordes superior e inferior de la lámina.
 2. Definimos una tolerancia angular determinada, $\Delta\xi$, para el discretizado de los arcos de circunferencia.
 3. Calculamos para cada arco de circunferencia su amplitud angular, determinada por los valores extremos del ángulo ξ_i , etiquetados como $\xi_{i,o}$ y $\xi_{i,f}$.

^aEsta información está protegida por acuerdos de confidencialidad. Por esta razón, la descripción de la geometría del MLC-160 se realiza sin facilitar medidas exactas ni de las láminas ni sobre su posicionamiento.

4. Si en el sistema de referencia de la Fig. 6.4 los valores extremos son de signo contrario (i. e. $\xi_{i,o}\xi_{i,f} < 0$), entonces subdividimos el arco correspondiente en dos partes a partir del punto M_i obtenido para $\xi_i = 0$. De esta manera nos aseguramos la inclusión de los puntos del arco cuya proyección sobre el eje x sea extremal (véase Fig. 6.4). En caso contrario ($\xi_{i,o}\xi_{i,f} \geq 0$), no es necesario subdividir el arco.
 5. Dividimos cada uno de los arcos definidos por los puntos P_i y/o M_i en partes iguales definidas por una determinada amplitud angular $\Delta\xi_i$, realizando tantas divisiones como sean necesarias para cumplir la condición $\Delta\xi_i \leq \Delta\xi$.^b
- Una vez discretizado el borde, construimos la forma de la lámina mediante la unión de capas definidas sobre la coordenada y (referida al sistema de referencia de la Fig. 6.4). Para ello este programa necesita como datos de entrada la altura de la lámina y la anchura de ésta en los extremos superior e inferior. Cada capa constituye un sólido delimitado en y por dos puntos contiguos del discretizado, con las dimensiones correspondientes en x y z (sistema de referencia de la Fig. 6.4) a la altura y de ambos puntos. Dado que la anchura (z) de la lámina es diferente en los extremos superior e inferior, la forma de cada capa es un trapecioide asimétrico, que definimos en GEANT4 utilizando la forma geométrica `G4Trap`. Una vez construidas las diferentes capas, generamos la forma total de la lámina mediante unión booleana de todas las capas.
 - Finalmente, parametrizamos la posición e inclinación de cada una de las láminas en función de su lugar en el banco y de su apertura proyectada sobre el isocentro (definida por el tamaño del campo de radiación en esa posición). Para ello, el programa necesita como datos de entrada:
 - Número de láminas en cada banco.
 - Posiciones de los extremos superior e inferior de todo el colimador multiláminas.
 - Posiciones que ocupan en condiciones de apertura igual a cero.

El resultado de este procedimiento, con una tolerancia angular $\Delta\xi = 5^\circ$, es el modelo del MLC-160 que se muestra en las Figs. 6.2-6.3. Las líneas que delimitan cada una de las capas con las que se construyen las láminas pueden observarse claramente en la Fig. 6.3.

^bPor ejemplo, si el arco de circunferencia tiene una amplitud angular de 21° y la tolerancia es de 5° , entonces dicho arco sería dividido en 5 partes iguales, cada una con una amplitud angular de $4,2^\circ$.

Debemos resaltar que con este algoritmo podemos reproducir la forma geométrica de estas láminas con la precisión que queramos. Además, gracias a los parámetros de entrada que se utilizan, con este programa es posible reproducir la geometría de cualquier colimador multiláminas, siempre y cuando la forma y posición de láminas en cada banco puedan ser descritas en pares e impares (como ocurre en el MLC-160), no exista machihembrado y el borde interior de las láminas pueda ser expresado como una unión de arcos de circunferencia cuyos parámetros (radio y posición del centro) puedan ser establecidos.

6.2.2. Características de la simulación GEANT4

La lista de física utilizada para simular el modo de 6 MV de energía nominal del ONCOR es la misma que la que hemos presentado para el PRIMUS en la sección 5.2.2, basada en el paquete *Livermore Low-Energy EM*.

Asimismo, la simulación del cabezal se ha realizado siguiendo el mismo procedimiento de tres etapas descrito para el PRIMUS (sección 5.2.2). Por lo tanto, generamos un primer archivo *IAEAphsp* para almacenar el espacio de fases bajo la cámara monitora y posteriormente un segundo archivo *IAEAphsp* para almacenar el espacio de fases del campo de radiación. La única diferencia con respecto al procedimiento seguido para el PRIMUS es que en la primera etapa del ONCOR hemos simulado $2,0 \times 10^9$ historias. Sin embargo, el número de veces que cada partícula se recicla en las etapas segunda y tercera sigue siendo de 5 (aplicando simetría axial) y de 25, respectivamente, por lo que el número de historias efectivo es de $2,5 \times 10^{11}$.

Al igual que en el capítulo 5, estas simulaciones, han sido realizadas con la versión 9.3.p01 de GEANT4, instalado en un *cluster* linux (Ubuntu Server 8.04 64-bit y Debian Etch 64-bit) compuesto por tres servidores Dell PowerEdge 2970, cada uno con dos procesadores Intel Xeon de cuádruple núcleo a 2.66 GHz y con 8 GB de memoria RAM.

6.3. Caracterización del acelerador

En esta sección mostramos el procedimiento seguido para realizar el calibrado en apertura tanto de las mordazas como de las láminas del MLC-160 a partir de los perfiles experimentales de dosis relativa a diferentes tamaños de campo.^c Una vez calibradas las aperturas, hemos procedido a calcular los parámetros del haz primario de electrones que incide sobre el blanco de wolframio donde se producen los fotones por radiación de frenado. Concretamente, hemos calculado el centroide del espectro de energía y el tamaño del haz, caracterizado en términos de *FWHM*.

^cFacilitados por H. Miras y R. Arráns, Servicio de Radiofísica del HUVM.

6.3.1. Calibración en apertura

En GEANT4 las aperturas tanto de las mordazas como de las láminas del MLC-160 son calculadas a partir de su proyección geométrica realizada desde la fuente sobre el plano perpendicular al eje de propagación que contiene al isocentro ($SSD = 100$ cm). Para ello, comparamos el tamaño del campo de radiación obtenido mediante simulación GEANT4 con el tamaño del campo medido experimentalmente con un detector de diodo de 2,5 mm de diámetro y 0,5 mm de espesor, encapsulado en resina epoxy. El tamaño del campo se mide con un perfil de dosis en agua a 100 cm de la fuente ($SSD = 90$ cm), y se define como la distancia que existe entre los puntos en los que la dosis depositada en agua es el 50 % de nivel de dosis en el centro del perfil.

Dado que el borde de las mordazas es recto y que además éstas se mueven siguiendo la divergencia del haz, proyectada desde la fuente, no se esperan grandes desviaciones entre la apertura calculada geoméricamente en la simulación y el tamaño del campo de radiación en la dirección *inplane*.

Sin embargo, las láminas del MLC-160, que se mueven según la dirección *crossplane*, presentan un borde de forma irregular y su desplazamiento es horizontal, sin seguir por tanto la divergencia del haz proyectada desde la fuente. En la simulación, la posición de las láminas del MLC-160 se calculan de manera que el borde de la lámina a mitad de altura se coloque sobre el rayo divergente trazado desde la fuente hacia el plano del isocentro. Por lo tanto, por las características de su movimiento es probable que la posición de la penumbra del campo de radiación no coincida con la posición del rayo divergente que pasa por el borde de la lámina, a media altura de ésta.

Por ello, hemos realizado una calibración de las aperturas, tanto de las mordazas como del MLC-160 para obtener correctamente el tamaño de campo. Dicha calibración la hemos realizado utilizando los perfiles experimentales obtenidos en agua para $SSD = 100$ cm y profundidad $d = 1,5$ cm para campos cuadrados de dimensiones 2×2 cm², 5×5 cm², 10×10 cm² y 20×20 cm² en las direcciones *inplane* (para las mordazas) y *crossplane* (para el MLC-160). Todos ellos han sido normalizados a la dosis obtenida en el centro. En este sentido, debemos mencionar que la calibración experimental de la apertura del MLC-160 también es aproximada, debido a la complejidad discutida en el párrafo anterior.

Para estas simulaciones, hemos utilizado un haz de electrones cuyo espectro de energía es una gaussiana centrada en 6,0 MeV y *FWHM* del 14 % del valor de la energía media. La distribución espacial de los electrones se ha modelado considerando una gaussiana 2D con una *FWHM* de 1,5 mm. En cuanto a la apertura de las mordazas y del MLC-160, éstas han sido reguladas por aproximación hasta conseguir una coincidencia entre el tamaño de campo experimental y el simulado de $\sim 0,5$ mm.

La Tabla 6.1 muestra los resultados obtenidos mediante nuestro procedimiento. De ellos podemos concluir que la apertura de las mordazas puede

Campo	Mordazas (cm $\pm 0,05$)	MLC-160 (cm $\pm 0,05$)
$2 \times 2 \text{ cm}^2$	1,00	1,00
$5 \times 5 \text{ cm}^2$	2,50	2,55
$10 \times 10 \text{ cm}^2$	5,00	5,10
$20 \times 20 \text{ cm}^2$	9,90	10,35

Tabla 6.1: Posición de las mordazas y cada uno de los bancos del MLC-160 para conseguir un acuerdo $\sim 0,5$ mm entre el tamaño de campo obtenido con GEANT4 y el experimental.

ser calibrada mediante una relación lineal del tipo

$$X_{\text{jaw,G4}} = m_{\text{jaw}} X_{\text{exp}} , \quad (6.1)$$

donde $X_{\text{jaw,G4}}$ es la apertura de las mordazas para obtener el campo de radiación y X_{exp} es la apertura experimental. Por ajuste de mínimos cuadrados se obtiene

$$m_{\text{jaw}} = (0,9924 \pm 0,0025) . \quad (6.2)$$

En el caso de la apertura del MLC-160, ésta ha sido calibrada usando una relación cuadrática del tipo

$$X_{\text{MLC,G4}} = a_{1,\text{MLC}} X_{\text{exp}} + a_{2,\text{MLC}} X_{\text{exp}}^2 , \quad (6.3)$$

donde $X_{\text{MLC,G4}}$ es la apertura que es necesario definir en el MLC-160 para obtener el campo de radiación determinado por X_{exp} . Los valores de los parámetros $a_{1,\text{MLC}}$ y $a_{2,\text{MLC}}$, obtenidos mediante ajuste no lineal, son

$$\begin{aligned} a_{1,\text{MLC}} &= (1,008 \pm 0,004) , \\ a_{2,\text{MLC}} &= (2,7 \pm 0,5) \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1} . \end{aligned} \quad (6.4)$$

6.3.2. Obtención de los parámetros del haz de electrones

Como ya ha sido comentado anteriormente (sección 5.2.2), generalmente en los aceleradores lineales clínicos los parámetros del haz de electrones a su entrada en el cabezal pueden variar ligeramente con respecto a los valores facilitados por el fabricante debido principalmente al procedimiento de *sin-tonizado* de la guía de onda. Por ello, los parámetros de energía y focalizado del haz pueden variar ligeramente de unas máquinas a otras, aunque éstas sean idénticas. Debido a la dificultad de medir experimentalmente tanto el tamaño del haz como su espectro, generalmente se suelen establecer sus características mediante análisis de ingeniería inversa.

Pena et al. (2007) propusieron un procedimiento automático para determinar los parámetros del haz primario de electrones considerando el

PDD y los perfiles para campos de $2 \times 2 \text{ cm}^2$, $10 \times 10 \text{ cm}^2$ y $20 \times 20 \text{ cm}^2$. Sin embargo, dicho procedimiento resulta extremadamente lento en GEANT4 debido a la ausencia de técnicas de reducción de varianza implementadas (este aspecto se analiza en la sección 6.4). Por ello, hemos optado por realizar un análisis estimativo basado en el trabajo de Sheikh-Bagheri y Rogers (2002), donde se analiza cómo influyen los distintos parámetros del haz tanto en la fluencia radial de fotones a $SSD = 100 \text{ cm}$ como en el PDD.

Los parámetros del haz que más influyen en la forma del PDD y de los perfiles laterales son la energía media de los electrones, \overline{E}_e , y la $FWHM$ espacial, $FWHM(r)$, en las direcciones *inplane* y *crossplane*. La energía media es el parámetro que determina principalmente tanto la profundidad del máximo del PDD como la rapidez con la que la dosis cae a profundidades mayores. Por otro lado, la anchura de las penumbras de los perfiles viene determinada principalmente por la $FWHM(r)$ del haz en esa dirección. Asimismo, la altura de los hombros de los perfiles con respecto al centro depende tanto de \overline{E}_e como de $FWHM(r)$.

Teniendo esto en cuenta, y como una primera aproximación, hemos considerado un haz de electrones de espectro gaussiano a la entrada del cabezal y una distribución espacial gaussiana 2D cuya anchura es la misma en todas las direcciones. No hemos considerado divergencia de haz ni correlación de la energía con la distribución espacial.

Para el análisis, hemos combinado los siguientes valores para cada parámetro:

- Energía media (MeV): 5,8, 6,0, 6,2 y 6,4.
- Anchura espectral (FWHM): 14 %.
- $FWHM$ espacial (mm): 1,0, 1,5 y 2,0.

El motivo de probar con valores de \overline{E}_e en pasos de 0,2 MeV y de $FWHM(r)$ en pasos de 0,5 mm se debe a que la dosis se ha calculado con GEANT4 con una incertidumbre asociada del orden del 0,7% (1σ). Con este nivel estadístico, Sheikh-Bagheri y Rogers (2002) demostraron que un cambio en la energía media de 0,2 MeV puede producir cambios del orden de 3σ en el ajuste con las curvas PDD. Por razones análogas, hemos elegido un paso de 0,5 mm para $FWHM(r)$. En cuanto a la anchura del espectro de energía, hemos considerado uno de los valores nominales encontrados en la literatura (Pena et al., 2007).

El procedimiento que hemos seguido ha sido, primero, elegir las dos energías medias que mejor reproducen los PDD experimentales para los campos citados anteriormente, considerando para todos los casos $FWHM(r) = 1,5 \text{ mm}$. Los mejores ajustes se han obtenido para 6,2 MeV y 6,4 MeV. Posteriormente, para ambas energías hemos comparado los perfiles laterales, calculados a la profundidad $d = 1,5 \text{ cm}$, con los correspondientes perfiles

laterales experimentales para los distintos valores de $FWHM(r)$. De todos ellos, el mejor ajuste global se ha obtenido con esta combinación:

$$\begin{aligned}\overline{E_e} &= 6,2 \text{ MeV} , \\ FWHM(r) &= 1,5 \text{ mm} .\end{aligned}\tag{6.5}$$

Que son por tanto los parámetros del haz primario de electrones que hemos utilizado para simular el cabezal del acelerador ONCOR. En la siguiente sección, mostramos las curvas de dosis obtenidas a distintos tamaños de campo.

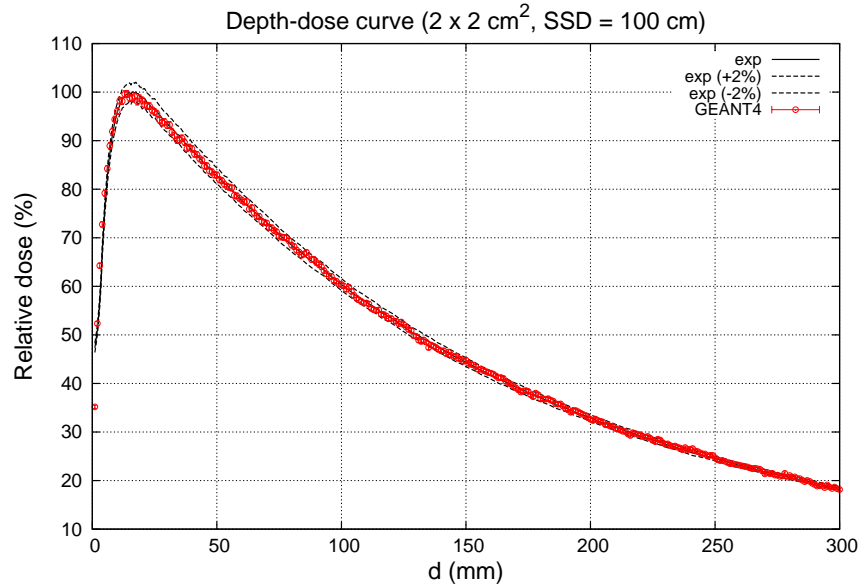
6.4. Resultados y discusión

6.4.1. Curvas de dosis relativa

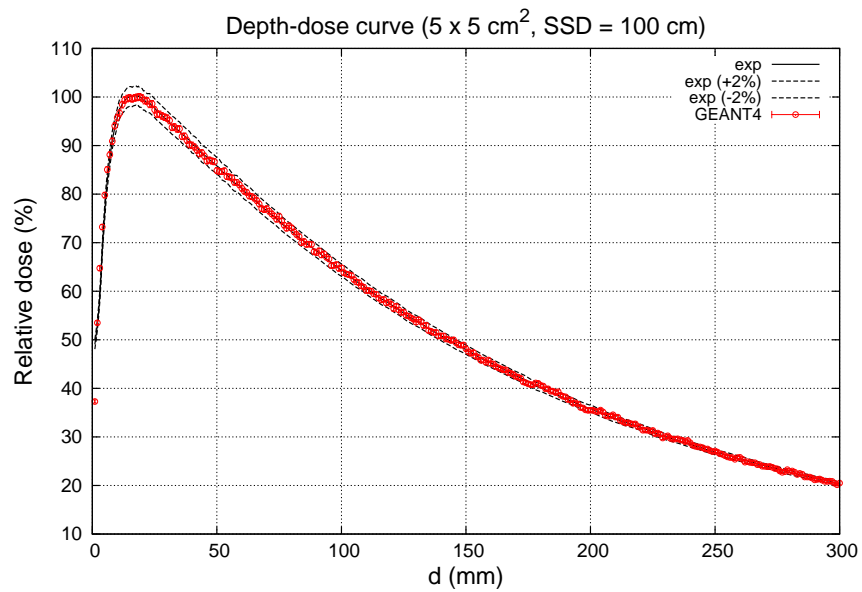
La Fig. 6.5 muestra la curva PDD calculada en agua ($SSD = 100 \text{ cm}$) con GEANT4 frente a la obtenida experimentalmente para un campo $2 \times 2 \text{ cm}^2$ (Fig. 6.5a), un campo $5 \times 5 \text{ cm}^2$ (Fig. 6.5b), un campo $10 \times 10 \text{ cm}^2$ (Fig. 6.5c) y un campo $20 \times 20 \text{ cm}^2$ (Fig. 6.5d), utilizando los parámetros de haz obtenidos anteriormente (sección 6.3.2). Los resultados experimentales han sido obtenidos por el Servicio de Radiofísica del HUVM utilizando un detector de cámara de ionización de $0,125 \text{ mm}^3$ con un paso en profundidad de $0,5 \text{ mm}$ para profundidades menores de $2,0 \text{ cm}$, de $1,0 \text{ mm}$ para profundidades entre $2,0 \text{ cm}$ y $6,0 \text{ cm}$ y de $2,5 \text{ mm}$ para profundidades mayores de $6,0 \text{ cm}$. En las figuras han sido representados con una línea para mayor claridad. Los cálculos con GEANT4 corresponden a la dosis depositada en *voxels* cilíndricos de 5 mm de radio y 1 mm de altura en la dirección del eje del haz (eje z). Las barras de error indican la incertidumbre estimada a nivel de 1σ . En la zona del máximo, su valor está comprendido entre el $0,6\%$ (campo $20 \times 20 \text{ cm}^2$) y el $0,7\%$ (campo $2 \times 2 \text{ cm}^2$). La normalización de los cálculos con GEANT4 a las curvas de dosis relativa se ha realizado siguiendo el mismo procedimiento que el descrito para el acelerador PRIMUS (sección 5.2.3). El resultado obtenido para el factor de calibración k_{PDD}^f de cada campo “f” se muestra en la Tabla 6.2.

Campo (cm^2)	k_{PDD}^f ($\times 10^{13} \text{ hist/cGy}$)
2×2	$8,39 \pm 0,03$
5×5	$7,876 \pm 0,011$
10×10	$7,380 \pm 0,010$
20×20	$7,054 \pm 0,013$

Tabla 6.2: Factores de calibración obtenidos para los cálculos con GEANT4 para el PDD.

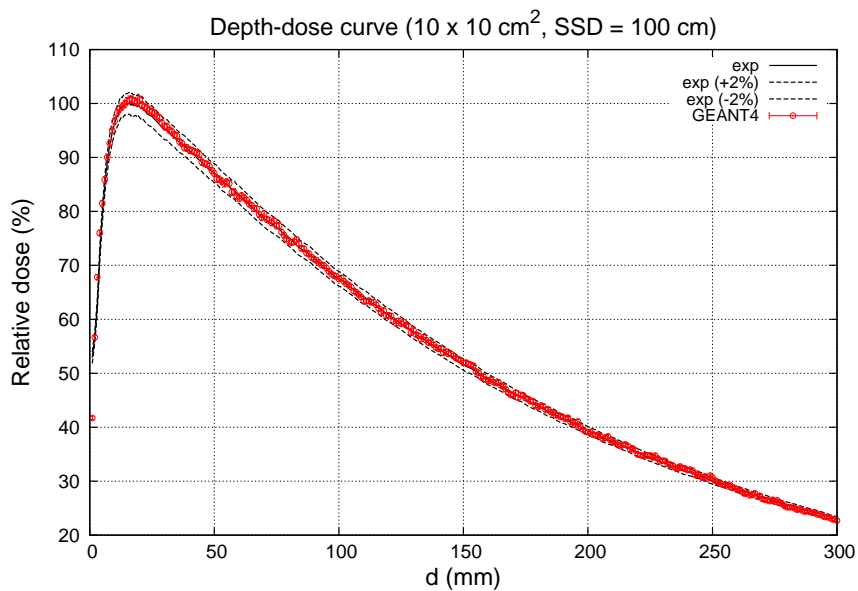


(a)

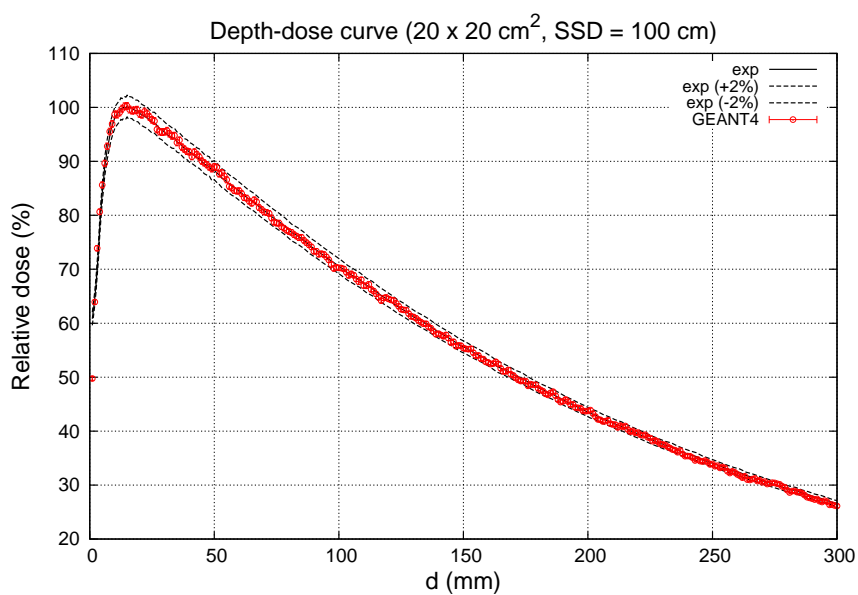


(b)

Figura 6.5: Curvas PDD obtenidas en agua ($SSD = 100 \text{ cm}$) para un campo de $2 \times 2 \text{ cm}^2$ (a) y de $5 \times 5 \text{ cm}^2$ (b). La línea sólida representa las medidas experimentales y las líneas discontinuas marcan el límite $\pm 2\%$. Los cálculos con GEANT4 se muestran con círculos y sus barras de error.



(c)



(d)

Figura 6.5: (cont.) Curvas PDD obtenidas en agua ($SSD = 100 \text{ cm}$) para un campo de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ (c) y de $20 \times 20 \text{ cm}^2$ (d). La línea sólida representa las medidas experimentales y las líneas discontinuas marcan el límite $\pm 2\%$. Los cálculos con GEANT4 se muestran con círculos y sus barras de error.

En las curvas PDD mostradas en la figura hemos incluido también la banda de $\pm 2\%$ con respecto a las medidas experimentales para ilustrar el acuerdo existente con los cálculos realizados con GEANT4. En todos los casos, se puede observar un ajuste correcto dentro de esta tolerancia. Teniendo en cuenta la incertidumbre estimada para los resultados, podemos afirmar que existe un acuerdo general a nivel de 3σ de la precisión de los cálculos. Además, el ajuste en la zona de subida del PDD, a profundidades menores de la del máximo, d_M , es satisfactorio dentro de una tolerancia de ± 1 mm.

En las Figs. 6.6-6.9 mostramos los perfiles laterales *crossplane* e *inplane* obtenidos en agua ($SSD = 100$ cm) a profundidades de 1,5 cm, 5,0 cm, 10,0 cm y 20,0 cm para los mismos campos cuyos PDD hemos mostrado. Las medidas experimentales se realizaron con un detector de diodo de 2,5 mm de diámetro y 0,5 mm de espesor para los campos 5×5 cm² y 10×10 cm², y con el detector de cámara de ionización de 0,125 cm³ para los campos 2×2 cm² y 20×20 cm². La resolución espacial de las medidas es de 1 mm en el plano del isocentro. De nuevo, por razones de claridad en la presentación de resultados mostramos estas medidas mediante una línea. La dosis experimental está normalizada en todos los casos de manera que la dosis central de cada perfil coincide con la dosis obtenida a partir del PDD experimental a esa profundidad. Los cálculos de GEANT4 corresponden a la dosis depositada en *voxels* cilíndricos de 4 mm de radio y 1 mm de altura, cuyo eje de simetría está orientado sobre la dirección de medida del perfil lateral. Sus barras de error representan también la incertidumbre estimada a nivel de 1σ . Para los perfiles laterales calculados a $d = 1,5$ cm la incertidumbre en la zona de radiación está comprendida entre 0,7% (campo 20×20 cm²) y 1,0% (campo 2×2 cm²), mientras que para $d = 20,0$ cm el valor de la incertidumbre está entre 1,0% (campo 20×20 cm²) y 1,5% (campo 2×2 cm²).

En esta ocasión, a diferencia de los perfiles calculados para el PRIMUS, hemos normalizado los cálculos de GEANT4 para los perfiles laterales del ONCOR de manera independiente a las normalizaciones realizadas para las curvas PDD. Aunque podríamos haber tomado directamente los valores de la Tabla 6.2, tal y como hemos procedido con el PRIMUS (sección 5.2.3), en esta ocasión hemos preferido calcular de nuevo el factor de calibración de manera independiente. De esta manera podemos verificar la fiabilidad del valor estimado para la incertidumbre del factor de normalización k_{PDD} , que recordemos se obtiene a partir de un cociente entre parámetros obtenidos mediante un ajuste no lineal (véase sección 5.2.3).

Para normalizar los perfiles laterales hemos considerado un ajuste de los valores centrales a una función cuadrática simétrica del tipo

$$f_{cr/in}(x_{cr/in}) = a_{0,cr/in} + a_{2,cr/in} x_{cr/in}^2, \quad (6.6)$$

donde $a_{0,cr/in}$ y $a_{2,cr/in}$ son parámetros ajustables y $x_{cr/in}$ es la distancia del punto de medida al eje central. Con el subíndice “cr” o “in” distinguimos entre

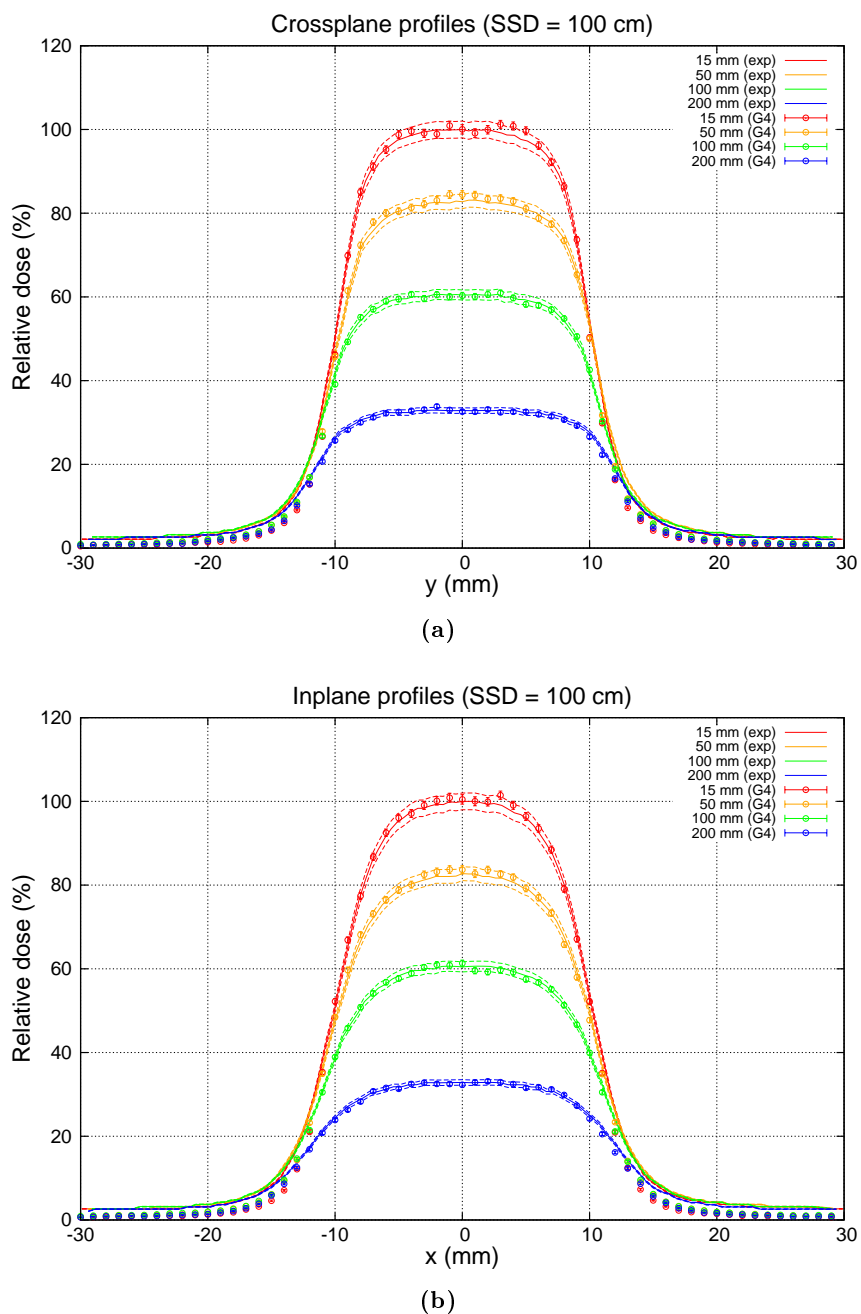


Figura 6.6: Perfiles laterales *crossplane* (a) e *inplane* (b) para un campo de tamaño $2 \times 2 \text{ cm}^2$ en agua a profundidades de 1,5 cm, 5,0 cm, 10,0 cm y 20,0 cm ($SSD = 100 \text{ cm}$). Los círculos con barras de error representan los valores calculados con GEANT4 y la línea sólida representa la medida experimental. Las líneas discontinuas marcan la banda $\pm 2\%$ de la dosis experimental.

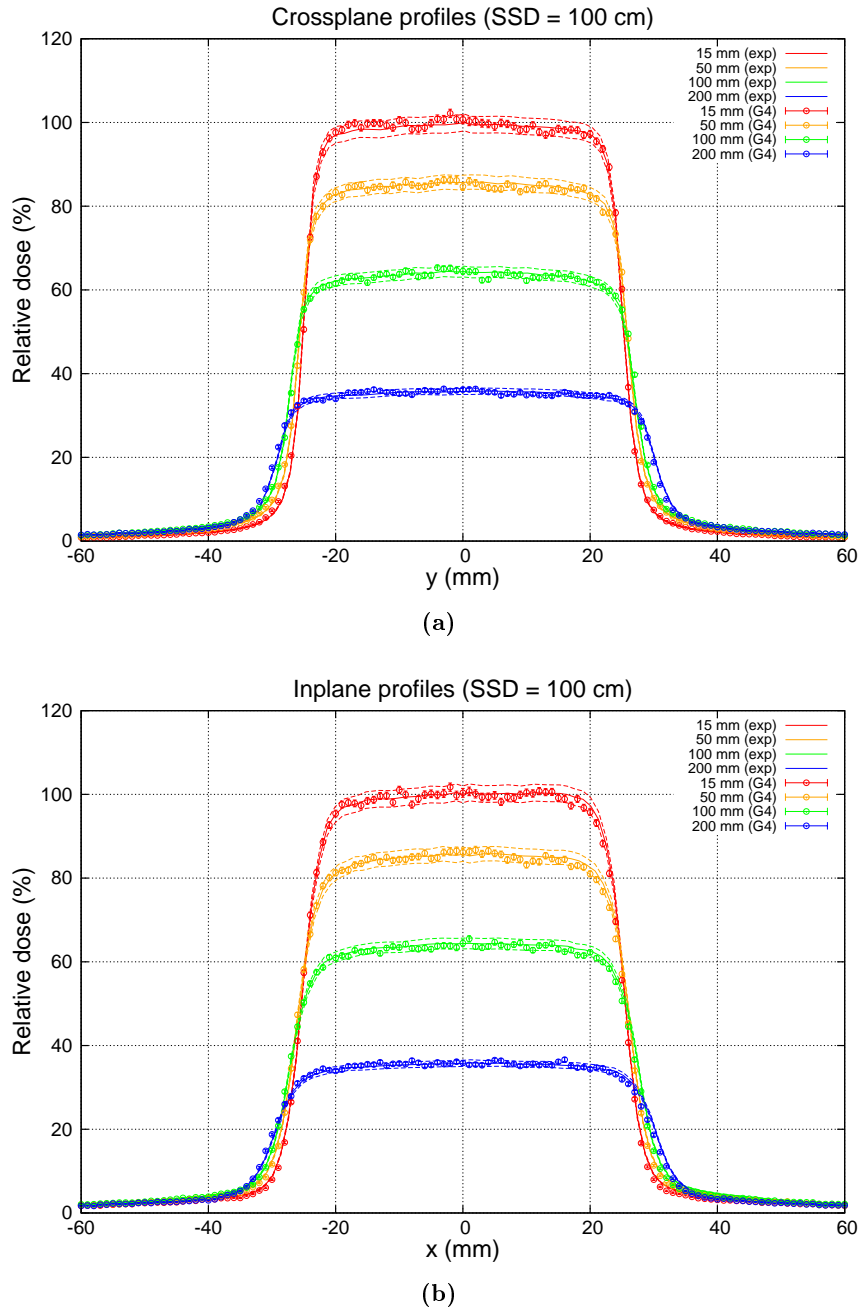


Figura 6.7: Perfiles laterales *crossplane* (a) e *inplane* (b) para un campo de tamaño $5 \times 5 \text{ cm}^2$ en agua a profundidades de 1,5 cm, 5,0 cm, 10,0 cm y 20,0 cm ($SSD = 100 \text{ cm}$). Los círculos con barras de error representan los valores calculados con GEANT4 y la línea sólida representa la medida experimental. Las líneas discontinuas marcan la banda $\pm 2\%$ de la dosis experimental.

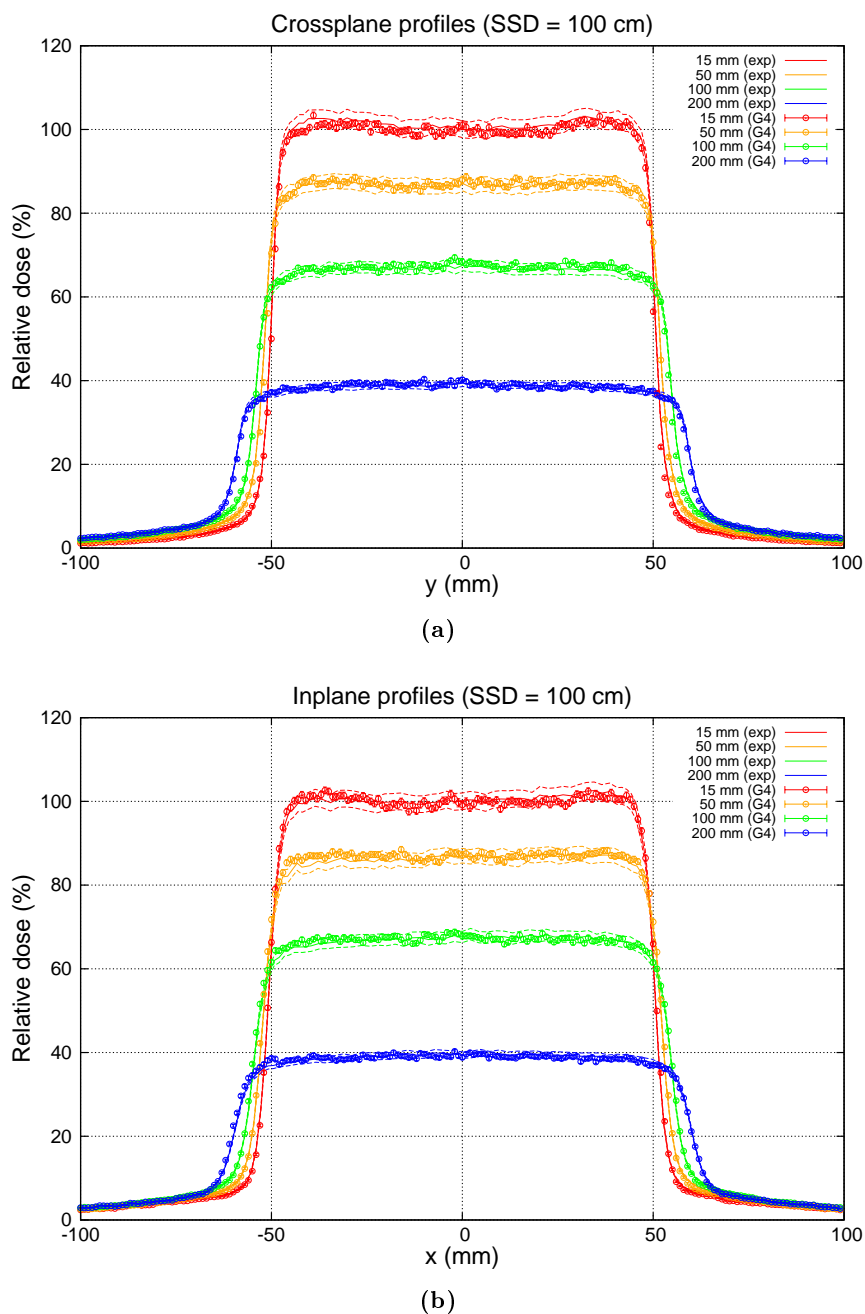


Figura 6.8: Perfiles laterales *crossplane* (a) e *inplane* (b) para un campo de tamaño $10 \times 10 \text{ cm}^2$ en agua a profundidades de 1,5 cm, 5,0 cm, 10,0 cm y 20,0 cm ($SSD = 100 \text{ cm}$). Los círculos con barras de error representan los valores calculados con GEANT4 y la línea sólida representa la medida experimental. Las líneas discontinuas marcan la banda $\pm 2\%$ de la dosis experimental.

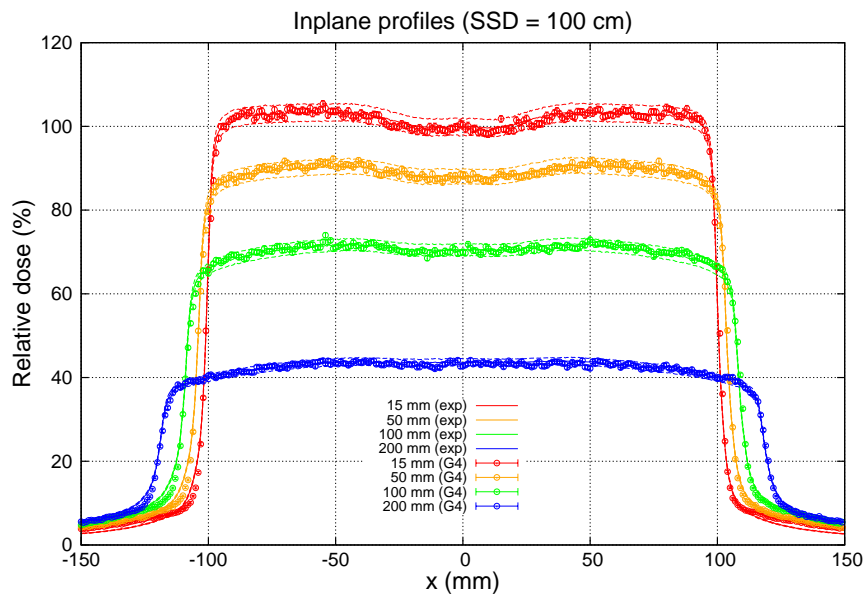
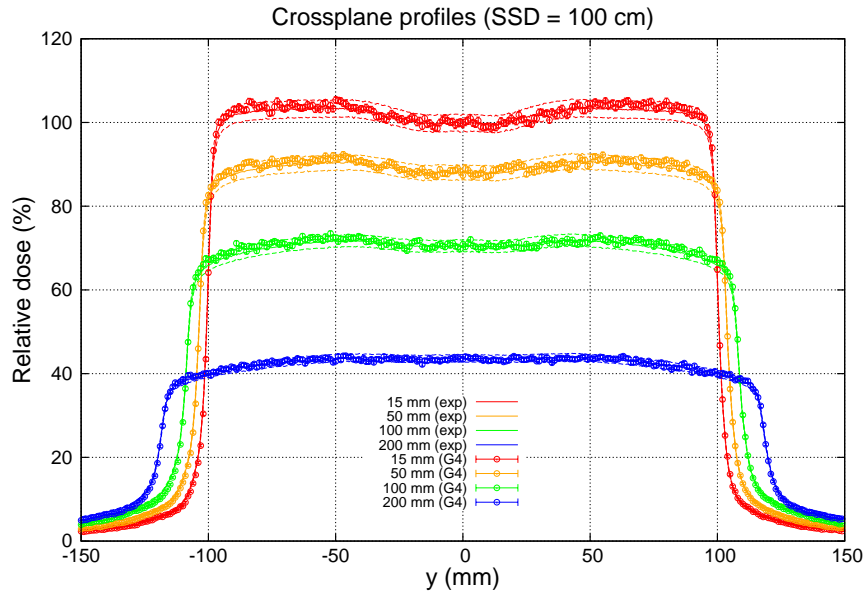


Figura 6.9: Perfiles laterales *crossplane* (a) e *inplane* (b) para un campo de tamaño $20 \times 20 \text{ cm}^2$ en agua a profundidades de 1,5 cm, 5,0 cm, 10,0 cm y 20,0 cm ($SSD = 100 \text{ cm}$). Los círculos con barras de error representan los valores calculados con GEANT4 y la línea sólida representa la medida experimental. Las líneas discontinuas marcan la banda $\pm 2\%$ de la dosis experimental.

perfiles laterales *crossplane* e *inplane*. Para los perfiles del campo $2 \times 2 \text{ cm}^2$ el ajuste lo hemos realizado para $|x| \leq 5 \text{ mm}$, mientras que para los restantes se ha realizado para $|x| \leq 10 \text{ mm}$. Ajustando tanto los cálculos de GEANT4 como las medidas experimentales, obtenemos el factor de normalización para cada campo determinado, $k_{\text{cr/in}}^{\text{f}}$, a partir de la expresión,

$$k_{\text{cr/in}}^{\text{f}} = \frac{a_{0,\text{cr/in}}^{\text{f,exp}}}{a_{0,\text{cr/in}}^{\text{f,G4}}}, \quad (6.7)$$

donde el superíndice “f” denota el campo considerado en cada caso, “exp” designa el coeficiente ajustado a los datos experimentales y “G4” el coeficiente ajustado a los cálculos de GEANT4.

Campo (cm^2)	$k_{\text{cr}}^{\text{f}} (\times 10^{13} \text{ hist/cGy})$	$k_{\text{in}}^{\text{f}} (\times 10^{13} \text{ hist/cGy})$
2×2	$8,33 \pm 0,04$	$8,25 \pm 0,04$
5×5	$7,788 \pm 0,024$	$7,87 \pm 0,03$
10×10	$7,448 \pm 0,024$	$7,42 \pm 0,03$
20×20	$7,022 \pm 0,015$	$7,068 \pm 0,012$

Tabla 6.3: Factores de calibración obtenidos para los cálculos de GEANT4 para los perfiles *crossplane* (cr) e *inplane* (in).

En la Tabla 6.3 mostramos el factor $k_{\text{cr/in}}^{\text{f}}$ calculado para cada campo mediante (6.7). Estos valores son similares a los presentados en la Tabla 6.2, como cabía esperar. De esta manera hemos podido ilustrar que la incertidumbre estimada en estos cálculos es compatible con las desviaciones observadas entre los diferentes procedimientos.

Una vez normalizados los cálculos de GEANT4, el resultado es el que se observa en las Figs. 6.6-6.9. Salvo algunas excepciones, podemos afirmar que existe un acuerdo general con los resultados experimentales dentro del 2% del valor de dosis experimental. Una de las excepciones es la dosis obtenida fuera de los límites del campo de radiación para los perfiles del campo $2 \times 2 \text{ cm}^2$, donde la dosis calculada por GEANT4 subestima en aproximadamente el 1% el valor obtenido experimentalmente. Asimismo, se observan diferencias del 2% para la dosis fuera del campo próxima a la penumbra en los perfiles *inplane* del campo $20 \times 20 \text{ cm}^2$. Probablemente, el origen de estas discrepancias se debe a la precisión de lectura del detector de cámara de ionización. En cuanto a las penumbras, se observa claramente que se reproducen en su totalidad con una tolerancia de 1 mm.

6.4.2. Cálculo de dosis absoluta

La calibración absoluta de la dosis calculada por GEANT4 se ha realizado en agua en condiciones de referencia de campo $10 \times 10 \text{ cm}^2$, $SSD = 100 \text{ cm}$

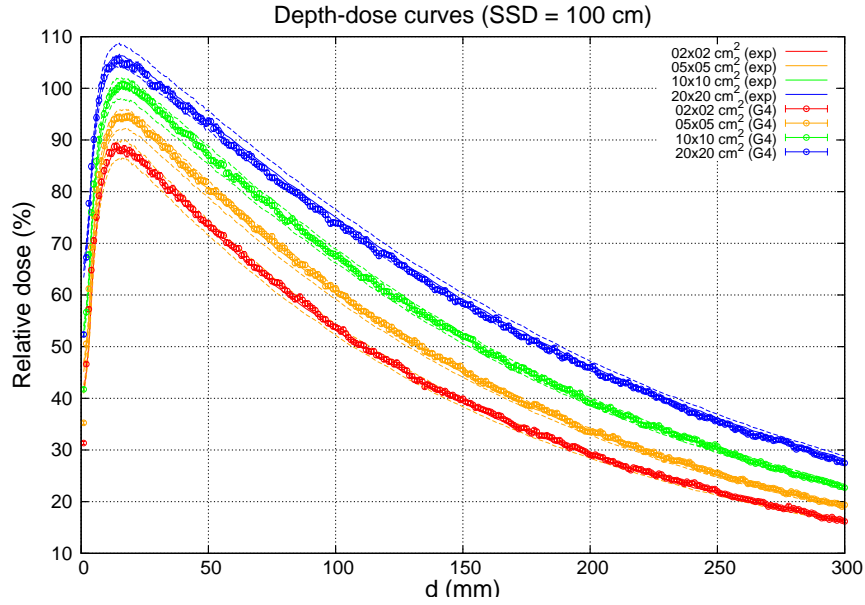


Figura 6.10: Curvas PDD relativas a la dosis de referencia ($SSD = 100$ cm, campo 10×10 cm², $d = 1,5$ cm) obtenidas en agua para el acelerador ONCOR de Siemens. Las medidas experimentales se representan con una línea sólida, mientras que los cálculos de GEANT4 se representan mediante círculos vacíos con barras de error.

y $d = d_M^{\text{ref}} = 1,5$ cm. Estas condiciones son las mismas que las consideradas para calibrar la dosis obtenida con GEANT4 a las curvas relativas de dosis a campo 10×10 cm². En la práctica 1 MU está calibrada de tal modo que corresponda a una dosis de 1 cGy en las condiciones citadas. Por lo tanto, podemos calcular el factor de calibración de dosis absoluta, k^{ref} , en historias/MU a partir de los resultados presentados en las Tablas 6.2-6.3. Para evaluarlo, nuestro criterio ha sido tomar la media ponderada de los tres valores obtenidos para campo 10×10 cm², obteniendo el resultado

$$k^{\text{ref}} = (7,394 \pm 0,009) \times 10^{13} \text{ hist/MU} , \quad (6.8)$$

En la Fig. 6.10 presentamos los PDD obtenidos en agua ($SSD = 100$ cm) relativos a la dosis de referencia. Para ello, hemos renormalizado los PDDs considerando el factor de salida, OF (*Output Factor*), correspondiente para cada campo. El OF se calcula tomando como referencia el campo 10×10 cm² mediante la expresión

$$\text{OF} = \frac{D^{\text{ref}}(d = 10 \text{ cm})}{D_{10 \times 10}^{\text{ref}}(d = 10 \text{ cm})} , \quad (6.9)$$

donde $D_{10 \times 10}^{\text{ref}}(d)$ es la dosis depositada en agua por MU con el campo de 10×10 cm² en condiciones de referencia ($SSD = 100$ cm) a una profundidad d y $D^{\text{ref}}(d)$ es la dosis depositada a una profundidad d en las mismas condiciones

con el campo cuyo OF evaluamos. Teniendo en cuenta la definición (6.9), la dosis depositada en el eje central de una cuba de agua ($SSD = 100$ cm) a una profundidad d utilizando un campo cuadrado de lado arbitrario, $D(d)$, puede calcularse mediante la expresión

$$D(d) = \frac{PDD^{\text{ref}}(d = 10 \text{ cm})}{PDD(d = 10 \text{ cm})} \times \text{OF} \times PDD(d) \times U , \quad (6.10)$$

donde $PDD^{\text{ref}}(d)$ es el valor del PDD obtenido en las condiciones de referencia a la profundidad d , $PDD(d)$ es el valor del PDD a la profundidad d para el campo arbitrario, OF es el factor de salida calculado para dicho campo y U es la radiación administrada por el acelerador expresada en MU.

Los cálculos de GEANT4 presentados en la Fig. 6.10, han sido normalizados utilizando el resultado (6.8). Como puede comprobarse, se observa claramente un acuerdo con las medidas experimentales dentro del 2-3 % de la dosis absoluta. Se observa una sobreestimación por parte de los valores calculados mediante Monte Carlo del orden del 1 % para los campos 2×2 cm² y 5×5 cm². Para el campo 20×20 cm² se observa una subestimación de la dosis absoluta en aproximadamente un 1 %.

Estas pequeñas desviaciones con respecto a los valores experimentales de dosis absoluta pueden ser cuantificadas comparando los valores de los OF obtenidos con GEANT4 con respecto a los calculados con datos experimentales. Para ello debemos evaluar la dosis depositada a la profundidad $d_0 = 10$ cm. Dicho valor lo hemos obtenido mediante un ajuste no lineal de los cálculos de GEANT4, para profundidades comprendidas entre 4 cm y 21 cm, a la función

$$D_{\text{fit}}(d) = \exp [a_0 + a_1(d - d_0) + a_2(d - d_0)^2 + a_3(d - d_0)^3] , \quad (6.11)$$

donde a_i son parámetros ajustables. Evaluando $D_{\text{fit}}(d_0)$ para cada campo, obtenemos los OF presentados en la Tabla 6.4. En ella también mostramos los OF que se obtuvieron a partir de medidas experimentales de calibración del acelerador Siemens ONCOR. Las desviaciones para campos de tamaño menor que el 10×10 cm² son menores del 1 %, siendo el valor obtenido por simulación mayor que el experimental. Por el contrario, para el campo 20×20 cm² observamos que el OF calculado con GEANT4 subestima el experimental en un 1,3 %.

Los resultados de la Tabla 6.4 cuantifican la tendencia que ya se vislumbraba en la Fig. 6.10. El origen de estas discrepancias puede ser múltiple y por lo tanto se requiere un estudio detallado de varios factores que influyen en la dosis depositada.

Existe la posibilidad de realizar un ajuste con mayor precisión tanto del espectro de energía de los electrones primarios como de su distribución espacial, pero dicho ajuste sólo tiene sentido con un nivel estadístico mayor que el que hemos considerado en este trabajo. Obviamente, esto ralentiza

Campo (cm ²)	OF _{exp}	OF _{G4}	$\Delta_{G4,exp}$
2 × 2	0,789	0,795 ± 0,002	0,8 %
5 × 5	0,893	0,901 ± 0,002	0,9 %
20 × 20	1,110	1,096 ± 0,002	-1,3 %

Tabla 6.4: OF experimental y calculado con GEANT4 para cada campo de radiación tomando como referencia el campo 10 × 10 cm².

el procedimiento de obtención de los parámetros del haz de electrones a la entrada del cabezal, a menos que implementemos técnicas de reducción de varianza en nuestras simulaciones. En las condiciones actuales, con nuestro *cluster*, las simulaciones de la parte superior del cabezal se han realizado a razón de 9×10^6 hist/h por cada CPU, por lo que la simulación de 2×10^9 historias repartidas en 8 CPU requiere un tiempo aproximado de 28 h. Posteriormente, la generación del espacio de fases de cada campo de radiación se realiza en unas 8-10 h utilizando 8 CPU. Por último, el cálculo de dosis en agua utilizando el espacio de fases correspondiente requiere un tiempo de 30 min para un campo 2×2 cm² y de 20 h para un campo 20×20 cm², en ambos casos usando 8 CPU.

En resumen, de los cálculos de OF podemos afirmar que el nivel de dosis medio obtenido con la simulación GEANT4 se ajusta a la dosis absoluta experimental en agua dentro de una tolerancia del 1%. Por otro lado, las curvas de dosis relativas presentan un ajuste global dentro del 2% del valor de la dosis depositada en ese punto. Por lo tanto, podemos estimar que, a este nivel estadístico, las simulaciones realizadas con GEANT4 en agua presentan una exactitud de aproximadamente el 3% con respecto a la dosis depositada experimentalmente en las mismas condiciones.

6.5. Conclusiones

Hemos presentado la caracterización de la simulación mediante GEANT4 del cabezal del acelerador ONCOR de Siemens, operando en el modo de fotones de 6 MV de energía nominal.

La geometría del cabezal ha sido implementada hasta el mínimo detalle. En este sentido, resaltamos especialmente el modelo geométrico desarrollado para reproducir la forma y orientación de las láminas del MLC-160 a partir de los datos facilitados por el fabricante. La compleja geometría del MLC-160 se construye mediante un programa que, además, permite reproducir la geometría de cualquier colimador multiláminas, siempre y cuando ésta pueda ser descrita con el mismo conjunto de parámetros que caracteriza la geometría del MLC-160. De este modo, podemos simular dicho colimador sin la necesidad de recurrir a herramientas CAD. Asimismo, las posiciones de las

mordazas y de las láminas del MLC-160 han sido calibradas con una precisión de 0,5 mm sobre la posición de la penumbra en el plano del isocentro.

Utilizando los parámetros del haz de electrones primarios obtenidos por ajuste, hemos conseguido reproducir las curvas de dosis relativa en profundidad (PDD) y laterales (perfiles) con una tolerancia de, aproximadamente, el 2% con respecto a las medidas. Por otra parte, los OF obtenidos mediante GEANT4 presentan una discrepancia máxima del 1,3%. Considerando ambos factores, podemos concluir que, con este nivel estadístico, la dosis calculada en agua con GEANT4 presenta un acuerdo con la dosis experimental de aproximadamente el 3%.

Capítulo 7

Terapia con protones por dispersión pasiva

RESUMEN: El propósito de este trabajo es incrementar la eficiencia computacional de las simulaciones Monte Carlo con GEANT4 de un cabezal de terapia con protones mediante dispersión pasiva. Para ello hemos estudiado el incremento de eficiencia obtenido aplicando dos técnicas diferentes. La primera consiste en realizar un filtrado para el seguimiento de protones que permite descartar con antelación aquéllos que no cruzarán la apertura de salida del cabezal. La segunda consiste en utilizar un modelo geométrico simplificado de las cámaras monitoras situadas dentro del cabezal. La aplicación simultánea de ambas técnicas permite incrementar hasta en un 35 % la eficiencia de simulación para campos típicos utilizados en terapia de protones por dispersión pasiva. Aunque estas técnicas se han aplicado al cabezal del Centro de Terapia con Protones Francis H. Burr (en inglés, *Francis H. Burr Proton Therapy Center*) del MGH, ambas pueden adaptarse a otros cabezales de aceleradores clínicos de protones; por otro lado, pueden también exportarse a otros códigos de simulación Monte Carlo.

ABSTRACT: The motivation of this work is to increase the computational efficiency of the GEANT4 Monte Carlo simulations of a passive scattering proton therapy treatment head. With this purpose, we have studied the efficiency improvement achieved with two different techniques. The first one is a proton tracking filter which discards those protons not reaching the treatment head exit. The second one is the use of a simplified geometry model of the monitor chambers placed within the treatment head. When both technique are applied, the computation efficiency increases by about 35 % with typical treatment fields used in passive scattering proton therapy. Although these techniques were applied for the proton

therapy treatment head of the Francis H. Burr Proton Therapy Center at MGH (*Massachusetts General Hospital* – Boston, Massachusetts, EE.UU.), both can be adapted for other proton therapy treatment heads; further, they can be exported to other Monte Carlo codes as well.

7.1. Introducción

Comparada con la radioterapia convencional realizada con electrones y fotones, la terapia con protones aumenta la posibilidad de obtener un control efectivo del tumor minimizando la probabilidad de complicación en el tejido sano circundante, gracias esencialmente a la capacidad de conformar la dosis prescrita a éste, tal y como se ha discutido en el capítulo 1. Por ello, la aplicación de radioterapia con protones se ha incrementado en los últimos años. Sin embargo, este mismo hecho sugiere que la aplicación de la dosis en el paciente se realice con la mayor precisión posible, puesto que un pequeño cambio en el tratamiento puede implicar un cambio significativo en el resultado final. En consecuencia, es fundamental que todas las etapas del tratamiento (simulación, obtención de la imagen, posicionamiento del paciente, aplicación de la radiación...) se realicen de una manera muy precisa.

Como ya se expuso en la introducción (sección 1.2.3), la simulación Monte Carlo es el método considerado más fiable para calcular la dosis depositada en el paciente debido a la reproducción en detalle de la interacción de cada partícula con la materia (Schaffner et al., 1999). Sin embargo, esto último provoca que las técnicas basadas en este método sean demasiado lentas para su aplicación clínica diaria. Por lo tanto, actualmente el cometido de las simulaciones Monte Carlo es verificar la distribución de dosis calculada por el sistema de planificación en tratamientos especialmente complicados para las prestaciones de los TPS actuales (Newhauser et al., 2005; Koch et al., 2008; Paganetti et al., 2008). Sin embargo, conscientes de los continuos avances computacionales, en el MGH desarrollaron una implementación a nivel clínico de una aplicación GEANT4 para calcular la distribución de dosis en pacientes mediante métodos de Monte Carlo (Paganetti et al., 2004, 2008). Dicha implementación se utiliza en paralelo al TPS utilizado en dicha institución para las dos técnicas de terapia con protones más comunes: BBM y PBS. Ambas técnicas, presentadas en la sección 1.2.3, pretenden conseguir una distribución uniforme en la zona de tratamiento.

Para tratamientos mediante BBM, dicha aplicación GEANT4 calcula un espacio de fases que caracteriza el haz a la salida del cabezal y con el que se consigue aumentar la eficiencia de cálculo. Sin embargo, el tiempo invertido por CPU para obtener cálculos de dosis con una precisión del 2 %

es aún largo. En este trabajo, mostramos dos técnicas para incrementar esa eficiencia. Aunque estas técnicas se han utilizado para esta aplicación particular GEANT4, pueden adaptarse a otros códigos de simulación y generalizarse a otros aceleradores de protones de uso clínico.

Estructura de este capítulo

En la sección 7.2 se muestra primero el modelo GEANT4 del cabezal y posteriormente se describen las estrategias seguidas para mejorar la eficiencia computacional de la simulación. En la sección 7.3 se discuten los resultados obtenidos. Finalmente, en la sección 7.4 presentamos las conclusiones.

7.2. Materiales y métodos

7.2.1. Simulación del cabezal

La aplicación GEANT4 para simular el cabezal del acelerador para terapia con protones del Centro de Terapia con Protones Francis H. Burr del MGH fue desarrollada por Paganetti et al. (Paganetti, 2004; Paganetti et al., 2004). En esta instalación el haz de protones se genera en un ciclotrón compacto a una energía de 235 MeV, aunque se utiliza un degradador de carbono para seleccionar la energía del haz a la entrada del cabezal. El modelo geométrico, mostrado en la Fig. 7.1, reproduce los componentes relevantes del cabezal con una precisión inferior a 1 mm de acuerdo con las especificaciones del fabricante, IBA (*Ion Beam Applications SA* – Louvain-La-Neuve, Bélgica). En la figura aparecen señalados los diferentes módulos del cabezal, que pueden clasificarse en monitorizadores y conformadores de forma del haz.

El cabezal presenta tres cámaras monitoras (IC (*Ionization Chamber*)) en la Fig. 7.1) para detectar el posicionamiento, corriente y distribución del haz en diferentes puntos. Todas ellas consisten en una serie de electrodos planos, segmentados tanto horizontal como verticalmente y colocados perpendicularmente a la dirección de propagación del haz. Cada segmento genera una corriente eléctrica independiente de los demás. La cámara monitora a la entrada del haz (IC1, parte derecha del diagrama) se usa para medir las características del haz de entrada, mientras que la misión del sistema formado por las cámaras monitoras IC2 e IC3 es controlar el posicionado, uniformidad y factor de salida del haz.

Para generar un campo de radiación uniforme a la salida se utiliza un doble sistema de dispersión. El primer dispersor (*first scatterer* en la Fig. 7.1), situado justo tras la cámara IC1, consiste en un conjunto de nueve láminas dispersoras, algunas de policarbonato (Lexan) y otras de plomo, de espesores variables de manera que, combinándolas, se pueda conseguir un

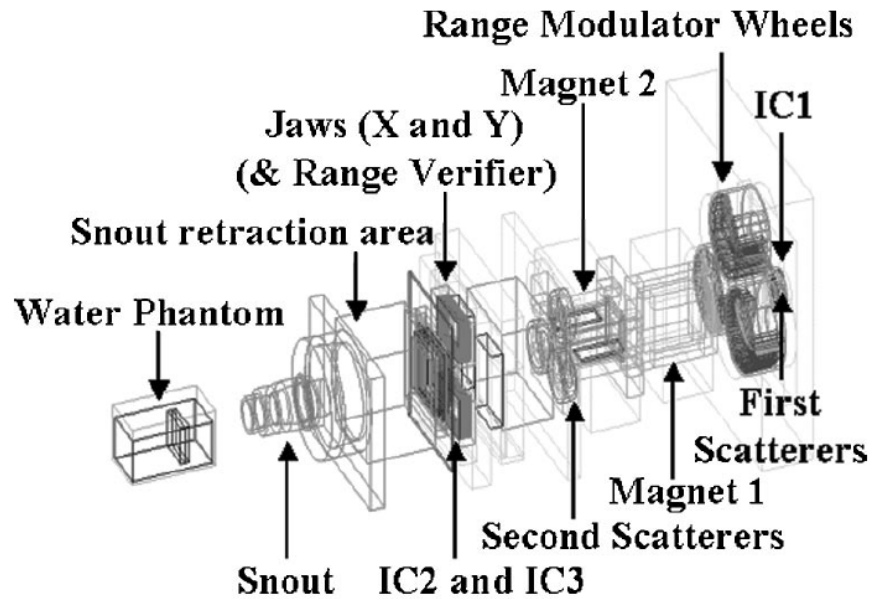


Figura 7.1: Modelo GEANT4 del cabezal para terapia con protones de uno de los *gantries* del MGH. El haz de protones entra por la derecha y cruza, en este orden, cámara monitora (IC1), primer dispersor (*first scatterers*), rueda moduladora de alcance (*range modulator wheels*), imanes en las direcciones x e y (*magnets*), segundo dispersor (*second scatterers*), mordazas x e y (*jaws*), que contienen un sistema monitorizador de alcance (*range verifier*), cámaras monitoras (IC2 e IC3) y el morro del cabezal (*snout*), que apunta a un maniquí de agua (*water phantom*). (Paganetti et al., 2004)

regulado cuasi-continuo del poder de frenado total a lo largo del cabezal para realizar ajuste fino del alcance máximo de los protones dentro del paciente. El segundo dispersor (*second scatterers* en la Fig. 7.1) consiste en una lámina compuesta por una combinación de material de número atómico Z alto (plomo) y otro de Z bajo (Lexan), diseñada para generar un perfil plano de haz a la salida del cabezal. El motivo por el que se usa esta mezcla de Z alto y bajo se explica por el hecho de que un material con Z alto tiene mayor poder dispersivo sin modificar significativamente el alcance de los protones a la salida, mientras que el efecto de un material de Z bajo es el contrario. Por lo tanto, la composición relativa de ambos materiales en el segundo dispersor varía en función de la distancia radial al eje de propagación del haz, ya que para conseguir un perfil lateral plano es necesario tener mayor fuerza dispersiva en el centro del haz que en los bordes. En este cabezal hay tres tipos de dispersores diferentes en función de las características del haz con el que se trabaja. Uno de ellos se muestra en la Fig. 7.2a.

La obtención de un SOBP plano para un tratamiento clínico se realiza haciendo pasar el haz por un dispersor cuyo espesor cambia de manera

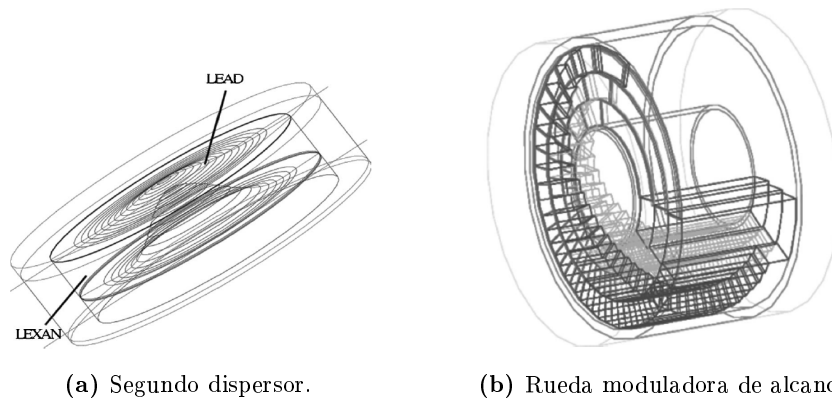


Figura 7.2: (a) Esquema de uno de los tres dispersores, compuesto por una fina capa de plomo (*lead*), cuyo espesor sigue una dependencia gaussiana con la distancia al centro, y otra capa de Lexan que presenta una cavidad de aire central también con forma gaussiana. El haz entra desde la esquina superior izquierda. (b) Una de las tres ruedas moduladoras de alcance en la que se observan las tres pistas circulares. El haz entra desde la derecha en este esquema. En ambos casos, los tonos claros corresponden a materiales de Z baja mientras que los tonos oscuros representan materiales de Z alta. (Paganetti et al., 2004)

secuencial. Éste es el papel que juega la rueda moduladora de alcance (*range modulator wheel* en la Fig. 7.1). En ella se combinan dichos dispersores en pistas circulares de manera que la rotación de la rueda moduladora durante el tratamiento provoca que la energía del haz a la salida del cabezal pueda variar con el tiempo. Este cabezal dispone de tres ruedas moduladoras, cada una equipada con tres pistas, con las que se satisface el requerimiento clínico de producción de un campo de 25 cm de diámetro con un alcance de hasta 25 cm en agua. El esquema de una de las ruedas se muestra en la Fig. 7.2b. Su diseño combina también materiales con valor de Z alto (plomo) con materiales de Z bajo (Lexan o carbono) por las mismas razones expuestas en el párrafo anterior. Cada pista moduladora está dividida en segmentos, cuyo espesor es creciente en el sentido de giro de la rueda y cuya amplitud angular representa el peso de cada pico de Bragg individual en la conformación del SOBP. Cada una está preparada para generar un SOBP plano hasta la superficie del paciente, esto es, con la máxima anchura de modulación posible (aunque restringido a un máximo de 19 cm). Por lo tanto, la anchura de modulación de un SOBP particular viene dada en función del ángulo de la rueda para el cual la corriente generada en el ciclotrón debe apagarse, mientras que su alcance está determinado por una combinación de energía del haz de protones a la entrada del cabezal junto con la correspondiente configuración de los sistemas dispersores, mencionados en el párrafo anterior. Estos dos parámetros (alcance y anchura de modulación) caracterizan el SOBP, tal y como mostramos en la sección 1.2.3.

El cabezal incluye dos mordazas colimadoras en las direcciones x e y (*jaws* en la Fig. 7.1) que se utilizan para aprovechar la parte central plana del haz, reduciendo además la fluencia de protones en el morro del cabezal y la contaminación de neutrones que se produce en él.

El morro (*snout* en la Fig. 7.1) sostiene la apertura y el compensador, que son específicos para cada paciente. La apertura define el diámetro máximo del campo de radiación en el paciente, mientras que el compensador reproduce la parte distal del tumor para conseguir una irradiación uniforme del tumor sin perjudicar el tejido sano adyacente. Dado que el espesor total del compensador es específico de cada tratamiento, el morro del cabezal presenta una estructura telescópica móvil.

Los imanes del cabezal (*magnets* en la Fig. 7.1), orientados en los ejes x e y , se utilizan para desviar el haz en tratamientos de protones mediante PBS.

Después de describir los elementos incluidos en la geometría del modelo, nos centramos en la lista de física utilizada en esta aplicación. Los estudios que llevaron a su elección pueden encontrarse en la bibliografía (Zacharatos, Jarlskog y Paganetti, 2008). En ese trabajo se optó por utilizar los modelos implementados en la lista de física *Standard* (Burkhardt et al., 2005) para reproducir las interacciones electromagnéticas. En cuanto a las interacciones hadrónicas, se utilizan los modelos que actualmente están implementados en la lista de física *QGSP_BIC_HP*. Las interacciones inelásticas de protones y neutrones sobre los núcleos del blanco se reproducen mediante el modelo de cascada binaria, BIC (Folger et al., 2004). Las interacciones elásticas se modelan de acuerdo al modelo unificado desarrollado por la colaboración GEANT4 (Ivanchenko, 2006). Por su parte, el transporte de neutrones con energía cinética menor de 20 MeV se modela usando las librerías HP (*High Precision*) de GEANT4, que incluyen los datos evaluados ENDF/B,^a JEFF^b y JENDL.^c

Esta aplicación, compilada con la versión 9.0.p01 del código GEANT4, puede simular los modos de funcionamiento BBM y PBS, descritos anteriormente en la sección 1.2.3. La simulación de tratamientos mediante BBM se realiza en dos etapas. En la primera, el código genera un archivo de espacio de fases a la salida del cabezal para cada campo del tratamiento, caracterizado por su SOBP, el tamaño de la apertura y la forma del compensador. Posteriormente, estos espacios de fases se utilizan para simular la irradiación sobre el paciente, cuya geometría se reproduce con GEANT4 a partir de los datos obtenidos mediante TAC (Paganetti et al., 2008). Para el cálculo de dosis en pacientes sólo se necesita almacenar la información relativa a protones primarios y secundarios puesto que la contribución secundaria de

^a<http://www.nndc.bnl.gov/exfor/endl00.jsp>.

^b<http://www.oecd-nea.org/dbdata/jeff/>.

^c<http://wwwndc.jaea.go.jp/jendl/jendl.html>.

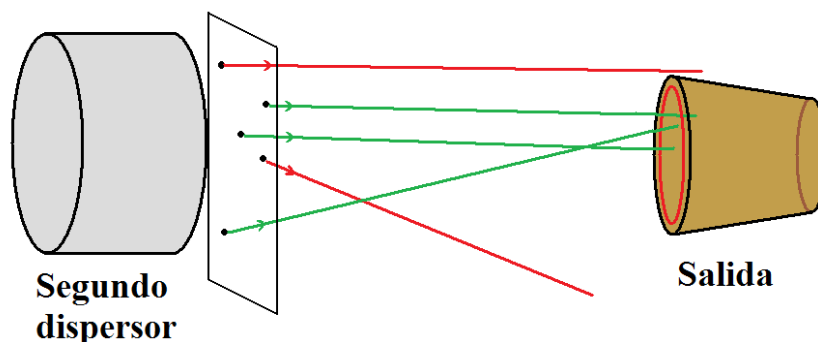


Figura 7.3: Esquema de la técnica de filtrado de protones. Se define un *plano inicial de control* (en este caso tras el segundo dispersor), donde se realiza el filtrado, y un *plano final* (salida) donde se ha definido una región circular que filtra el seguimiento de protones en la simulación. Sólo el seguimiento de aquellos protones cuya trayectoria proyectada llegue a esa región circular (líneas verdes) será considerado. El seguimiento de los restantes (líneas rojas) concluye en el plano inicial.

neutrones es similar esencialmente en todos los tratamientos. Esta estrategia permite acortar el tiempo invertido por CPU para obtener un valor de dosis en cada punto del paciente con la precisión deseada del 2%. Sin embargo, la obtención del espacio de fases para cada campo obtenido mediante BBM aún requiere un tiempo de CPU demasiado largo para su uso práctico en un hospital, a menos que se consiga desarrollar un modelo del haz a la salida del cabezal que dependa únicamente de parámetros específicos de éste. Éste es el objetivo de las dos técnicas que hemos desarrollado. La primera de ellas determina en un plano dentro del cabezal qué protones pueden descartarse en la simulación a partir de consideraciones puramente geométricas. La segunda se basa en simplificaciones del modelado geométrico de las cámaras monitoras.

7.2.2. Técnica de filtrado de protones

La trayectoria que siguen los protones a través de un medio material de baja densidad, como el aire, es muy cercana a una línea recta afectada levemente por dispersiones laterales. Por lo tanto, dentro de unos márgenes de tolerancia, es posible *predecir* a partir de unas condiciones iniciales de posición y dirección del momento lineal la posición del protón al cruzar un determinado plano situado perpendicularmente a su dirección de propagación. En este sentido, hemos desarrollado una técnica para terminar el seguimiento de protones que muy probablemente serán absorbidos por objetos dentro del cabezal o por las paredes de la apertura del mismo. Para ello, se define un *plano de control*, donde registramos las condiciones iniciales de transporte y un *plano final*, en el cual se encuentra la región que establece

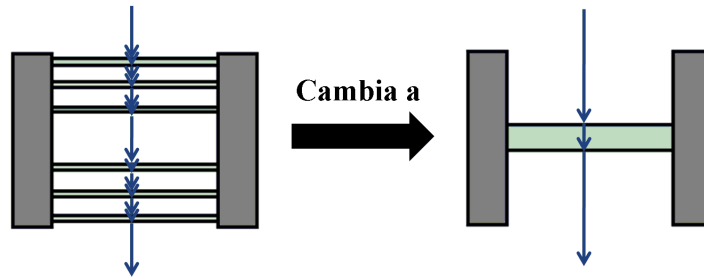


Figura 7.4: Esquema de la simplificación del modelo geométrico de las cámaras monitoras (vista lateral). El haz entra desde la parte superior. Izquierda: diseño original de la cámara monitora. Derecha: modelo simplificado en el que todas las capas del mismo material se agrupan en una sola para minimizar el número de pasos necesarios para transportar cada protón a través de la cámara monitora. Las flechas indican el número mínimo de pasos necesarios.

el filtrado para el seguimiento de cada protón a partir del plano de control. Esta técnica la vamos a utilizar en dos ocasiones:

- En la primera, se define el plano de control justo detrás del segundo dispersor (desde el punto de vista del haz) y el plano final en el comienzo del morro del cabezal, tal y como se muestra en la Fig. 7.3. En este caso el diámetro de la apertura determina la máxima distancia radial al eje de propagación permitida para la línea recta que se proyecta para cada protón desde el plano de control. Según esto, la región se determina con un círculo centrado en el eje de propagación cuyo radio viene dado por la apertura. Si la distancia radial de una línea determinada en el plano final es mayor que el radio de este círculo, entonces el seguimiento de ese protón termina. Naturalmente, es necesario incluir un margen de tolerancia al radio máximo debido a la pequeña dispersión lateral mencionada anteriormente.
- En segundo lugar, usamos esta técnica definiendo los planos de control a la salida de la rueda moduladora de alcance y a la entrada del segundo dispersor, respectivamente. En esta ocasión también se define un círculo en el plano final cuyo radio viene dado por el tamaño del segundo dispersor.

En cualquier caso, esta técnica depende de las características geométricas del problema. Por lo tanto, la mejora de eficiencia computacional puede cambiar de un caso particular a otro.

7.2.3. Modelo optimizado de las cámaras monitoras

Para obtener cálculos precisos de dosis absoluta con simulaciones Monte Carlo es necesario reproducir con precisión las cámaras monitoras (Paganetti,

2006). Sin embargo, dichas cámaras no juegan un papel importante en la distribución de la energía cinética de los protones que se registran en el plano de espacio de fases. Generalmente, su geometría consiste en una serie de capas finas donde la energía cinética perdida por un protón al pasar a través de ellas, ε , es muy pequeña comparada con su energía cinética total, E . Sin embargo, el seguimiento de partículas a través de una geometría dividida en capas no es computacionalmente eficiente en simulaciones Monte Carlo. La causa es la presencia frecuente de fronteras entre dos volúmenes, que limitan la longitud del paso en la simulación al ser necesario que éste termine en dicha frontera, para posteriormente cambiar el seguimiento al volumen siguiente.

Por ello, se ha implementado un modelo simplificado de las cámaras monitoras siguiendo el esquema de la Fig. 7.4. El diagrama de la izquierda muestra una vista lateral de un modelo detallado de cámara monitora. Con flechas se indica el número mínimo de pasos necesarios para transportar un protón a través de ésta. El diagrama de la derecha muestra el modelo simplificado. En él, la idea es agrupar todas las capas realizadas en el mismo material en una sola, cuyo espesor es la suma de los de dichas capas. De esta manera el número de fronteras disminuye y el seguimiento de las partículas a través de la cámara se realiza de manera más eficiente.

7.2.4. Metodología

Tal y como se ha indicado, la técnica de filtrado de protones depende de la geometría del cabezal; por lo tanto, se ha calculado el porcentaje de tiempo ahorrado para diferentes configuraciones de éste. Por otra parte, para comprobar que la fluencia total de protones a la salida del cabezal no se altera debido a la aplicación de esta técnica, todas las simulaciones han sido realizadas para el caso de campo abierto, en el que no se coloca ni apertura ni compensador en el morro.

En las simulaciones realizadas, el diámetro del morro del cabezal varía entre 12 cm y 25 cm. Además, recordando que el morro es móvil, la distancia de éste al isocentro varía entre 10 cm y 44 cm. Asimismo, se ha estudiado la mejora de eficiencia en la simulación en función de la energía del haz de protones a la salida del cabezal, la cual está relacionada por el alcance del SOBP, que en nuestro trabajo varía entre 5,0 cm y 24,0 cm.

Cada uno de los casos que se obtienen por combinación de las variables mencionadas se ha analizado para diferentes ángulos de rotación de la rueda moduladora de alcance. Como ya se comentó, esta rueda gira durante la aplicación del tratamiento en el paciente para crear el SOBP necesario. En la simulación con GEANT4 la rotación de la rueda se simula en pasos de $0,7^\circ$, precisión que se demostró suficiente para reproducir el movimiento real (Paganetti et al., 2004).

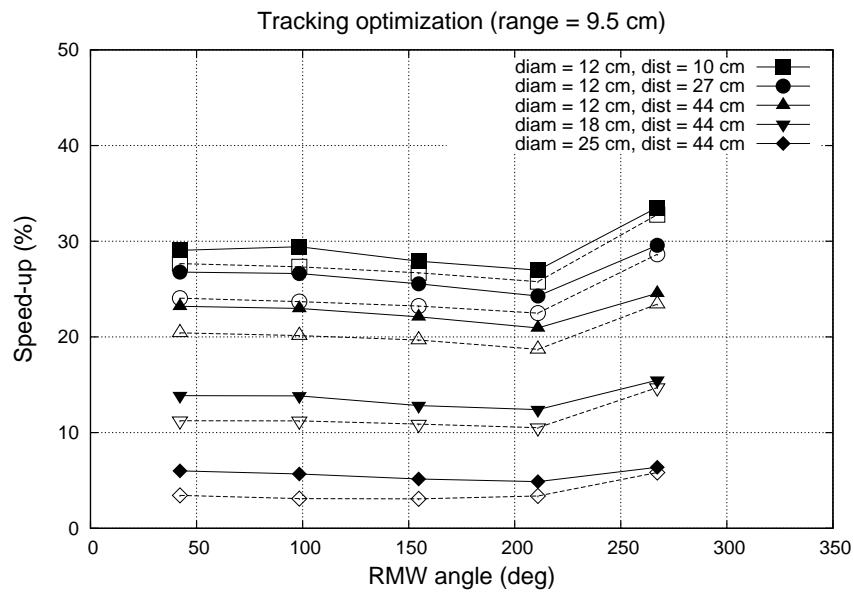
Para cada configuración del cabezal se ha simulado con GEANT4 un total de 10^5 protones entrando en el cabezal y comparamos los tiempos de CPU y la fluencia a la salida del cabezal obtenidos con la aplicación original y con la que incluye nuestras técnicas. Para ello, todas las simulaciones han sido realizadas bajo las mismas condiciones computacionales (*hardware* y *software*) para asegurar una correcta comparación del tiempo de CPU requerido para cada simulación.

7.3. Resultados y discusión

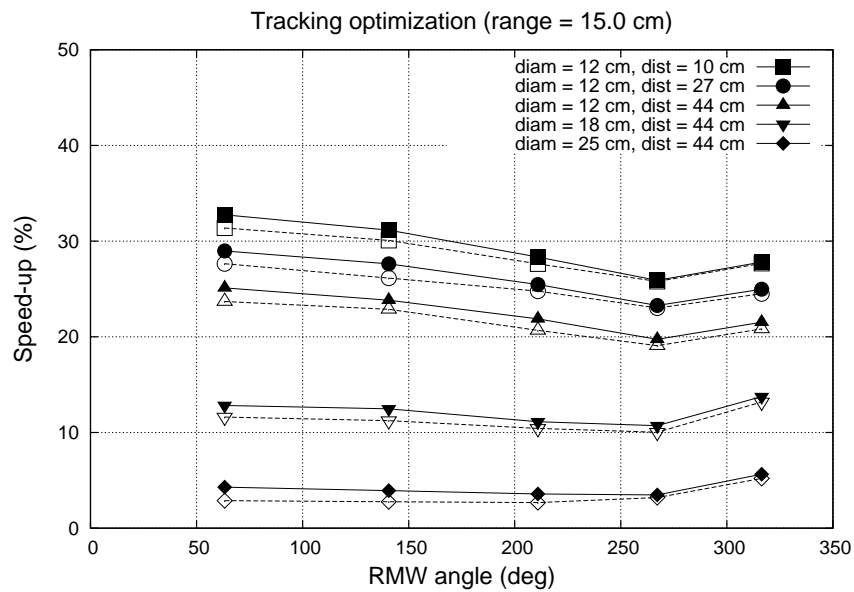
7.3.1. Filtrado de protones

Tal y como se ha comentado en la sección anterior, el filtrado de protones se ha llevado a cabo en dos lugares diferentes dentro del cabezal. Primero, se ha realizado un filtrado tras su paso por la rueda moduladora para eliminar de la simulación los protones que no lleguen al segundo dispersor. Posteriormente, hemos aplicado nuestra técnica de filtrado en el plano situado justo tras el segundo dispersor, eliminando de la simulación los protones que no apunten hacia el círculo definido por el diámetro del morro del cabezal. En este último caso ha sido necesario considerar un margen de tolerancia de 0,5 cm para no perder la contribución a la salida del cabezal de protones dispersados en las paredes del morro.

El análisis para diferentes configuraciones de tamaño del morro y su distancia al isocentro se muestra en la Fig. 7.5. En general, el impacto de nuestro algoritmo en la eficiencia de la simulación GEANT4 presenta una fuerte dependencia con el tamaño del morro. Se puede observar en sendas figuras que el porcentaje de tiempo de CPU ahorrado es mayor cuanto menor es el diámetro, obteniéndose valores superiores al 30 % para un diámetro de 12 cm. Esta dependencia estaba prevista porque el número de protones que llegan a la salida del cabezal para un número determinado de eventos simulados es proporcional al cuadrado del diámetro de la apertura; así pues, al disminuir el diámetro de salida la proporción de protones cuyo seguimiento puede no ser considerado aumenta. Por otra parte, la fluencia de salida del cabezal aumenta con la distancia del morro al isocentro debido también a razones de eficiencia geométrica; por lo tanto, la mejora de eficiencia de la simulación aumenta cuando la distancia del morro al isocentro disminuye. Además, esta figura muestra que la mayor parte de la disminución del tiempo de CPU se consigue con el filtrado realizado tras el segundo dispersor. Asimismo, debemos aclarar que la configuración del cabezal (en cuanto a sistemas dispersores, rueda moduladora y pista utilizada) para el SOBP de 9,5 cm de alcance (Fig. 7.5a) es distinta de la utilizada para el de 15 cm (Fig. 7.5b), de ahí que la dependencia del incremento de eficiencia con el ángulo de la rueda no siga la misma tendencia en ambos casos.

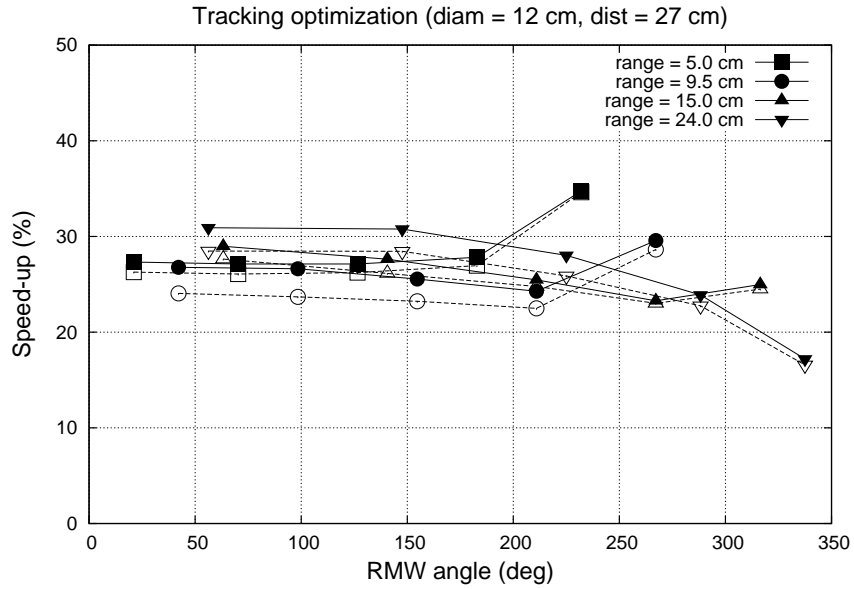


(a) Rango de SOBP = 9,5 cm.

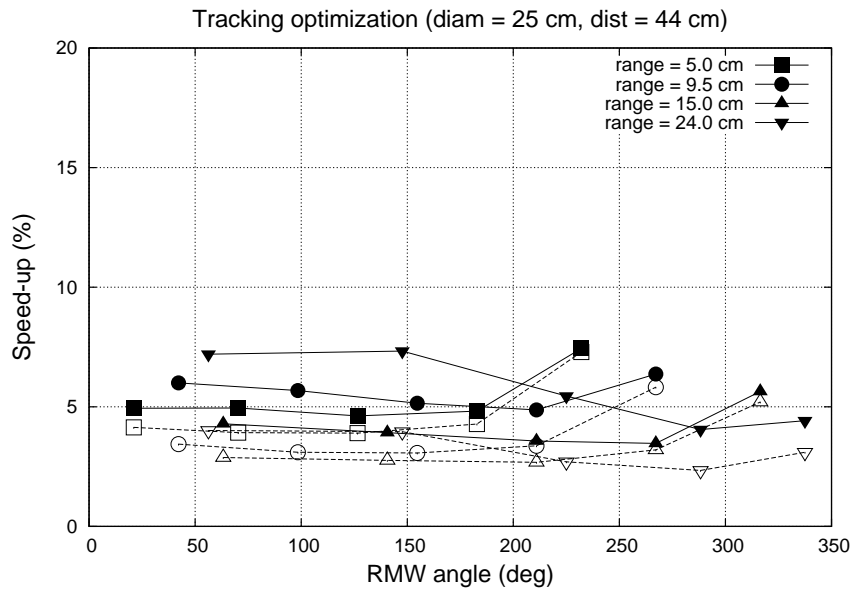


(b) Rango de SOBP = 15,0 cm.

Figura 7.5: Disminución de tiempo de CPU obtenida mediante la técnica de filtrado de protones en función del ángulo de rotación de la rueda moduladora para diferentes diámetros del morro y distancias de éste con el isocentro. La configuración del cabezal (dispersores, rueda moduladora y/o pista utilizada) es diferente para cada alcance del SOBP. Para cada serie se muestra la mejora de eficiencia obtenida con esta técnica de manera global (líneas sólidas, símbolos rellenos) y el ahorro obtenido filtrando solamente tras el segundo dispersor (líneas discontinuas, símbolos vacíos).



(a) Diámetro = 12 cm, distancia = 27 cm.



(b) Diámetro = 25 cm, distancia = 44 cm.

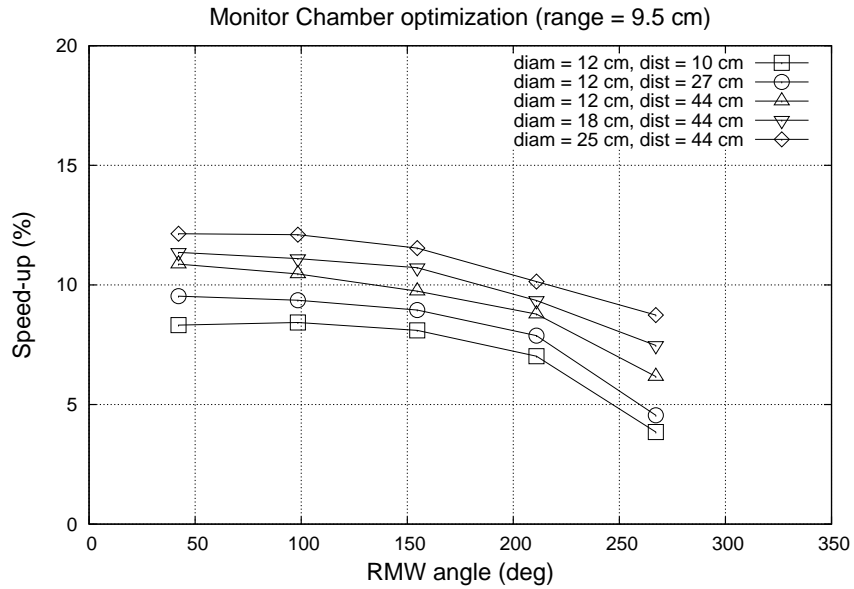
Figura 7.6: Disminución de tiempo de CPU obtenida con la técnica de filtrado de protones en función del ángulo de la rueda moduladora para diferentes valores del alcance del SOBP. La configuración del cabezal (dispersores, rueda moduladora y/o pista utilizada) es diferente para cada alcance del SOBP. La representación (símbolos llenos y vacíos, líneas continuas y discontinuas) es la misma que la usada en la Fig. 7.5.

El ahorro de tiempo de CPU para diferentes alcances del SOBP se muestra en la Fig. 7.6 considerando dos configuraciones concretas del morro. En este caso los resultados no presentan una tendencia significativa con respecto al alcance del SOBP. Para un diámetro de salida de 12 cm los valores se encuentran entre el 20 % y 30 % (Fig. 7.6a), mientras que para un diámetro de 25 cm los valores son menores del 10 % (Fig. 7.6b). Por otra parte, la dependencia con respecto al ángulo de la rueda moduladora es diferente para cada alcance de SOBP debido a las razones expuestas en el párrafo anterior. Finalmente, debemos recalcar que la situación considerada en la Fig. 7.6b corresponde al caso de máxima eficiencia de salida del cabezal, que es el peor escenario para la aplicación de esta técnica. Por lo tanto, este resultado demuestra que la inclusión de la técnica de filtrado en ningún caso implica una ralentización de la simulación Monte Carlo del cabezal.

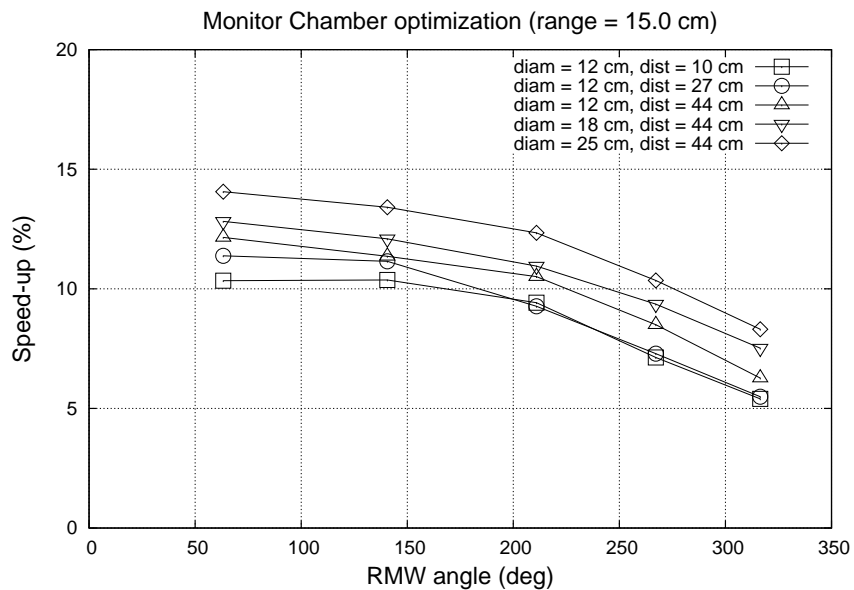
7.3.2. Simplificación de las cámaras monitoras

El aumento de eficiencia computacional obtenido utilizando solamente los modelos simplificados de las cámaras monitoras se muestra en las Figs. 7.7-7.8 para las mismas configuraciones del cabezal mostradas anteriormente. En general, el tiempo de CPU disminuye entre un 4 % y un 14 %. En la Fig. 7.7 se muestra el incremento relativo de eficiencia computacional en función del ángulo de rotación de la rueda moduladora de alcance para distintas configuraciones del morro del cabezal, mientras que en la Fig. 7.8 se muestran los valores obtenidos considerando distintos alcances del SOBP. Se puede observar que, en general, el porcentaje de ahorro de tiempo de CPU con los modelos simplificados de las cámaras monitoras disminuye cuando el ángulo de la rueda moduladora aumenta. Esta tendencia se puede explicar de acuerdo con el diseño mostrado en la Fig. 7.2b. El espesor del material a través del cual pasa el haz aumenta con el ángulo de la rueda moduladora, con lo cual el número de interacciones que experimenta cada protón con este material aumenta, provocando que el tiempo de CPU total de la simulación aumente. Sin embargo, el tiempo de CPU necesario para simular el transporte de protones a través de una cámara monitora es aproximadamente el mismo en todos los casos.

Además, en la Fig. 7.7 se puede observar que, de manera general, el incremento relativo de eficiencia computacional aumenta para configuraciones de mayor eficiencia geométrica, es decir, en situaciones en las que se utiliza el morro de mayor diámetro y se coloca a la mayor distancia posible del isocentro. La explicación es análoga a la del párrafo anterior. Cuanto mayor es la distancia del morro al isocentro, menor es el recorrido de los protones en la simulación; al ser menor, la contribución relativa al tiempo de CPU del transporte a través de las cámaras monitoras aumenta. Asimismo, cuanto menor sea el diámetro del morro a la salida del cabezal con mayor frecuencia interaccionan los protones en este volumen, aumentando el tiempo global de

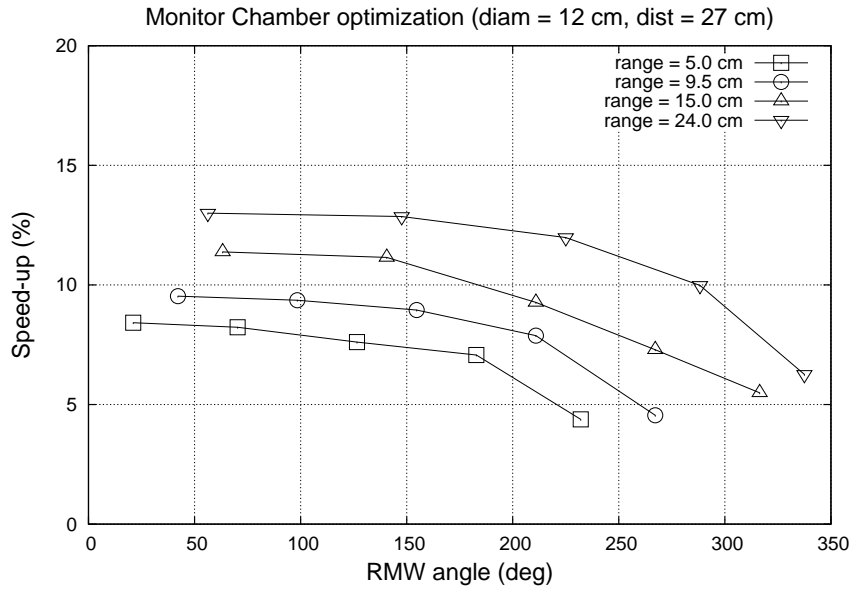


(a) Rango de SOBP = 9,5 cm.

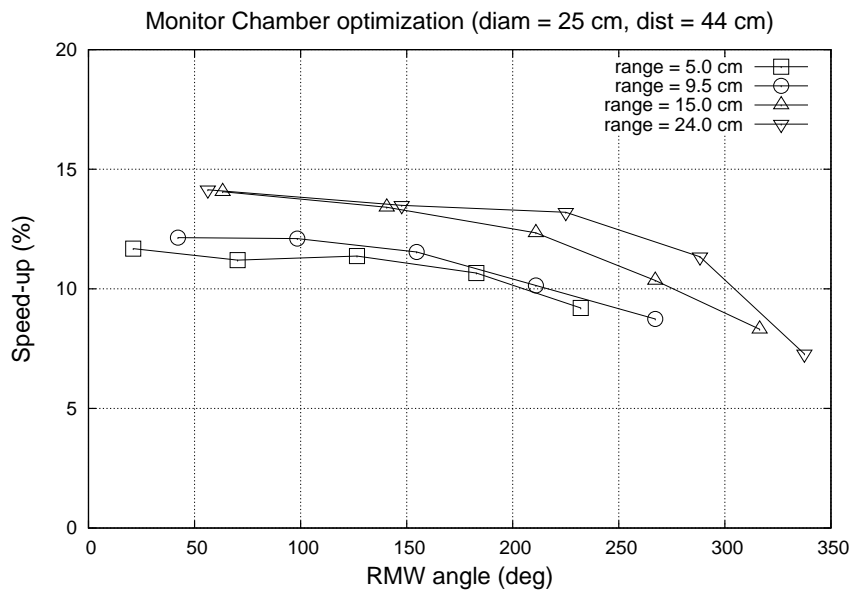


(b) Rango de SOBP = 15,0 cm.

Figura 7.7: Disminución de tiempo de CPU obtenida usando modelos simplificados de cámaras monitoras en función del ángulo de la rueda moduladora para diferentes configuraciones del morro del cabezal. La configuración del cabezal (dispersores, rueda moduladora y/o pista utilizada) es diferente para cada alcance del SOBP.



(a) Diámetro = 12 cm, distancia = 27 cm.



(b) Diámetro = 25 cm, distancia = 44 cm.

Figura 7.8: Disminución de tiempo de CPU obtenida usando modelos simplificados de cámaras monitoras en función del ángulo de la rueda moduladora para distintos valores del alcance del SOBP. La configuración del cabezal (dispensores, rueda moduladora y/o pista utilizada) es diferente para cada alcance del SOBP.

CPU.

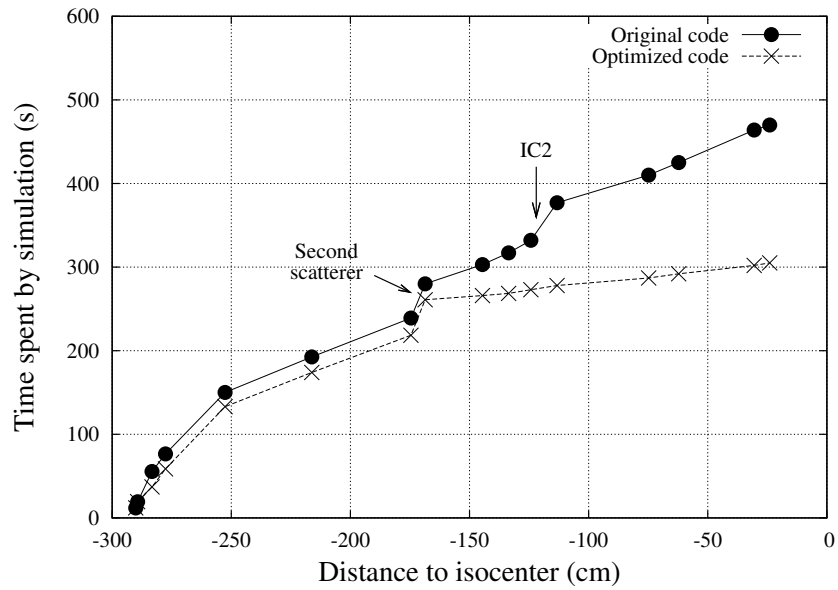
Por otra parte, en la Fig. 7.8 se observa que el aumento relativo de eficiencia computacional es mayor para valores grandes del alcance del SOBP. Un valor bajo para el alcance del SOBP implica que la energía cinética de los protones es baja, con lo cual las interacciones en los sistemas dispersivos del cabezal son más significativas. Esto provoca que el tiempo de CPU necesario para realizar el transporte a través de los dispersores aumente, provocando que la contribución relativa de las cámaras monitoras disminuya. Además, se puede observar que esta tendencia es más acusada para el diámetro de 12 cm que para el de 25 cm, en consonancia con la discusión del párrafo anterior.

7.3.3. Perfiles de tiempo

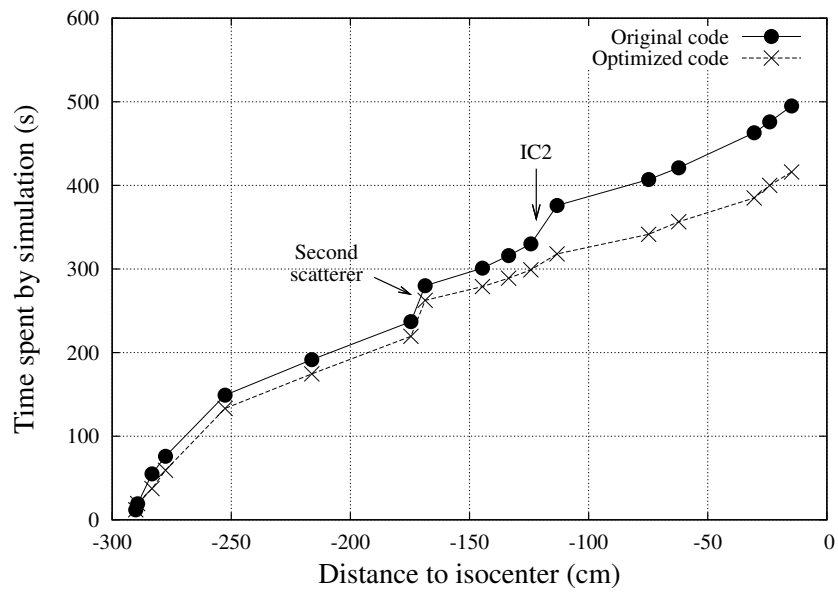
Para ilustrar el impacto de estas técnicas en el tiempo de CPU mostramos en la Fig. 7.9, a modo de ejemplo, dos perfiles de tiempo correspondientes a dos configuraciones del cabezal que sólo se diferencian en el diámetro del morro. Estos perfiles se han obtenido registrando el tiempo de CPU necesario para realizar la simulación de 10^5 protones desde su entrada en el cabezal hasta un plano definido por un valor constante de la coordenada z (el eje z es el eje de propagación del haz), donde se suspende el seguimiento de todas las partículas. En esta representación, la pendiente de la curva indica el coste computacional por unidad de longitud del transporte de partículas a través de esa parte del cabezal. Cuanto menor sea esta pendiente más eficiente es el transporte de partículas por unidad de longitud. En esta figura aparecen marcadas las zonas más lentas de la simulación, que corresponden al segundo dispersor (*second scatterer*) y a la segunda cámara monitora (IC2). Para un morro de 12 cm de diámetro, que es el utilizado con más frecuencia en los tratamientos con pacientes, se observa una disminución de un 35 % del tiempo de CPU (Fig. 7.9a); por otra parte, con el morro de 25 cm, la simulación es un 15 % más rápida (Fig. 7.9b). En el primer caso el aumento de eficiencia computacional se obtiene mediante la técnica de filtrado de protones, mientras que en el segundo la eficiencia de la simulación aumenta principalmente debido al simplificado del modelo de las cámaras monitoras.

7.3.4. Impacto sobre la fluencia de salida

Finalmente, comprobamos que la fluencia energética a la salida del cabezal no cambia debido al uso de estas técnicas. Para ello, en dos configuraciones de SOBP, correspondientes a alcance medio y profundo, respectivamente, se ha comparado la distribución de dosis en profundidad y el perfil lateral a la profundidad del centro del SOBP, obtenidos en agua tanto con la versión original de la aplicación GEANT4 como con la nueva, que incluye las técnicas presentadas en este capítulo. En ambos casos, la dosis se expresa normalizada al punto central del SOBP obtenido con la versión

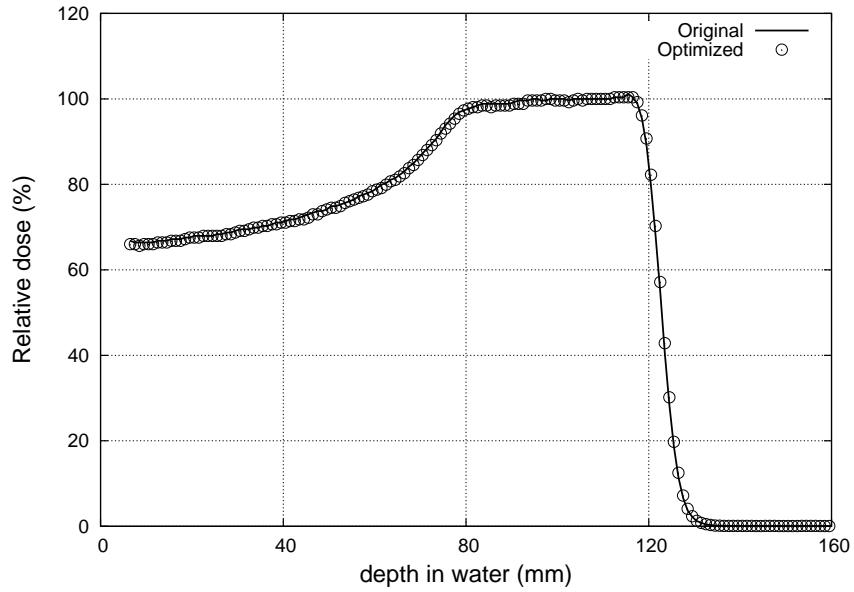


(a) Diámetro = 12 cm

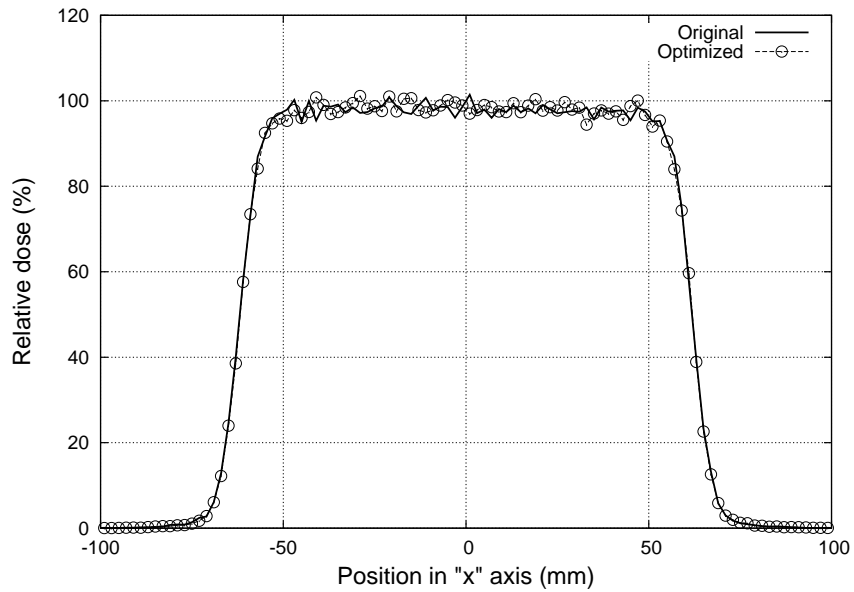


(b) Diámetro = 25 cm

Figura 7.9: Tiempo de CPU necesario para simular 10^5 protones primarios a lo largo del cabezal en función del valor de la coordenada z donde se termina el seguimiento de partículas. Se comparan los valores obtenidos para la aplicación GEANT4 sin aplicar estas técnicas (línea continua y círculos) frente a los de la misma aplicación incluyéndolas (línea discontinua y cruces). En ambas figuras la configuración es: alcance de SOBP de 18,5 cm, ángulo de la rueda moduladora de 210° y distancia morro-isocentro de 24 cm.

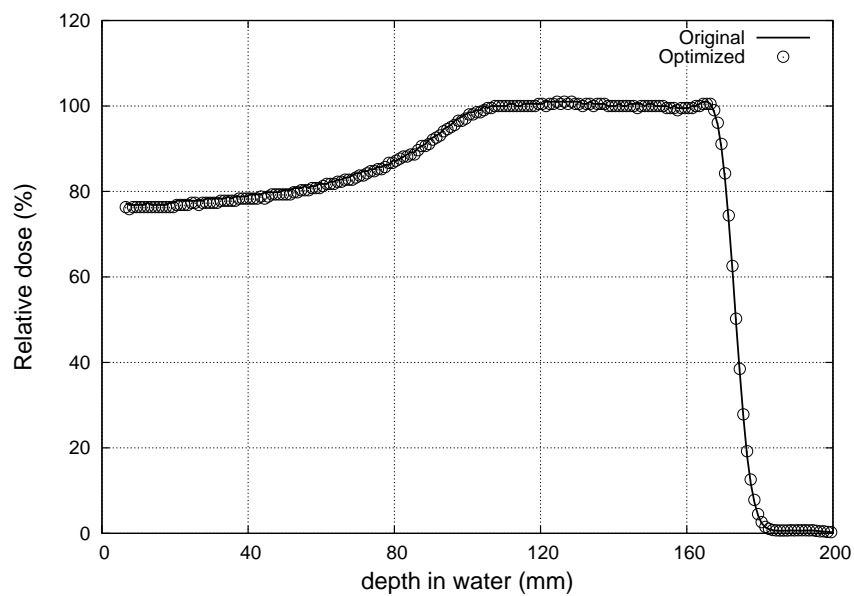


(a)

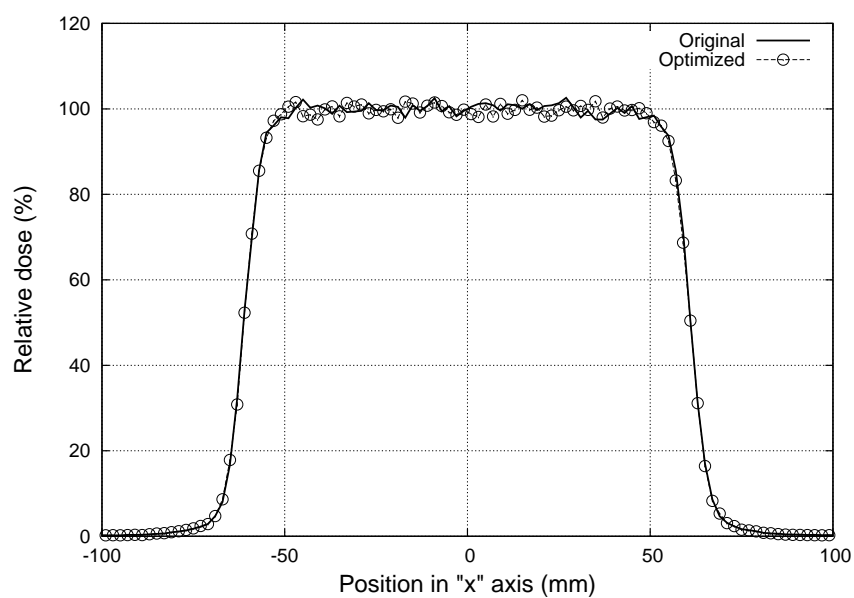


(b)

Figura 7.10: Comparación de las curvas de dosis en profundidad (a) y de los perfiles calculados en el centro del SOBP (b) obtenidos en agua usando la aplicación original (línea continua) y la nueva aplicación, que incluye nuestras técnicas para mejorar la eficiencia (línea discontinua y círculos). Los valores de ambas curvas han sido normalizados a la dosis en el centro del SOBP obtenido con la aplicación original. El alcance y anchura del SOBP son de 12,00 cm y 4,00 cm, respectivamente; el diámetro de salida del morro es de 12 cm.



(a)



(b)

Figura 7.11: Resultados análogos a los mostrados en la Fig. 7.10 con alcance de SOBP de 17,19 cm y anchura de modulación de 6,78 cm.

original.

En la Fig. 7.10 se muestra el resultado para un SOBP de 12,00 cm de alcance y 4,00 cm de anchura de modulación, mientras que en la Fig. 7.11 se presenta el resultado para un alcance de 17,19 cm y una anchura de modulación de 6,78 cm. En este caso, las distribuciones de dosis se obtuvieron simulando la incidencia en el cabezal de 10^7 protones. La incertidumbre en la meseta del SOBP es menor del 0,4 % considerando *voxels* de 3 cm de radio y 1 mm de altura colocados en el eje central. En el caso de los perfiles, la dosis se ha calculado considerando *voxels* paralelepípedicos de dimensiones $0,2 \times 5 \times 1 \text{ cm}^3$ para obtener una incertidumbre estadística del 0,6 % (1σ).

En todos los casos el acuerdo entre ambos resultados es total, dentro de la incertidumbre de los resultados. Tal y como se observa, tanto la forma del SOBP como la dosis de entrada son iguales para las dos versiones de la aplicación. Por lo tanto, estos resultados demuestran que, efectivamente, las técnicas aplicadas para incrementar la eficiencia de la simulación con GEANT4 del cabezal no introducen un cambio significativo en el flujo de protones y en su distribución de energía a la salida del cabezal.

7.4. Conclusiones

En este capítulo hemos presentado dos técnicas desarrolladas para mejorar la eficiencia de la simulación GEANT4 del cabezal instalado en uno de los *gantries* del MGH funcionando en modo BBM. La primera consiste en implementar un algoritmo que filtra el seguimiento de protones de acuerdo con restricciones puramente geométricas. La segunda consiste en simplificar el modelo de las cámaras monitoras con el objetivo de minimizar el número de pasos necesario para realizar el transporte de partículas a través de éstas.

Hemos demostrado que con ambas técnicas el tiempo de CPU invertido en las simulaciones disminuye para el mismo número de eventos. Con el filtrado de protones se ha mejorado la eficiencia computacional hasta en un 35 %, mientras que simplificando los modelos de las cámaras monitoras se puede incrementar la eficiencia computacional hasta en un 14 %. Esto se traduce en que para un caso clínico típico con diámetro de salida de 12 cm (sin contar con apertura y compensador) la eficiencia de la simulación se incrementa en un 35 %. En el peor escenario, que corresponde al valor máximo del diámetro de salida (25 cm), se consigue un aumento de eficiencia de un 15 %.

Estas técnicas pueden aplicarse a cualquier otro cabezal utilizado en terapia con protones mediante BBM, si bien los resultados que se puedan obtener para otra máquina sean probablemente diferentes a los presentados aquí, ya que la técnica de filtrado se aplica de acuerdo con la geometría particular del cabezal. Asimismo, el trabajo que hemos desarrollado puede adaptarse a otros códigos de simulación Monte Carlo.

Capítulo 8

Microdosimetría en circuitos integrados

RESUMEN: En este capítulo presentamos las aplicaciones GEANT4 desarrolladas para reproducir experimentos de irradiación de un circuito integrado biestable realizados en el CNA (Centro Nacional de Aceleradores – Sevilla, España) por colaboradores del Dpto. Ingeniería Electrónica de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros de la Universidad de Sevilla. Para tal fin, hemos desarrollado una aplicación GEANT4 para reproducir la nueva fuente de neutrones del CNA, que determina el haz con el que la calidad de la fuente es mayor. El modelo geométrico del circuito biestable tiene en cuenta todos los volúmenes sensibles de cada uno de los transistores, permitiendo calcular la energía depositada en cada uno de ellos en situaciones experimentales previstas en el CNA. Para el caso de irradiación con partículas cargadas pesadas, también hemos desarrollado una aplicación GEANT4 que calcula tanto la deposición lineal de energía como su distribución espacial a escala sub-micrométrica.

ABSTRACT: In this chapter we present the GEANT4 applications developed to reproduce irradiation experiments carried out at CNA by collaborators working at the Electronic Engineering Department (Escuela Técnica Superior de Ingenieros) of the University of Sevilla (Spain) using a flip-flop integrated circuit. With this purpose, we have developed a GEANT4 application to reproduce the new neutron source installed at CNA, which determines the beam which must be used in order to maximize the source quality. The geometric model of the flip-flop circuit takes into account the sensitive volumes for each transistor in order to calculate the energy deposited in any of them in experiments planned at CNA. For the irradiation with heavy-charged particles, we have also developed a GEANT4 application which calculates both

linear energy deposition and its spatial distribution at sub-micrometric scale.

8.1. Introducción

En este capítulo se presentan las aplicaciones desarrolladas con el código GEANT4 (versión 9.3) para estimar la energía depositada en los volúmenes sensibles de un circuito biestable CMOS (*Complementary Metal-Oxide-Semiconductor*) debido al paso de radiación de diversa índole. El propósito de este trabajo es proporcionar una herramienta para preparar futuros experimentos en las instalaciones del CNA (García-López et al., 2000, 2008). Se pretende contar con una aplicación que sirva de herramienta computacional de simulación para el desarrollo de experimentos en la línea de microsonda del acelerador (NEC Pelletron) de 3 MV y en el ciclotrón IBA de dicha instalación (que puede proporcionar un haz de protones a 18 MeV con intensidad de hasta $100 \mu\text{A}$ o un haz de deuterones a 9 MeV con intensidad de hasta $40 \mu\text{A}$). Además, en este último se ha instalado una fuente de neutrones que en este trabajo también se reproduce con GEANT4.

Los circuitos de microelectrónica son sensibles al paso de partículas ionizantes debido a la escala nanométrica de sus componentes. La traza generada por un ion genera distribuciones de carga parásita y además puede provocar daños por desplazamiento en la red cristalina (Summers et al., 1995). Ambas cosas pueden producir efectos en la microelectrónica, denominados SEE, que llevan a respuestas inesperadas del circuito. Estos efectos pueden ser analizados y medidos experimentalmente. Por esta razón, actualmente existen proyectos en los que se usan circuitos microelectrónicos para medidas dosimétricas (Seon et al., 2010). Por otra parte, se conoce que los canales de los transistores son sensibles a pérdidas de energía no ionizantes, conocidas como NIEL, por neutrones que transfieren su momento lineal a átomos de la red cristalina de silicio (Summers et al., 1995). Además, se conoce que los óxidos de un chip microelectrónico, al estar compuestos de un material aislante (SiO_2), pueden acumular carga generada por ionización (Summers et al., 1993), conocidas como TID, debido al paso de partículas cargadas, fotones y, en menor medida, neutrones.

El código GEANT4 ha sido también utilizado para cálculos de microdosimetría en modelos geométricos simples de memorias RAM (Inguibert et al., 2002). Sin embargo, no hemos encontrado en la literatura un trabajo que utilice este código para medidas de microdosimetría en volúmenes específicos de un circuito integrado. En este sentido, hemos de destacar que, hoy día, los códigos de simulación de transporte de partículas por el método de Monte Carlo (p. ej. GEANT4, MCNPX o PHITS) usan modelos estadísticos para reproducir interacciones nucleares a bajas energías entre

el proyectil y el blanco. Se conoce que estos modelos no son fiables a la hora de predecir la producción de neutrones y fotones generados por protones y deuterones a bajas energías (menores de 20 MeV en el sistema laboratorio), ya que en esas circunstancias otros mecanismos, que no se describen satisfactoriamente con los modelos estadísticos, son importantes (procesos directos, de *knockout*, etc.). En particular, para deuterones a bajas energías son muy importantes las reacciones de *stripping* y *knockout* con los núcleos del blanco, dada la energía de ligadura del deuterón (2,2 MeV). Este hecho representa una limitación obvia (y conocida) de todos los códigos de transporte de partículas. Ante ello, recientemente han empezado proyectos para paliar esta limitación de los códigos de simulación. Por ejemplo, en el caso de MCNPX se ha desarrollado recientemente una aplicación para reacciones inducidas por deuterones que utiliza librerías de datos evaluados, siguiendo un procedimiento muy parecido al considerado para reproducir el transporte de neutrones a bajas energías (Sauvan et al., 2010).

La simulación del transporte de neutrones está profundamente ligada al método de Monte Carlo, ya que fue la primera aplicación de dicho método (Metropolis, 1987). En trabajos recientes se ha demostrado la capacidad de GEANT4 para tales simulaciones (Lemrani et al., 2006; Garny et al., 2009). No obstante, en relación con la producción de neutrones, los modelos nucleares son incapaces de describir los mecanismos de reacción a las energías típicas de las fuentes de neutrones comunes, tal y como se puede deducir del párrafo anterior. Hasta ahora, esta limitación se ha sorteado de diferentes maneras. Por ejemplo, si la sección eficaz de producción presenta picos o resonancias, entonces se aproxima la simulación considerando un haz de neutrones con esas energías (Patronis et al., 2007). Si esta aproximación no es plausible, entonces se recurre a códigos de simulación específicos de reacciones nucleares (que acceden a librerías de datos evaluadas) para obtener un espectro inicial de neutrones más realista (Lemrani et al., 2006; Sauvan et al., 2010). En cualquier caso, a la hora de describir o evaluar el espectro de neutrones generado por una fuente determinada es necesario, o bien recurrir a cálculos externos al código de transporte de radiación, o bien considerar modelos simplificados.

Estructura de este capítulo

En la sección 8.2 describimos el modelo geométrico con el que simulamos el circuito biestable. En la sección 8.3 nos centramos en presentar la simulación de la fuente de neutrones del CNA, incluyendo los espectros de producción obtenidos. En la sección 8.4 describimos las aplicaciones desarrolladas con GEANT4 para realizar estudios de microdosimetría. Posteriormente, en la sección 8.5 mostramos los resultados relacionados con la irradiación del biestable por la fuente de neutrones y por diferentes haces disponibles en el CNA. En la sección 8.6 realizamos una discusión de estos

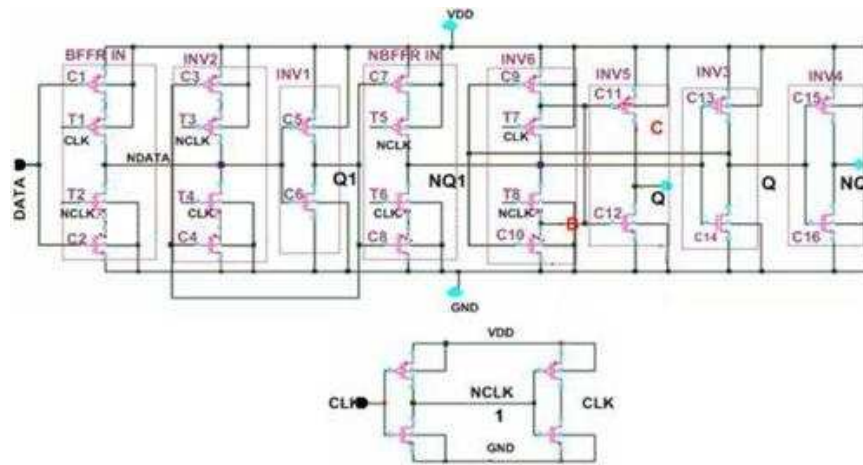


Figura 8.1: Esquema del biestable. El circuito presenta una arquitectura de maestro-esclavo (*master-slave*) con memoria intermedia de reloj (*clock buffer*) asociada.

resultados y en la sección 8.7 presentamos las conclusiones de este capítulo.

8.2. Modelo del circuito biestable

El esquema del circuito biestable se muestra en la Fig. 8.1. Se trata de un sistema estándar de maestro-esclavo (*master-slave*) con una señal de entrada de memoria de reloj (*clock buffer*). La memoria de reloj tiene dos puertas inversoras CMOS (cuatro transistores en total), el componente *maestro* presenta cuatro puertas inversoras CMOS (14 transistores), algunas de ellas con transistores que actúan de *llave*, y el componente *esclavo* tiene también cuatro inversores CMOS (10 transistores). En adelante, los transistores llave se designarán con la nomenclatura **Tx**, los inversores con **Cx** y los de la memoria de reloj con los códigos **nCLK_nMOS**, **CLK_nMOS**, **CLK_pMOS** y **nCLK_pMOS**.

El biestable forma parte de un ASIC (*Application-Specific Integrated Circuit*) diseñado por el Departamento de Ingeniería Electrónica (Escuela Técnica Superior de Ingenieros)^a de la Universidad de Sevilla (España) para experimentos de irradiación en el CNA (Palomo et al., 2010). Sin pretender entrar en demasiados detalles tecnológicos, el kit de tecnología VLSI (*Very-Large-Scale Integration*) es un Semiconductor On C5^b disponible a través del programa MOSIS (*Metal Oxide Semiconductor Implementation Service*).^c Es una tecnología de pozos *n* de 0,5 micras, tres metales y dos polisilicios, muy conocida en el campo de la microelectrónica (su lanzamiento fue a

^aPersona de contacto: Francisco R. Palomo.

^bAntes conocido como AMIS (*AMI Semiconductor*) C5.

^cPágina web de MOSIS: <http://www.mosis.com>.

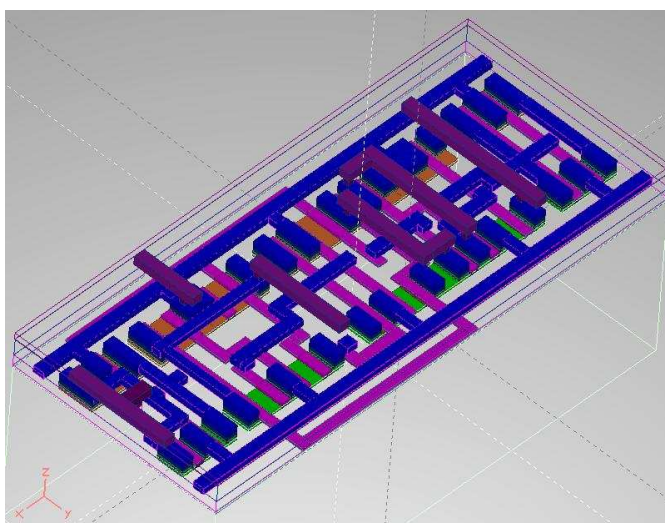


Figura 8.2: Modelo realizado con FASTRAD del circuito biestable. Se pueden apreciar las dos capas de aluminio (azul y morado), las líneas de polisilicio (rosa) y los cuerpos de los transistores (naranja para los pMOS, verde para los nMOS).

medidos de la década de 1990). En el biestable, los volúmenes sensibles de los transistores CMOS, que son *drenador*, *fuentes*, *canal* y *óxido de puerta*, se encuentran bajo una red compuesta por dos capas de aluminio y una capa de pasivación de SiO_2 de unas $4 \mu\text{m}$ de espesor. En cualquier caso, una descripción detallada de esta tecnología escapa de los objetivos de esta memoria, por lo que remitimos a la bibliografía para una descripción más detallada del chip y su tecnología (Palomo et al., 2009).

Para crear un modelo geométrico del biestable se ha utilizado la aplicación CAD denominada FASTRAD.^d El resultado puede observarse en la Fig. 8.2. Además de la propia herramienta de visualización, FASTRAD puede crear dos archivos XML (*eXtensible Markup Language*) que describen la geometría y los materiales usados, respectivamente. Ambos archivos son legibles por GEANT4 gracias al esquema GDML (*Geometry Description Markup Language*) (Chytracsek et al., 2006), incorporado en la propia distribución oficial de GEANT4. Con lo cual, en la aplicación desarrollada en este trabajo se invocan las clases del esquema GDML para importar íntegramente la geometría.

Las dimensiones y posiciones relativas de todos los transistores han sido obtenidas a partir del esquema usado para su construcción. El sustrato presenta unas medidas de $55,5 \times 24,0 \times 18,0 \mu\text{m}^3$ en las direcciones (x, y, z) respectivamente. Además, la superficie superior del biestable está cubierta por una capa de SiO_2 de 400 nm de espesor, que constituye los llamados *óxidos de campo*, necesarios para poder aislar a los diferentes transistores

^dPágina web de FASTRAD: <http://www.fastrad.net>.

MOS (*Metal Oxide Semiconductor*) entre sí. Como ya se ha comentado, en la estructura de un transistor CMOS destacan, como volúmenes sensibles, el drenador, la fuente, el canal y el óxido de puerta. En la Tabla 8.1 mostramos de manera resumida las dimensiones de estos volúmenes, clasificadas por tipos de transistor, ya que las dimensiones de los transistores de tipo pMOS son diferentes a las de tipo nMOS.

Transistor	Volumen	x (μm)	y (μm)	z (μm)
pMOS	Drenador	1,50	4,00	0,30
	Fuente	1,50	4,00	0,30
	Canal	1,05	4,00	0,30
	Óxido de puerta	1,05	4,00	0,0125
nMOS	Drenador	1,50	3,00	0,30
	Fuente	1,50	3,00	0,30
	Canal	1,05	3,00	0,30
	Óxido de puerta	1,05	3,00	0,0125

Tabla 8.1: Dimensiones genéricas de los volúmenes sensibles según el tipo de transistor.

Al reproducir una geometría a escala micrométrica es necesario comprobar que no exista superposición de volúmenes en el modelo construido por GEANT4. Con tal fin, en este trabajo hemos utilizado una versión modificada de uno de los ejemplos oficiales del código GEANT4, concretamente el /gdml/G01, para que genere un archivo de salida legible por un visualizador VRML (*Virtual Reality Modeling Language*), como es CosmoPlayer.^e De esta manera, se ha comprobado que el modelo geométrico creado por GEANT4 a partir de los archivos XML generados por FASTRAD no presenta volúmenes solapados.

8.3. Modelo GEANT4 de la fuente de neutrones del CNA

8.3.1. Descripción de la fuente

En esta sección describimos cómo se ha modelado con GEANT4 la nueva fuente de neutrones del CNA. El objetivo de esta tarea es disponer de una aplicación que permitiera estimar la irradiación sufrida por circuitos integrados colocados a una distancia lo suficientemente lejana como para considerar únicamente emisiones de neutrones y fotones secundarios a 0° , dado el extremadamente pequeño ángulo sólido subtendido por el circuito integrado desde la posición de la fuente (a 1 m de distancia es $\sim 10^{-9}$ sr).

^eCosmoPlayer está disponible en <http://ovrt.nist.gov/cosmo/>.

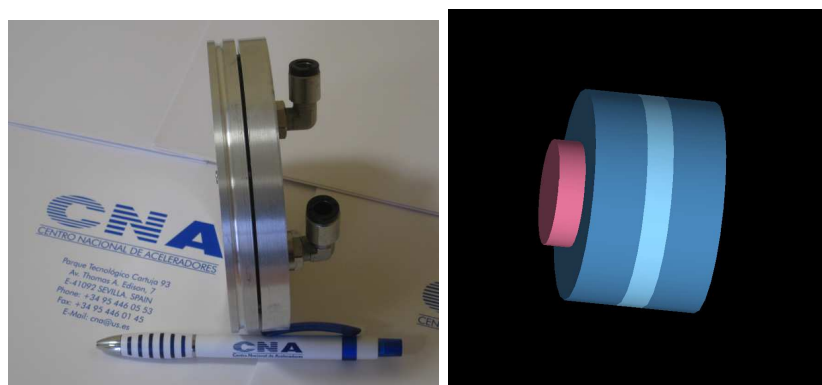


Figura 8.3: Izquierda: fotografía del tambor de refrigeración de la fuente de neutrones del CNA. Derecha: Modelo geométrico en GEANT4 de la lámina de ^9Be (en color rosado) junto con el tambor de refrigeración (de izquierda a derecha: acero, agua y acero). El haz entra desde el lado izquierdo incidiendo en la lámina de ^9Be (5 mm de espesor).

La fuente de neutrones consiste en una lámina de ^9Be de 5 mm de espesor colocada en el seno de un tambor de refrigeración por agua realizado en acero. Dicha lámina es bombardeada por el haz producido por el ciclotrón IBA del CNA. Como ya se expuso previamente, dicho ciclotrón genera un haz de protones a 18 MeV o bien de deuterones a 9 MeV. Con esta configuración, se pretende generar neutrones rápidos mediante reacciones de *stripping* o *break-up*, inducidas por haces de protones y deuterones sobre un blanco grueso de berilio (Massey et al., 2002; Takata et al., 2010). Junto con los neutrones se producen fotones a través de las reacciones $^9\text{Be}(p,n\gamma)^9\text{B}$, $^9\text{Be}(d,n\gamma)^{10}\text{B}$ y $^9\text{Be}(d,p\gamma)^{10}\text{Be}$.

Dichos fotones constituyen una radiación *parásita* para los objetivos de este trabajo. Se dice que esta radiación es parásita porque los transistores CMOS son más vulnerables a daños producidos por la incidencia de gammas que por los producidos por neutrones (Chang, 1992). Por lo tanto, es muy importante obtener una producción de gammas mucho menor que de neutrones para estudiar la respuesta de circuitos frente a la irradiación por neutrones. En cualquier caso, la irradiación debida a los fotones debe ser también evaluada en nuestros experimentos. En este sentido, sus efectos se contrastan con medidas experimentales usando una fuente de ^{60}Co , proporcionada por J. L. Shepperd & Assoc. (modelo 484C), cuya instalación está prevista en el CNA.

8.3.2. Simulación con GEANT4

8.3.2.1. Reproducción de la geometría

En la Fig. 8.3 mostramos una fotografía del tambor de refrigeración junto con el modelo utilizado en GEANT4 de la lámina de ^9Be y dicho tambor de

refrigeración. El haz primario (que proviene del ciclotrón) entra desde la izquierda. Los 5 mm de la lámina de ^9Be son suficientes para frenar el haz primario dentro de ésta. Tras ella se sitúa el tambor de refrigeración, cuyo modelo consiste de tres láminas. La primera y la tercera están compuestas de acero (1 cm) y modelan las paredes del tambor, mientras que la segunda lámina (5 mm) reproduce el agua circundante por el tambor. En cuanto a las dimensiones laterales, éstas no son relevantes en los estudios presentados en este trabajo ya que, como anteriormente se expuso, sólo analizamos la emisión de partículas secundarias a 0° .

8.3.2.2. Metodología

La simulación con GEANT4 de la fuente de neutrones se divide en dos partes diferenciadas para poder comparar los resultados de la simulación con datos experimentales encontrados en la literatura. La estrategia seguida consiste en:

- Simulación del haz incidente en la lámina de ^9Be con la correspondiente generación de partículas secundarias. De éstas, se almacenan en un archivo de espacio de fases *IAEAphsp* (Capítulo 3) aquéllas que crucen la base de la lámina pegada al tambor de refrigeración.
- Simulación a través del tambor de refrigeración del transporte de las partículas almacenadas en el espacio de fases generado en el paso anterior. De éstas, aquéllas que pasan a través del tambor de refrigeración se guardan en un nuevo archivo de espacio de fases *IAEAphsp*.

La finalidad de la primera etapa consiste en poder comparar con datos experimentales de producción en blanco grueso de ^9Be , mientras que la segunda etapa es para calcular el coeficiente de transmisión global a través del tambor.

La emisión obtenida con GEANT4 de neutrones secundarios en la lámina de ^9Be puede compararse con datos experimentales de blanco grueso publicados por Brede et al. (1989), tanto para haces de protones como de deuterones. En ese trabajo, consideraban una energía de haz de protones que se extendía desde 17,24 MeV hasta 22,01 MeV, mientras que para deuterones el rango de energía se extendía desde 9,43 MeV hasta 13,54 MeV. En nuestro caso, se calcula el espectro de energía de los neutrones emitidos por un haz de protones a 18 MeV sobre ^9Be mediante interpolación lineal entre los valores experimentales a 17,24 MeV y 18,16 MeV publicados en dicho trabajo. Por otra parte, la distribución de energía de los neutrones emitidos por un haz de deuterones incidiendo a 9 MeV sobre ^9Be se estima mediante extrapolación lineal de las tres energías más bajas medidas en el mismo trabajo, que son 9,43 MeV, 10,06 MeV y 10,68 MeV. En este caso ha sido necesario tener en

cuenta la forma de los espectros experimentales en la zonas de transición del espectro, en las que la extrapolación lineal no puede proporcionar resultados fiables.

Por otra parte, en la literatura no ha sido posible encontrar datos de producción de gammas para un montaje experimental similar al presentado aquí; con lo cual, estos cálculos deben considerarse de modo estimativo.

8.3.2.3. Lista de física

Para simular las interacciones electromagnéticas hemos utilizado una lista de física basada en el paquete *Livermore Low-Energy EM*, mientras que para las interacciones hadrónicas se consideran los procesos incluidos en la lista *QGSP_BIC_HP*. Dado que la lista de física *Livermore* ya ha sido presentada en el capítulo 5, centramos esta sección en describir la parte correspondiente a la física hadrónica.

El nombre de la lista de física *QGSP_BIC_HP* proviene de los diferentes modelos que se utilizan en función de la partícula incidente y de la energía cinética que tenga.

QGSP (*Quark-Gluon String Precompound*) hace referencia al uso del modelo de cuerdas quark-gluón junto con estados de preequilibrio del núcleo remanente. El modelo *QGS* se aplica a piones, kaones y nucleones desplazándose con una energía cinética mayor de 10 GeV y se encarga de aplicar el modelo de cuerdas en la colisión inelástica de hadrones con los nucleones presentes en el núcleo blanco. En nuestro caso nunca se aplica debido al rango de energías de este trabajo. Por su parte, la “P” hace referencia a la desexcitación del núcleo compuesto por el proyectil y el blanco según el modelo de preequilibrio que ya se describió en el capítulo 4. Esta etapa de desexcitación se aplica actualmente en el contexto del siguiente modelo, pero en la denominación de la lista de física se mantiene en este lugar por razones históricas.

BIC indica que la desexcitación intra-nuclear se realiza según el modelo de cascada binaria. Se aplica para nucleones cuya energía cinética sea menor de 10 GeV y reproduce las interacciones inelásticas con los núcleos del material del blanco. El núcleo que hace de blanco se reproduce como un colectivo de nucleones en el cual entra el proyectil. Éste genera partículas secundarias a su paso, producidas a partir de colisiones en cascada de dos cuerpos. En el caso de que la energía cinética del proyectil sea mayor de 10 GeV, este modelo se aplica tras el modelo *QGS*. Una vez obtenido el núcleo remanente, se desexcita de acuerdo con el modelo de preequilibrio ya mencionado (Capítulo 4).

Por último, *HP* se refiere al paquete de modelos de *alta precisión* para el transporte de neutrones cuya energía cinética esté por debajo de 20 MeV. Estos modelos, que reproducen fenómenos elásticos, inelásticos, de captura y

de fisión inducida por neutrones, usan las librerías de GEANT4 denominadas *G4ENDL*, que incluyen datos nucleares evaluados de las librerías ENDF/B,^f JEFF^g y JENDL,^h como ya se ha comentado en el capítulo 7.

En cuanto a los cortes de producción de secundarias, hemos utilizado un valor de 500 nm. La razón de utilizar un corte de producción tan bajo en comparación con las dimensiones típicas de esta fuente de neutrones fue debido al interés de simular el transporte del haz de protones y neutrones dentro de la lámina de ⁹Be hasta el más pequeño detalle. En efecto, con este valor se considera el seguimiento de todos los electrones secundarios cuya energía cinética inicial sea mayor de 250 eV, que es el límite de aplicabilidad de los modelos de GEANT4 basados en los datos evaluados de Livermore. En este sentido, debemos recordar que el propio código GEANT4 produce partículas secundarias por debajo del umbral si la partícula viajera se encuentra a una distancia de las fronteras del volumen menor que los cortes de producción. Esto representa una salvaguarda interna de GEANT4 para evitar sesgos en los resultados.ⁱ En cualquier caso, la pérdida de energía debida a procesos de ionización cuyo electrón secundario no se considera en la simulación se calcula por medio de modelos continuos de pérdida de energía.^j

8.3.3. Emisión de partículas por la fuente

De acuerdo con la discusión anterior, en esta sección se realiza el cálculo de la producción de neutrones y gammas emitidos a 0° con respecto a la dirección del haz incidente. En primer lugar, se compara la producción de neutrones calculada con GEANT4 frente a los datos experimentales mencionados anteriormente (Brede et al., 1989). De esta manera podemos mostrar el impacto que tiene el uso exclusivo de modelos estadísticos en las simulaciones por métodos de Monte Carlo. Por otro lado, no se han encontrado datos experimentales en la literatura con los que poder comparar la producción de gammas calculada con GEANT4. Por lo tanto, estos valores deben interpretarse a efectos estimativos. Finalmente, en ambos casos (neutrones y gammas) se estudia la transmisión a través del tambor de refrigeración.

El objetivo de estos cálculos es realizar una caracterización preliminar de la nueva fuente de neutrones del CNA, por lo que al final de esta sección se realiza un breve análisis de los resultados obtenidos.

^f<http://www.nndc.bnl.gov/exfor/endl00.jsp>.

^g<http://www.oecd-nea.org/dbdata/jeff/>.

^h<http://wwwndc.jaea.go.jp/jendl/jendl.html>.

ⁱCapítulo 5 de la guía del usuario de GEANT4 (<http://geant4.web.cern.ch/geant4/UserDocumentation/UsersGuides/ForApplicationDeveloper/html/ch05s04.html>).

^jUna explicación más detallada se encuentra en la página web del manual de referencia de los modelos físicos de GEANT4: <http://geant4.cern.ch/support/userdocuments.shtml>.

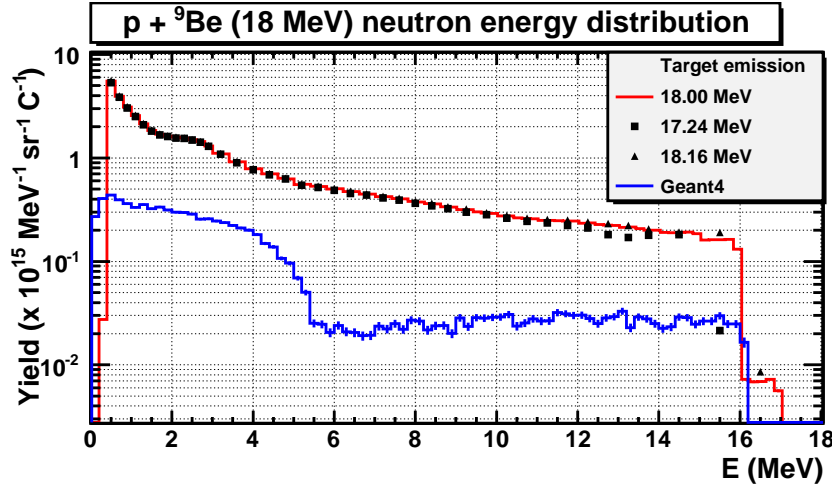


Figura 8.4: Distribución de energía de los neutrones emitidos a 0° debido a la incidencia del haz de protones a 18 MeV en la lámina de ${}^9\text{Be}$. El histograma rojo representa la interpolación realizada entre los valores experimentales (también representados). El histograma azul representa la producción simulada con GEANT4.

8.3.3.1. Comparación con datos experimentales

La Fig. 8.4 muestra la producción espectral a 0° , por unidad de ángulo sólido y de carga eléctrica del haz, en la lámina de ${}^9\text{Be}$ para el haz de protones a 18 MeV. Como puede observarse, existe una diferencia de aproximadamente un orden de magnitud entre los valores interpolados a partir de los resultados experimentales (incluidos en la gráfica) y la producción calculada con GEANT4. Concretamente, la producción integrada en energía de neutrones a 0° $\left. \frac{d^2Y_{(p,n)}}{d\Omega dQ} \right|_{0^\circ}$, estimada a partir de los datos experimentales es

$$\left. \frac{d^2Y_{(p,n)}}{d\Omega dQ} \right|_{0^\circ} = (1,1 \pm 0,1) \times 10^{16} \text{ sr}^{-1} \text{ C}^{-1}, \quad (8.1)$$

donde $Y_{(p,n)}$ representa la producción de neutrones mediante la irradiación con protones a 18 MeV, Ω es el ángulo sólido y Q es la carga en culombios de la corriente del haz. La incertidumbre asociada es del 10 %, que corresponde a la mayor incertidumbre estimada por Brede et al. en su trabajo. Por otra parte, con GEANT4 obtenemos el valor

$$\left. \frac{d^2Y_{(p,n),G4}}{d\Omega dQ} \right|_{0^\circ} = (1,65 \pm 0,01) \times 10^{15} \text{ sr}^{-1} \text{ C}^{-1}, \quad (8.2)$$

donde el subíndice “G4” se usa para indicar los resultados de la simulación. En esta ocasión, la incertidumbre representada es la asociada al error estadístico de recuento.

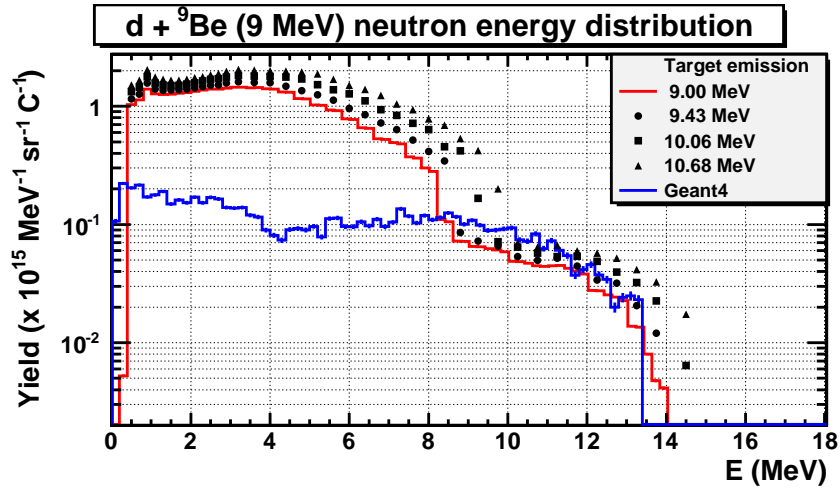


Figura 8.5: Distribución de energía de los neutrones emitidos a 0° debido a la incidencia del haz de deuterones a 9 MeV en la lámina de ^9Be . Los criterios de representación son los mismos que en la Fig. 8.4.

Un resultado parecido puede observarse en la Fig. 8.5, que muestra la producción espectral a 0° , por unidad de ángulo sólido y de carga, en la lámina de ^9Be cuando inciden deuterones a 9 MeV. En este caso vuelve a observarse que con GEANT4 se subestima en un orden de magnitud la producción de neutrones por debajo de los 8 MeV. Sin embargo, debe resaltarse que la simulación consigue reproducir satisfactoriamente los cálculos extrapolados para energías superiores a los 8 MeV. En esta ocasión, la producción integrada en energía, $\left. \frac{d^2 Y_{(d,n)}}{d\Omega dQ} \right|_{0^\circ}$, estimada a partir de los datos experimentales es

$$\left. \frac{d^2 Y_{(d,n)}}{d\Omega dQ} \right|_{0^\circ} = (8,4 \pm 0,8) \times 10^{15} \text{ sr}^{-1} \text{ C}^{-1}, \quad (8.3)$$

donde en este caso $Y_{(d,n)}$ representa la producción de neutrones por irradiación con deuterones a 9 MeV. La incertidumbre asociada también es del 10 %, de acuerdo con el caso anterior. Por su parte, el valor obtenido con GEANT4 es

$$\left. \frac{d^2 Y_{(d,n),G4}}{d\Omega dQ} \right|_{0^\circ} = (1,41 \pm 0,01) \times 10^{15} \text{ sr}^{-1} \text{ C}^{-1}. \quad (8.4)$$

Por lo tanto, se observa una subestimación por parte de GEANT4 de aproximadamente un orden de magnitud con respecto a los valores experimentales, que es consecuencia de que los modelos estadísticos implementados en GEANT4 son incapaces de describir adecuadamente los mecanismos de reacción relevantes en esta situación. Esto representa una limitación, que

en cualquier caso está presente en todos los códigos de transporte por métodos de Monte Carlo que existen en la actualidad cuando se trata de simular reacciones nucleares a muy bajas energías. En definitiva, estos resultados ilustran que, a estas energías, dichos mecanismos de reacción son fundamentales, lo cual era totalmente previsible de acuerdo con los estudios y cálculos de secciones eficaces desarrollados en las últimas décadas.

Por lo tanto, dado que los resultados de GEANT4 no reproducen satisfactoriamente los valores experimentales, la producción de neutrones en la lámina de ^9Be se realiza de acuerdo con las distribuciones de energía que hemos obtenido por interpolación (caso de protones a 18 MeV) o extrapolación lineal (deuterones a 9 MeV) a partir de los resultados experimentales mencionados (Brede et al., 1989).

En cuanto a la producción de gammas, usamos directamente los cálculos de GEANT4 al no existir datos experimentales en la literatura. Por consiguiente, insistimos que estos cálculos deben considerarse como estimativos.

8.3.3.2. Transmisión a través del tambor de refrigeración

Tal y como se expuso en la sección anterior, el cálculo de la transmisión de neutrones y gammas a través del tambor de refrigeración se realiza de manera independiente a la simulación de producción de secundarias en la lámina de ^9Be .

En esta segunda etapa de la simulación de la fuente de neutrones, usamos como partículas primarias en GEANT4 los neutrones y gammas producidos en la lámina de ^9Be que consiguen alcanzar el plano situado entre el tambor de refrigeración y dicha lámina. Sin embargo, de acuerdo con los resultados que acabamos de presentar, la simulación del transporte de los neutrones y de los gammas se lleva a cabo de manera asimétrica:

- Para el caso de **neutrones**, éstos se generan al comienzo del tambor de refrigeración con el espectro calculado a partir de los resultados experimentales (Brede et al., 1989). Para ello, el espectro interpolado (protones) o extrapolado (deuterones) se almacena en un archivo ASCII (*American Standard Code for Information Interchange*), el cual es leído por la clase *Primary Generator Action* de esta aplicación GEANT4.
- Para el caso de **gammas**, usamos los resultados de GEANT4 para la simulación de la primera etapa de esta fuente de neutrones (lámina de ^9Be). Tal y como se ha mencionado anteriormente, las partículas producidas en la lámina de berilio se almacenan en un archivo de espacio de fases *IAEAphsp* cuyo plano se ha definido en la frontera entre la lámina y el tambor de refrigeración.

En ambos casos, a la hora de estimar el factor de transmisión se entiende que una partícula es transmitida si atraviesa el tambor de refrigeración.

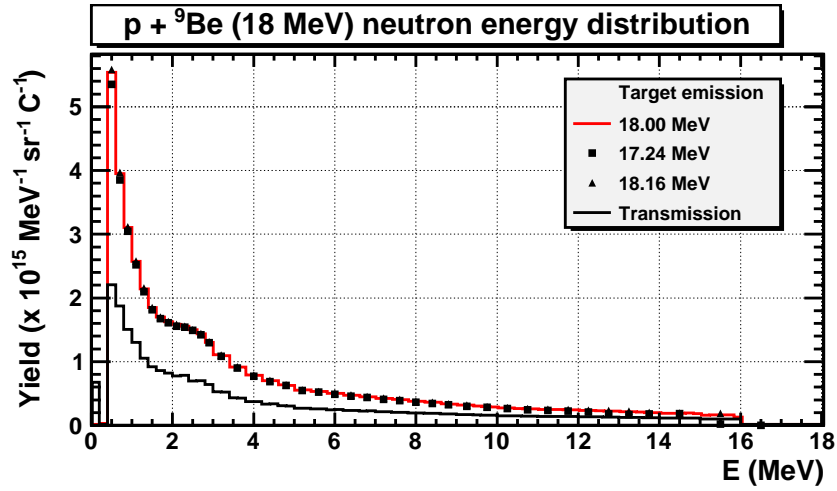


Figura 8.6: Espectro de energía de los neutrones emitidos a 0° con un haz de protones a 18 MeV sobre ${}^9\text{Be}$. El histograma rojo representa la interpolación realizada entre los valores experimentales (también representados). El histograma negro representa el espectro transmitido a través del tambor de refrigeración.

Haz de protones a 18 MeV

La Fig. 8.6 muestra la producción espectral a 0° de neutrones en el blanco de ${}^9\text{Be}$ con el haz de protones de 18 MeV (histograma rojo) junto con los datos experimentales. En la misma figura se muestra también la distribución espectral de los neutrones transmitidos a través del tambor según la simulación con GEANT4 (histograma negro). El factor global de transmisión para los neutrones (calculado de la manera anteriormente descrita), $T_{(p,n)}$, es

$$T_{(p,n)} = (50 \pm 1) \%, \quad (8.5)$$

por lo que, en virtud de (8.1), el flujo transmitido por unidad de carga y ángulo sólido es

$$\left. \frac{d^2 Y_{(p,n),\text{src}}}{d\Omega dQ} \right|_{0^\circ} = (5,5 \pm 0,6) \times 10^{15} \text{ sr}^{-1} \text{ C}^{-1}, \quad (8.6)$$

donde el subíndice “src” indica que nos referimos a la emisión de neutrones de la fuente incluyendo la absorción en el tambor de refrigeración.

La Fig. 8.7 presenta la emisión espectral a 0° de radiación gamma parásita considerando la incidencia de protones a 18 MeV sobre el blanco de berilio. En esta ocasión el espectro de emisión en el blanco (histograma rojo) se ha simulado con GEANT4, tal y como se expuso anteriormente. El espectro transmitido a través del tambor se representa en negro. En esta figura se puede observar que el coeficiente de transmisión, $T_{(p,\gamma)}$, aumenta con la energía del fotón, tal y como cabe esperar. Para el espectro presentado en

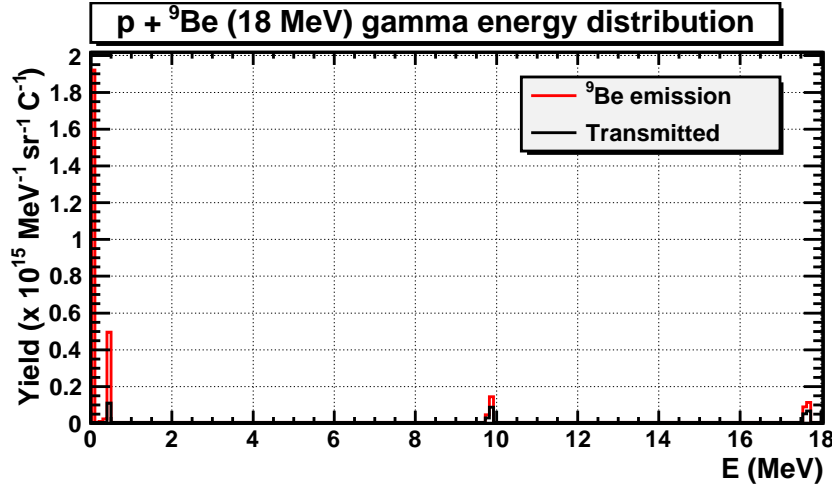


Figura 8.7: Espectro de energía de los gammas emitidos a 0° con un haz de protones a 18 MeV sobre ^9Be . El histograma rojo representa la producción calculada con GEANT4, mientras que el histograma negro representa el espectro transmitido a través del tambor de refrigeración.

esta gráfica, el valor promedio es $T_{(p,\gamma)} = (15 \pm 1) \%$. La producción de gammas calculada con GEANT4 en la lámina de berilio a 0° , por unidad de ángulo sólido y de carga, $\left. \frac{d^2Y_{(p,\gamma),G4}}{d\Omega dQ} \right|_{0^\circ}$, es

$$\left. \frac{d^2Y_{(p,\gamma),G4}}{d\Omega dQ} \right|_{0^\circ} = (2,87 \pm 0,03) \times 10^{14} \text{ sr}^{-1} \text{ C}^{-1}, \quad (8.7)$$

donde la incertidumbre se ha obtenido según la estadística de recuento. Con lo cual, el flujo de gammas transmitido a través del tambor es

$$\left. \frac{d^2Y_{(p,\gamma),src}}{d\Omega dQ} \right|_{0^\circ} = (4,4 \pm 0,3) \times 10^{13} \text{ sr}^{-1} \text{ C}^{-1}, \quad (8.8)$$

donde la incertidumbre corresponde a la propagación cuadrática de las incertidumbres asociadas al factor de transmisión y a la producción en el blanco.

Haz de deuterones a 9 MeV

La Fig. 8.8 muestra la producción espectral a 0° de neutrones en el blanco de ^9Be irradiado por deuterones a 9 MeV (histograma rojo) junto con los datos experimentales (Brede et al., 1989) usados para extrapolar nuestro espectro. Al igual que en el caso anterior, se representa también la distribución espectral de los neutrones transmitidos a través del tambor calculada con GEANT4 (histograma negro). El factor de transmisión calculado, $T_{(d,n)}$, es

$$T_{(d,n)} = (50 \pm 1) \%, \quad (8.9)$$

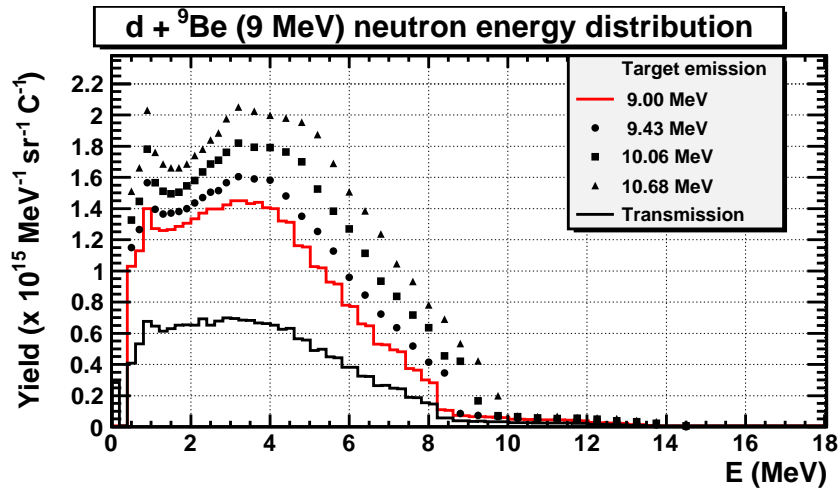


Figura 8.8: Espectro de energía de los neutrones emitidos a 0° con un haz de deuterones a 9 MeV sobre ^9Be . Se sigue el mismo criterio de representación que en la Fig. 8.6.

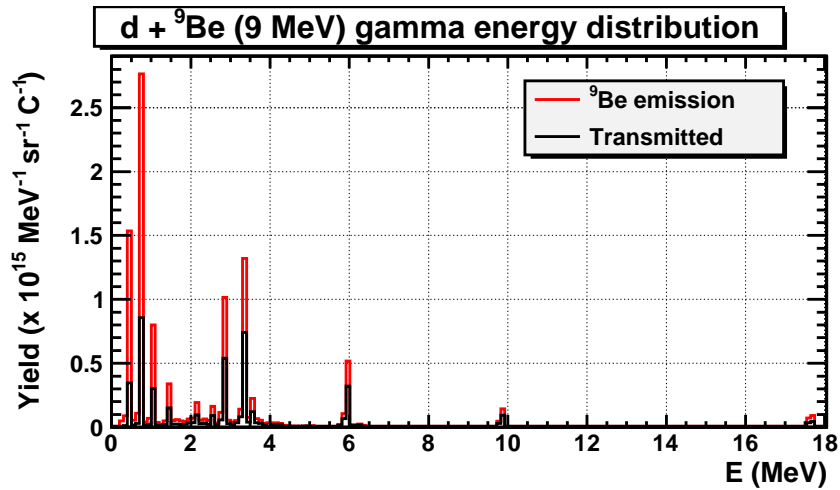


Figura 8.9: Espectro de energía de los gammas emitidos a 0° con un haz de protones a 18 MeV sobre ^9Be . Se sigue el mismo criterio de representación que en la Fig. 8.7.

resultado que cabía esperar debido a que la energía de los neutrones emitidos es similar a la del caso anterior. Por lo tanto, la producción integrada en energía, en virtud de (8.3), es

$$\left. \frac{d^2 Y_{(d,n),\text{src}}}{d\Omega dQ} \right|_{0^\circ} = (4,1 \pm 0,4) \times 10^{15} \text{ sr}^{-1} \text{ C}^{-1} . \quad (8.10)$$

Del mismo modo, en la Fig. 8.9 representamos la producción de fotones en la lámina de ^9Be irradiada con el mismo haz junto con el flujo transmitido a 0° . Para este caso, el valor calculado para la producción de fotones es

$$\left. \frac{d^2 Y_{(d,\gamma),\text{G4}}}{d\Omega dQ} \right|_{0^\circ} = (1,138 \pm 0,006) \times 10^{15} \text{ sr}^{-1} \text{ C}^{-1} . \quad (8.11)$$

En esta ocasión, el factor de transmisión, calculado a partir de los resultados mostrados en la Fig. 8.9, es $T_{(d,\gamma)} = (45 \pm 1) \%$. El resultado es mayor que el obtenido para protones debido a que la energía media de este espectro es mayor que la del anterior. Por lo tanto, la emisión de gammas a 0° desde la fuente para el caso de irradiación con deuterones es

$$\left. \frac{d^2 Y_{(d,\gamma),\text{src}}}{d\Omega dQ} \right|_{0^\circ} = (5,1 \pm 0,2) \times 10^{14} \text{ sr}^{-1} \text{ C}^{-1} . \quad (8.12)$$

8.3.3.3. Breve análisis de los resultados

Para analizar de manera resumida los resultados que acabamos de presentar, en la Tabla 8.2 mostramos la emisión de neutrones y fotones obtenida para cada caso junto con el cociente de neutrones sobre gammas, que nos indica la *calidad* de la fuente de neutrones para cada caso. En los resultados, resalta el elevado valor obtenido para el cociente de emisión de neutrones sobre gammas en el caso de protones a 18 MeV.

Tipo de haz	$\left. \frac{d^2 Y_{(n),\text{src}}}{d\Omega dQ} \right _{0^\circ}$	$\left. \frac{d^2 Y_{(\gamma),\text{src}}}{d\Omega dQ} \right _{0^\circ}$	n/γ
p, 18 MeV	$(5,5 \pm 0,6) \times 10^{15}$	$(4,4 \pm 0,3) \times 10^{13}$	$(1,2 \pm 0,2) \times 10^2$
d, 9 MeV	$(4,1 \pm 0,4) \times 10^{15}$	$(5,1 \pm 0,2) \times 10^{14}$	$(8,0 \pm 0,8)$

Tabla 8.2: Producción de neutrones y gammas por unidad de ángulo sólido y de carga incidente en la lámina de berilio, junto con su cociente, para los dos casos estudiados.

Investigando los espectros de las Figs. 8.7 y 8.9 podemos observar, especialmente en la primera, dos picos cuyas energías son 9,8 MeV y 17,6 MeV, las cuales se encuentran por encima de la energía de ligadura por nucleón del núcleo compuesto formado en la reacción (^{10}B para el caso

de protones y ^{11}B para de deuterones). Por esta razón, junto con el hecho de que en ambos casos la energía de sendos picos sea la misma, hemos deducido que dichos picos deben ser espúreos. En efecto, investigando en detalle el mecanismo de esa reacción durante la simulación hemos descubierto que estas emisiones de gammas eran producidas por GEANT4 a partir de la reacción inelástica $n+^9\text{Be}$ que se produce dentro de la propia lámina de berilio. Esta reacción, simulada por la clase *G4NeutronHPInelastic*, no está implementada adecuadamente en la versión usada para este trabajo (9.3.p01). Este error ha sido discutido con la persona responsable dentro de la colaboración GEANT4, que se encargará de arreglarlo para la próxima versión.^k

En cualquier caso, la contribución relativa de estas emisiones espúreas es más significativa en términos relativos para el espectro producido en el caso de protones (Fig. 8.7) que para el producido por deuterones (Fig. 8.9). Por lo tanto, aun siendo conscientes de que estos cálculos deben ser respaldados por medidas experimentales, parece lógico esperar que la calidad de esta fuente de neutrones sea mayor con el haz de protones a 18 MeV que con el haz de deuterones a 9 MeV.

8.4. Aplicaciones GEANT4 para microdosimetría

8.4.1. Diseño y lista de física

En esta sección describimos las dos aplicaciones desarrolladas con el código GEANT4 para realizar análisis de microdosimetría en circuitos integrados. El objetivo de la primera aplicación, denominada “**ff**” (de las siglas de biestable en inglés, *flip-flop*), es estudiar la energía depositada por unidad de volumen y evento en toda la estructura de un circuito biestable bajo la irradiación de distintos haces producidos en el CNA. La segunda aplicación que se describe se denomina “**track analyser**” y su cometido es doble: por un lado, calcular la energía depositada por partículas cargadas en una geometría de capas por unidad de longitud, a semejanza del código SRIM;^l por otro lado, estimar la dosis en función de la distancia radial a la posición de la partícula incidente para una determinada situación de energía cinética del proyectil y material del blanco.

Ambas aplicaciones han sido diseñadas para realizar el seguimiento de todas las partículas hasta energías cinéticas muy bajas, lo cual es necesario debido a la escala nanométrica de algunos componentes del biestable. Por lo tanto, hemos utilizado la *lista de física* que ya ha sido discutida anteriormente (sección 8.3.2.3), aplicando un corte de producción de secundarias de 500 nm de manera que podamos realizar el seguimiento en silicio de todos los

^kTatsumi Koi (SLAC), comunicación privada

^lSRIM está disponible en <http://www.srim.org>.

electrones secundarios cuya energía cinética inicial sea superior a 250 eV. Añadimos a la descripción de lista de física referida que, para el transporte de partículas cargadas pesadas, hemos usado el modelo considerado por defecto en el paquete *Standard-EM* (Burkhardt et al., 2005), que implementa el modelo de aproximación de carga efectiva desarrollado por Ziegler et al. (1985).

8.4.2. Aplicación “ff”

La geometría incluye el modelo geométrico del biestable importado desde FASTRAD mediante el esquema GDML, tal y como se ha descrito en la sección 8.2.

En cuanto a la simulación del haz incidente, en este trabajo hemos considerado sólo irradiación uniforme sobre el biestable debido a las reducidas dimensiones del circuito ($55,5 \times 24,0 \times 18,0 \mu\text{m}^3$) y a la distancia a la fuente (1 m), que determinan el ya mencionado ángulo sólido extremadamente pequeño ($\sim 10^{-9}$ sr). Por lo tanto, las partículas primarias son generadas en un punto aleatorio perteneciente a un plano situado $10 \mu\text{m}$ por encima de la superficie del biestable, orientado paralelamente a dicha superficie. Asimismo, no se considera apertura de haz en estas simulaciones, por lo que la incidencia de las partículas sobre el circuito es perpendicular. No obstante, esta aplicación incluye comandos para cambiar parámetros del haz mediante un archivo *macro*, como pueden ser: tipo de partícula, espectro de energía, distribución espacial y apertura del haz.

Los *volúmenes sensibles* de la simulación pueden registrarse igualmente a partir de comandos definidos en un archivo *macro*. A cada uno de estos volúmenes se le asigna un detector multi-funcional que se encarga de realizar el recuento correspondiente. En este caso, hemos calculado la energía depositada por unidad de volumen en el canal, drenador, fuente y óxido de puerta de cada transistor del biestable.

8.4.3. Aplicación “track analyser”

Esta aplicación GEANT4 proporciona dos diferentes opciones en función de los cálculos que se pretendan realizar:

1. **Modo LET:** su objetivo es calcular la energía depositada, por unidad de longitud, por partículas cargadas que cruzan una geometría compuesta por capas. En esta aplicación, las partículas primarias se crean en el centro del plano frontal de la primera capa y con incidencia normal. Cada capa constituida en la geometría se divide en sub-capas de $0,5 \mu\text{m}$ de espesor para definir los volúmenes sensibles. En otras palabras, se calcula la energía depositada en función de la profundidad en pasos de $0,5 \mu\text{m}$. No obstante, este valor puede ser cambiado si el

cálculo lo requiere. En cualquier caso, las dimensiones transversales se establecen lo suficientemente grandes como para evitar que cualquier partícula cruce los límites laterales de la geometría.

2. **Modo de dosis radial:** su objetivo es realizar la estimación de la energía depositada por unidad de volumen (relacionada con la dosis por medio de la densidad del material) en función de la distancia radial al eje de propagación de la partícula incidente. La geometría presenta una configuración similar a la descrita por Kobayashi et al. (2004), que a su vez se basa en el montaje experimental diseñado por Howard et al. (1994). En el trabajo que aquí se presenta, el sistema detector completo consiste en un cilindro macizo con un radio exterior de $1 \mu\text{m}$ y altura de $0,1 \mu\text{m}$. Los volúmenes sensibles se colocan dentro de este cilindro emulando la estructura de una diana u “ojo de buey” que está compuesta por cortezas cilíndricas anulares de 10 nm de espesor, constituyendo cada una de ellas un *bin* anular. Por lo tanto, con el primer *bin* calculamos la energía depositada para radios menores de 10 nm , con el segundo se registra la energía para radios entre 10 nm y 20 nm , y así sucesivamente hasta $1 \mu\text{m}$. Las partículas primarias se generan en el centro de la cara frontal de esta estructura de “ojo de buey” con incidencia perpendicular. El hecho de que la partícula atraviese sólo $0,1 \mu\text{m}$ de material sirve para que podamos despreciar fenómenos de dispersión lateral en el recorrido de la partícula cargada cuando su rango esperado en dicho material sea mayor de $2 \mu\text{m}$, aproximadamente. En esta opción, el tipo de partícula incidente, la energía cinética y el material del cilindro pueden cambiarse mediante comandos ejecutados desde un archivo macro.

Debemos destacar que la dosis radial que se calcula con la opción 2 de esta aplicación está relacionada con la contribución electrónica a la transferencia lineal de energía, *LET*, calculada con la opción 1, por medio de su definición (Cucinotta et al., 1998),

$$LET(d)_{\text{electronic}} = 2\pi \int_0^R dr r \rho D(r, d), \quad (8.13)$$

donde d es la profundidad a la que se calcula la contribución electrónica al *LET* en la geometría de capas, R es el máximo alcance de los electrones secundarios producidos por la partícula cargada pesada a su paso, r es la coordenada radial, ρ la densidad del material y $D(r, d)$ es la dosis a una distancia r para la profundidad a la que se estudia el fenómeno, d .

La fórmula (8.13) supone que la dosis presenta simetría radial con respecto al eje de propagación, lo cual se consigue en valor medio tras calcular un número suficiente de eventos en las mismas condiciones (generalmente

100). Evidentemente, la transferencia de energía debido a interacciones nucleares no está incluida en la definición (8.13).

Asimismo, hay que resaltar que en los casos en los que el alcance de los electrones secundarios sea mucho menor que la precisión con la que se calcula la deposición lineal de energía en la opción 1 de esta aplicación, entonces la contribución electrónica de la energía depositada es igual al *LET* electrónico.

8.5. Resultados

En esta sección se presentan los resultados obtenidos para la irradiación del biestable por diversas fuentes de radiación. Comenzamos con un experimento virtual con la fuente de neutrones, cuya contribución gamma se compara con otra simulación en la que se reproduce la irradiación del circuito mediante una fuente de ^{60}Co . Posteriormente, se estudia la energía depositada en los diferentes transistores en el caso de irradiación con los haces de protones y deuterones producidos por el ciclotrón IBA, para finalmente concluir con los experimentos de irradiación en la línea de microsonda del acelerador tándem de 3 MV del CNA.

8.5.1. Irradiación del biestable con la fuente de neutrones

Anteriormente, en la sección 8.3 han sido presentados los resultados obtenidos para la producción de neutrones y gammas en la nueva fuente de neutrones del CNA. Se considera la emisión a 0° con respecto al haz, lo cual se justifica por el hecho de que el biestable se colocará en esta dirección y lo suficientemente lejos de la fuente para que su ángulo subtendido sea tan pequeño como para considerar únicamente las partículas emitidas a 0° . Los resultados que se muestran a continuación suponen que el biestable se coloca a 1 m de distancia de la fuente, por lo que el ángulo sólido subtendido es $\Omega_{\text{ff}} = 1,33 \times 10^9$ sr.

Entonces, hemos simulado con GEANT4 la irradiación uniforme del biestable por neutrones y fotones cuyo espectro energético obedece a los mostrados en las Figs. 8.6-8.9. En este punto, se debe aclarar que los resultados que proporcionan las simulaciones están normalizados al número de eventos simulados. En este caso un *evento* representa una partícula incidiendo sobre cualquier parte del biestable. Sin embargo, dado que se simula la energía depositada por neutrones y fotones de manera separada, es necesario traducir estos resultados a un observable experimental. Para ello, hemos calculado la *tasa* de energía depositada por unidad de volumen, $d\dot{E}_{\text{dep}}/dV$, a partir de la energía depositada por evento. Ambas magnitudes están relacionadas por la expresión

$$\frac{d\dot{E}_{\text{dep}}}{dV} = \frac{E_{\text{dep}}}{V N_{\text{ev}}} \left. \frac{d^2 Y_{\text{src}}}{d\Omega dQ} \right|_{0^\circ} \Omega_{\text{ff}} I, \quad (8.14)$$

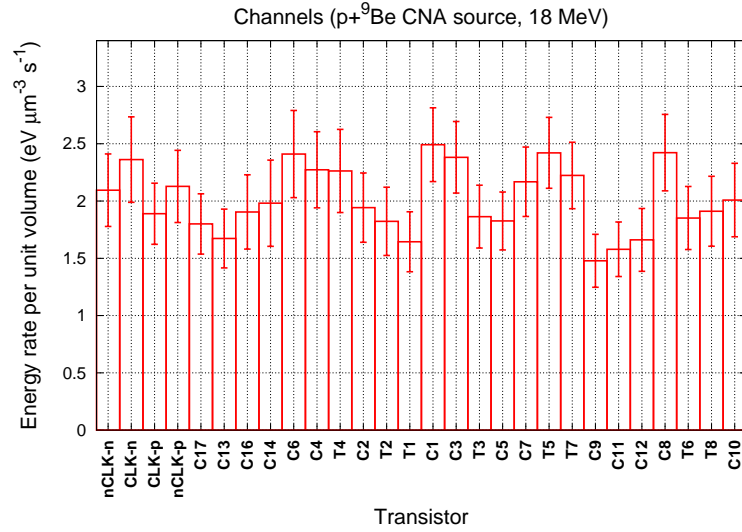


Figura 8.10: Tasa de energía depositada por unidad de volumen en el canal de cada transistor del biestable por neutrones emitidos desde la fuente de ${}^9\text{Be}$, irradiada por el haz de protones a 18 MeV (intensidad de haz de $100 \mu\text{A}$). El código que identifica a cada transistor se muestra en abscisas. El tipo de transistor, NMOS (-n) o PMOS (-p) se especifica en caso de ambigüedad.

donde E_{dep} es la energía depositada en un volumen V durante la simulación de N_{ev} eventos, Y_{src} es la producción de neutrones o fotones por la fuente, I es la intensidad de corriente del haz de salida del ciclotrón y Ω_{ff} es el ángulo sólido subtendido.

Por un lado, se ha calculado la energía depositada por los neutrones en el canal de cada transistor, ya que ésta es la parte más vulnerable a daños por NIEL. Por otro lado, la energía depositada por los fotones se calcula en los óxidos de puerta de cada transistor, que son susceptibles a daños provocados por TID. Además, se ha evaluado la dosis media en los óxidos de campo en todos los casos para comparar globalmente la contribución de neutrones y fotones a la energía depositada.

En adelante, a menos que se indique lo contrario, los resultados que se presentan han sido obtenidos considerando 3×10^9 eventos.

8.5.1.1. Haz de protones a 18 MeV

La Fig. 8.10 muestra la tasa de energía depositada por unidad de volumen en el canal de cada transistor por los neutrones producidos por la fuente de ${}^9\text{Be}$ en el caso del haz de protones a 18 MeV. Para presentar los resultados por unidad de tiempo se ha supuesto una intensidad de haz de $100 \mu\text{A}$. En la gráfica, las barras de error indican la incertidumbre estadística de los cálculos (1σ), estimada por el método desarrollado por Walters et al. (2002). En esta figura, el valor medio de las incertidumbres es del 15 %.

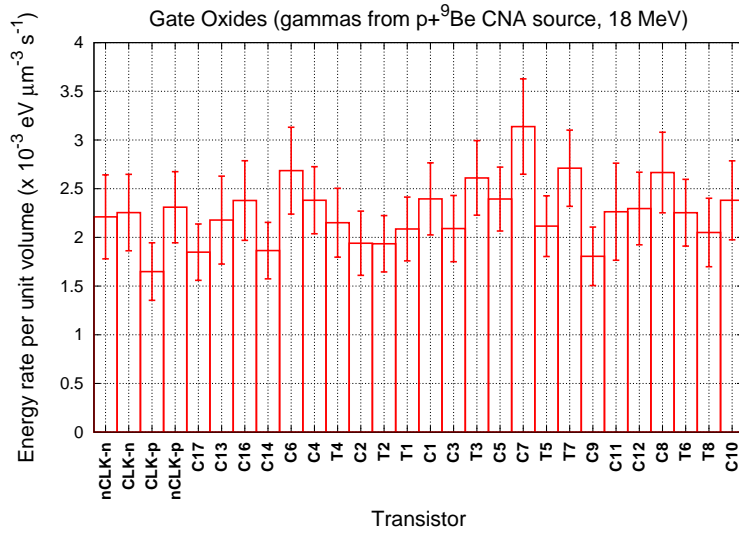


Figura 8.11: tasa de energía depositada por unidad de volumen en el óxido de puerta de cada transistor del biestable por la contribución gamma parásita de la fuente de ${}^9\text{Be}$, irradiada por el haz de protones a 18 MeV (intensidad de haz de $100 \mu\text{A}$). Se sigue la misma representación que en la Fig. 8.10.

Por otra parte, en la Fig. 8.11 se presenta la tasa de energía depositada por unidad de volumen en el óxido de puerta de cada transistor por la contribución parásita de gammas producida en la fuente de ${}^9\text{Be}$ para el mismo caso anterior. En este caso, la incertidumbre estadística está comprendida entre el 13 % y el 22 %. Puede apreciarse que la tasa de energía depositada debido a gammas es tres órdenes de magnitud menor que la tasa de energía depositada por neutrones.

Finalmente, también hemos calculado la tasa de dosis media en los óxidos de campo, \dot{D}_{fo} . El valor obtenido para la dosis debida a la incidencia de neutrones es

$$\dot{D}_{\text{fo,(p,n)}} = (1,7 \pm 0,2) \times 10^{-4} \text{ Gy/s} , \quad (8.15)$$

mientras que la dosis debida a la contribución parásita de gammas es

$$\dot{D}_{\text{fo,(p,\gamma)}} = (1,4 \pm 0,1) \times 10^{-7} \text{ Gy/s} . \quad (8.16)$$

8.5.1.2. Haz de deuterones a 9 MeV

En la Fig. 8.12 se presentan los cálculos correspondientes a la tasa de energía por unidad de volumen en condiciones análogas al caso anterior, pero considerando un haz de deuterones a 9 MeV e intensidad de corriente de $40 \mu\text{A}$. El nivel estadístico de los resultados es similar al caso estudiado para protones (15 %, 1σ). Además, se puede observar que los valores son comparables a los obtenidos para protones si tenemos en cuenta que en el caso anterior la intensidad de corriente era mayor ($100 \mu\text{A}$).

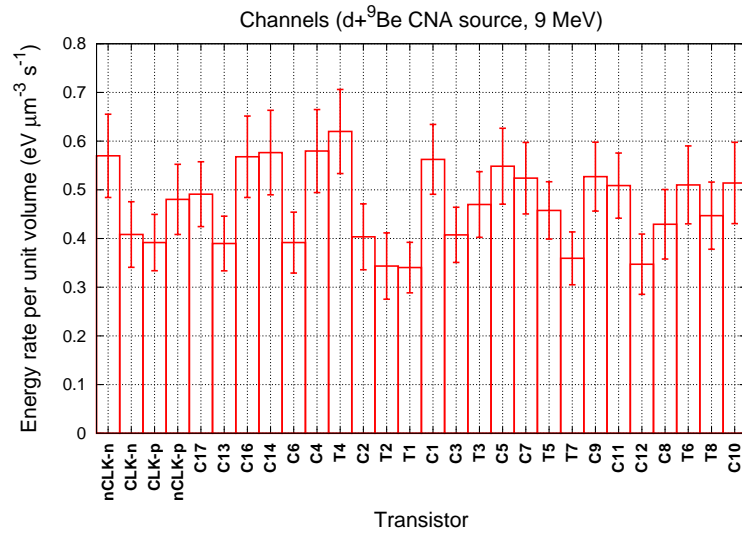


Figura 8.12: Resultados análogos a los presentados en la Fig. 8.10 obtenidos con el haz de deuterones a 9 MeV ($40 \mu\text{A}$).

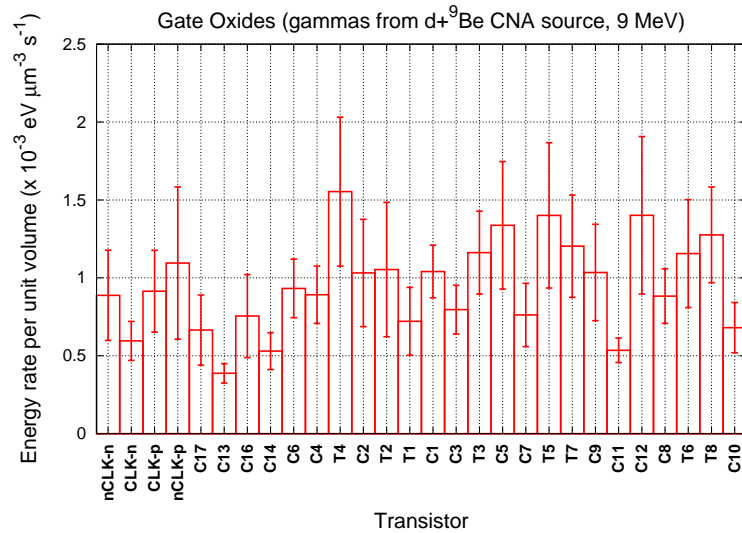


Figura 8.13: Resultados análogos a los presentados en la Fig. 8.11 obtenidos con el haz de deuterones a 9 MeV ($40 \mu\text{A}$).

Por otra parte, en la Fig. 8.13 mostramos los resultados correspondientes a la contribución parásita de gammas obtenida para el haz de deuterones a 9 MeV. En esta ocasión la incertidumbre estadística está evaluada entre un 14 % y un 40 %. Nuevamente, podemos observar que la tasa de energía depositada por los gammas es tres órdenes de magnitud inferior a la depositada por neutrones.

Por último, presentamos los valores calculados para la tasa de dosis promediada en los óxidos de campo. Para este caso, la contribución correspondiente a los neutrones es

$$\dot{D}_{\text{fo,(d,n)}} = (4,2 \pm 0,4) \times 10^{-5} \text{ Gy/s} , \quad (8.17)$$

mientras que el cálculo para la contribución parásita de gammas arroja el resultado

$$\dot{D}_{\text{fo,(d,\gamma)}} = (6,0 \pm 0,2) \times 10^{-8} \text{ Gy/s} . \quad (8.18)$$

8.5.1.3. Análisis conjunto de ambos casos

Finalmente, comparamos los resultados de la sección anterior para confirmar si, desde la perspectiva de irradiación en el biestable, la fuente de neutrones es más limpia cuando se usa el haz de 18 MeV. Para ello, comparamos las contribuciones asociadas a neutrones y gammas en la tasa de dosis calculada (en promedio) para los óxidos de campo del transistor.

Tipo de haz	$\dot{D}_{\text{fo,(,n)}} \text{ (Gy/s)}$	$\dot{D}_{\text{fo,(,\gamma)}} \text{ (Gy/s)}$	$\dot{D}_{\text{fo,(,n)}}/\dot{D}_{\text{fo,(,\gamma)}}$
p, 18 MeV	$(1,7 \pm 0,2) \times 10^{-4}$	$(1,4 \pm 0,1) \times 10^{-7}$	$(1,2 \pm 0,2) \times 10^3$
d, 9 MeV	$(4,2 \pm 0,4) \times 10^{-5}$	$(6,0 \pm 0,2) \times 10^{-8}$	$(7,0 \pm 0,7) \times 10^2$

Tabla 8.3: Valor medio de la tasa de dosis calculada en los óxidos de campo del biestable, diferenciada entre neutrones y gammas. En la columna de la derecha se muestra el cociente obtenido para cada haz.

En la Tabla 8.3 mostramos los resultados (8.15)-(8.18) junto con el cociente obtenido entre ambos valores para cada caso analizado. En ella, se puede comprobar que dicho cociente es más alto para protones que para deuterones. Por lo tanto, a raíz de estos resultados se puede afirmar que la contribución parásita de gammas, en términos relativos, es más significativa en el caso de deuterones a 9 MeV que en el caso de protones a 18 MeV.

8.5.1.4. Comparativa con una fuente de ^{60}Co

Con el propósito de evaluar la energía depositada por parte de la emisión parásita de gammas en la fuente de berilio, en este apartado se presentan los cálculos realizados considerando un montaje experimental en

el que el biestable es irradiado con una fuente de ^{60}Co . Para ello, hemos modificado la clase *Primary Generator Action* de la aplicación “ff” presentada anteriormente para que reproduzca las líneas del espectro de emisión del ^{60}Co , que corresponden a las energías 1,173 MeV (intensidad de emisión de 99,974 %) y 1,332 MeV (intensidad de emisión de 99,986 %).

Para este trabajo se han reproducido las condiciones de emisión del modelo de irradiador 484C suministrado por J. L. Shepherd & Assoc.^m En dicho irradiador, la tasa de dosis suministrada está comprendida entre 0,001 rad(Si)/s y 500 rad(Si)/s gracias al uso de una fuente de ^{60}Co de 12 000 Ci.ⁿ Además, este irradiador puede producir un campo uniforme de hasta $30 \times 30 \text{ cm}^2$.

Al igual que en los casos anteriores, consideraremos que el biestable está colocado a 1 m de la fuente. Entonces, debido al extremadamente pequeño ángulo sólido subtendido por el biestable a esa distancia, la probabilidad de que ocurra un evento con dos gammas en coincidencia en el biestable es despreciable; por lo tanto, en la simulación se considera para cada evento la incidencia de un único gamma, cuya energía se obtiene, obviamente, por sorteo a partir de la intensidad de ambas líneas. Además, la incidencia de los gammas se considera perpendicular, dada la uniformidad del campo de radiación generado por el irradiador y la distancia entre la fuente y el biestable.

Los cálculos de tasa de energía depositada por unidad de volumen en el óxido de puerta de cada transistor se representan en la Fig. 8.14, considerando una tasa de dosis experimental de 1 rad(Si)/s. Las barras de error de la figura representan 1σ de las incertidumbres estadísticas, cuyos valores oscilan entre 17 % y 45 %. Para completar la comparativa con los casos anteriores, también se ha calculado la tasa de dosis media recibida por los óxidos de campo, $D_{\text{fo,Co-60}}$, obteniendo el resultado

$$D_{\text{fo,Co-60}} = (8,1 \pm 0,2) \times 10^{-3} \text{ Gy/s} , \quad (8.19)$$

que es 4-5 órdenes de magnitud mayor que la tasa de dosis calculada para los gammas emitidos por la fuente de berilio. Por lo tanto, un experimento de baja tasa de dosis con una fuente de ^{60}Co es el mejor escenario para realizar una comparativa con un experimento con la fuente de ^9Be .

8.5.2. Irradiación con partículas cargadas pesadas

En esta sección presentamos los casos en los que el circuito biestable es irradiado uniformemente en toda su superficie por un haz de partículas cargadas. Comenzamos mostrando los resultados que se obtienen considerando

^mPágina web: <http://www.jlshepherd.com>.

ⁿPara aclarar la notación usada, 1 rad(Si) especifica que la dosis se calcula para un volumen de silicio.

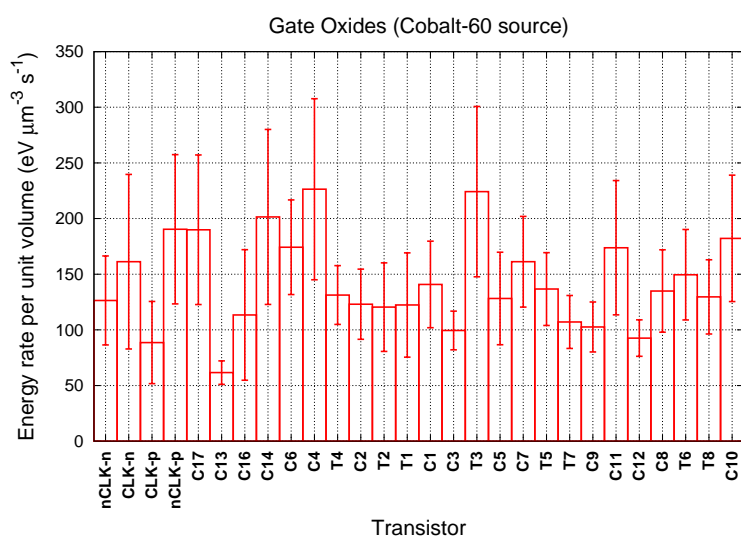


Figura 8.14: Tasa de energía depositada por unidad de volumen por los gammas emitidos desde una fuente de ^{60}Co en el óxido de puerta de cada transistor. Se ha considerado una tasa de dosis experimental de 1 rad(Si)/s. Se sigue el mismo convenio que en la Fig. 8.10.

la irradiación por haces de partículas pesadas que pueden obtenerse en las instalaciones del CNA. Posteriormente, se muestran los cálculos realizados con GEANT4 para analizar la forma en que se deposita la energía a escala nanométrica.

8.5.2.1. Cálculos de energía depositada en los elementos del biestable

Usando la aplicación “ff” anteriormente explicada, estimamos la energía depositada por unidad de volumen en los volúmenes sensibles de cada transistor: drenador, fuente, canal y óxidos de puerta. Consideramos los siguientes experimentos de radiación, reproducibles en el CNA: protones (18 MeV) y deuterones (9 MeV) a la salida del ciclotrón IBA; partículas alfa (9 MeV) e iones de carbono (15 MeV) y oxígeno (18 MeV) en la línea de microsonda del acelerador tándem de 3 MV del CNA. En todos los casos el tamaño del haz es mayor que el tamaño del biestable,^ñ por lo que estas simulaciones también se realizan en condiciones de irradiación uniforme y sin apertura de haz. Asimismo, dado que estas simulaciones son previas a los experimentos, consideramos que todas las partículas inciden con la energía nominal del haz en el biestable (espectro monoenergético). Por último, destacamos que estos resultados se presentan normalizados al número de

^ñEl tamaño del haz de la microsonda irradia el área equivalente a dos biestables aproximadamente.

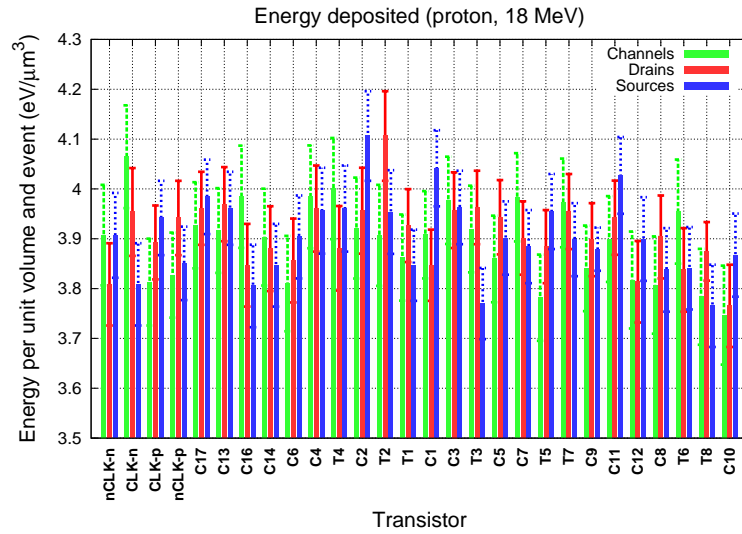


Figura 8.15: Energía depositada por unidad de volumen (normalizada al número de eventos) en los volúmenes sensibles del biestable por protones incidentes a 18 MeV. En verde se representa la energía depositada en los canales, en rojo la energía depositada en los drenadores y en azul la energía depositada en las fuentes de cada transistor.

eventos en todo el biestable. En el caso de un experimento real, además de considerar la dispersión en energía del haz emergente del acelerador, hay que multiplicar estos resultados por la eficiencia geométrica y la intensidad del haz para estimar la energía depositada por unidad de tiempo. Para todas las simulaciones hemos considerado un total de 10^6 eventos.

Para los haces producidos en el ciclotrón IBA, los cálculos obtenidos por simulación con GEANT4 en el caso de protones a 18 MeV se presentan en la Fig. 8.15, mientras que en la Fig. 8.16 se muestran los de deuterones a 9 MeV. En cuanto a los haces producidos en el tándem, en la Fig. 8.17 están representados los cálculos obtenidos con el haz de alfas a 9 MeV, en la Fig. 8.18 los de iones de carbono a 15 MeV (estado de carga 4+) y en la Fig. 8.19 los correspondientes a iones de oxígeno a 18 MeV (estado de carga 5+). En general, en estas figuras se puede observar que la energía depositada aumenta con la carga y masa de la partícula incidente. Sin embargo, hay que recordar que la energía de cada haz es distinta y que tampoco son iguales las energías por nucleón. Una comparación más detallada en este sentido se realiza más adelante en esta misma sección (Fig. 8.21). Las barras de error indican, nuevamente, la incertidumbre estadística a nivel de 1σ . Para protones (caso de menor deposición de energía) la incertidumbre en los cálculos es del 2,5 %, mientras que para iones de oxígeno (mayor deposición de energía) es menor del 2 %.

La energía depositada por unidad de volumen en los elementos del biestable depende, en fuerte medida, de la configuración geométrica de las

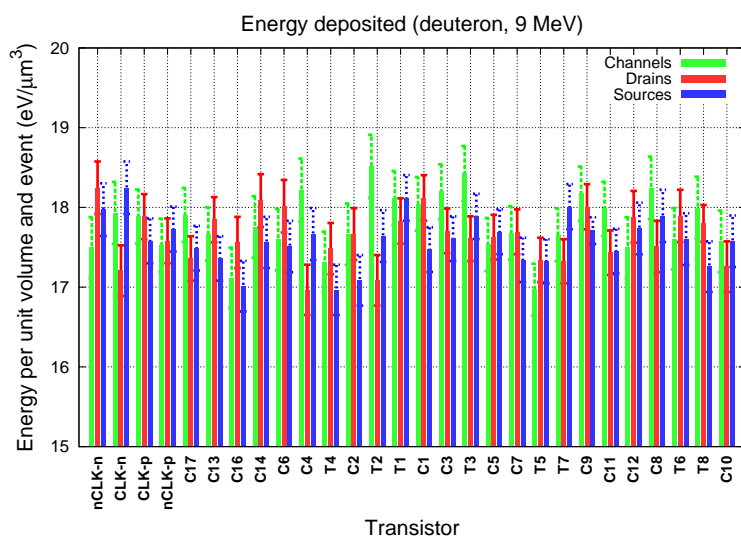


Figura 8.16: Energía depositada por unidad de volumen (normalizada al número de eventos) en los volúmenes sensibles del biestable por deuterones incidentes a 9 MeV. La representación sigue el mismo convenio que en la Fig. 8.15.

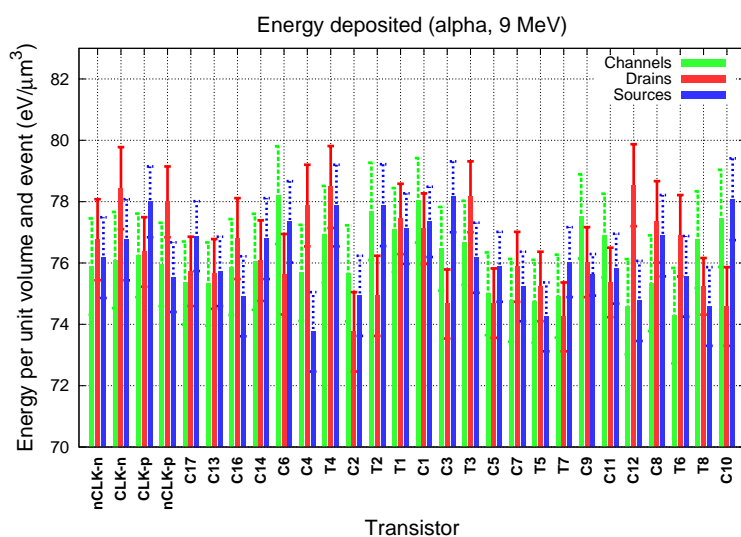


Figura 8.17: Energía depositada por unidad de volumen (normalizada al número de eventos) en los volúmenes sensibles del biestable por alfas incidentes a 9 MeV. La representación sigue el mismo convenio que en la Fig. 8.15.

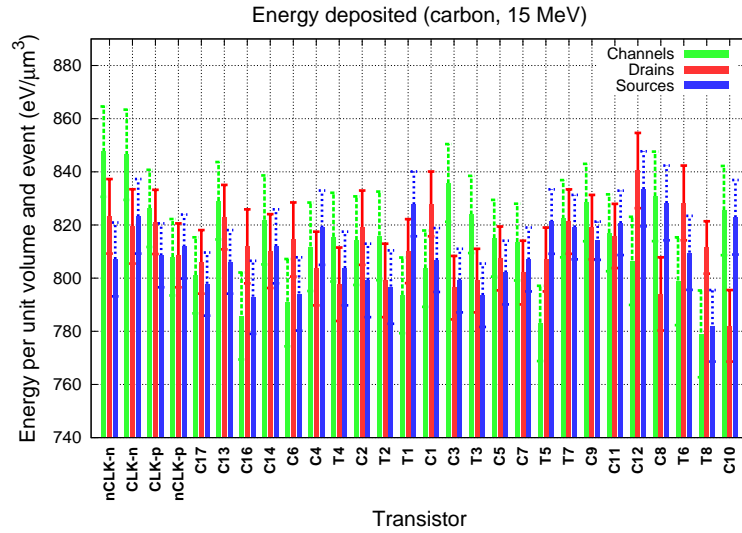


Figura 8.18: Energía depositada por unidad de volumen (normalizada al número de eventos) en los volúmenes sensibles del biestable por iones de carbono incidentes a 15 MeV. La representación sigue el mismo convenio que en la Fig. 8.15.

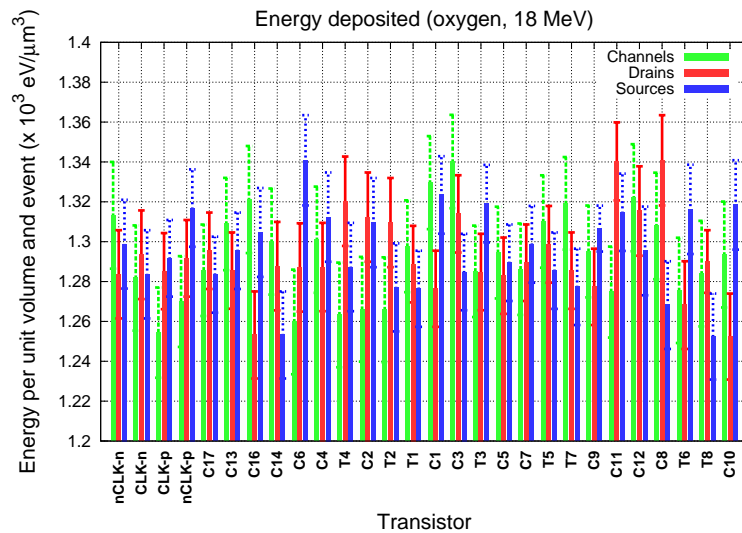


Figura 8.19: Energía depositada por unidad de volumen (normalizada al número de eventos) en los volúmenes sensibles del biestable por iones de oxígeno incidentes a 18 MeV. La representación sigue el mismo convenio que en la Fig. 8.15.

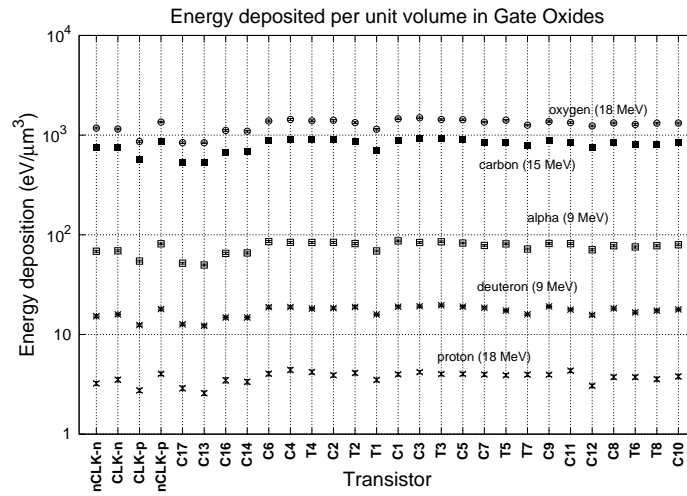


Figura 8.20: Energía depositada por unidad de volumen y normalizada al número de eventos en los óxidos de puerta del biestable para los haces indicados. En todos los casos el tamaño de los símbolos es mayor que las barras de error.

capas de aluminio colocadas por encima de los transistores (véase Fig. 8.2). Con lo cual, las partículas pesadas llegan a la zona sensible del circuito con una energía cinética que depende del espesor de metal que hayan atravesado en su camino. De cualquier modo, a tenor de los resultados presentados en las Figs. 8.15-8.19, las mayores diferencias observadas están en torno al 7% (nivel 3σ , aproximadamente). Por lo tanto, la presencia de las capas de aluminio no influye significativamente en la energía depositada en la zona sensible del biestable.

Los resultados obtenidos para la energía depositada en los óxidos de puerta se muestran en la Fig. 8.20 para todos los haces presentados en las figuras anteriores. La representación se realiza en escala logarítmica debido a la diferencia de más de dos órdenes de magnitud entre los casos extremos. En esta figura sí se puede observar una tendencia significativa en la energía depositada en cada óxido de puerta. Dado que éstos están todos colocados a la misma profundidad en el biestable, las diferencias observadas deben ser causadas por los diferentes espesores de aluminio que hay por encima de cada transistor. Sin embargo, se debe indicar que bajo cada óxido de puerta hay un canal de transistor y para éstos últimos no se ha observado un patrón tan claro como en el caso de los óxidos de puerta. En la discusión de los resultados (Sección 8.6) trataremos de explicar esta aparente contradicción.

Para ilustrar, la Fig. 8.21 presenta la deposición de energía por unidad de volumen en el drenador del transistor “C4”, que es también la fuente del transistor “T4” (véase Fig. 8.1). Como cabía esperar, la energía mínima necesaria para irradiar este volumen aumenta con la Z del ion incidente. Asimismo, la energía a la que se alcanza el máximo de energía depositada

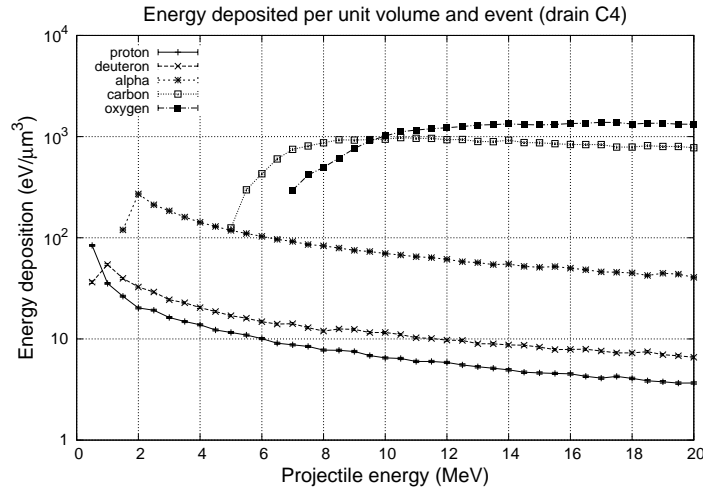


Figura 8.21: Energía depositada por unidad de volumen y normalizada al número de eventos en el drenador del transistor “C4” para los haces indicados en función de la energía del proyectil.

aumenta con la masa y la Z del proyectil.

8.5.2.2. Análisis de la traza de iones en silicio.

Seguidamente presentamos los resultados obtenidos con la aplicación “track analyser” anteriormente presentada. El objetivo de estos cálculos es estimar con GEANT4 la distribución de energía depositada en una geometría de capas tanto en función de la profundidad como en función de la distancia al eje de propagación de la partícula.

En la Fig. 8.22 mostramos el cálculo de energía depositada por unidad de longitud, realizado con el modo LET de la aplicación “track analyser”, para oxígenos que entran a 18 MeV en una geometría de capas compuesta por $4 \mu\text{m}$ de SiO_2 y $12 \mu\text{m}$ de Si. Los valores representan el promedio obtenido simulando 10^3 partículas incidentes. En la misma figura comparamos estos resultados con los de SRIM-2008.04. Puede observarse que el acuerdo entre ambas curvas está dentro de un 10 %.

El modelo de pérdida de energía utilizado por GEANT4 para partículas cargadas pesadas^o es el modelo de Bethe-Bloch cuando la energía cinética es superior a 2 MeV/A. Si es menor de dicho valor entonces se considera el modelo de Bragg, utilizando las parametrizaciones compiladas en el informe ICRU49 (Allisy et al., 1993). Estos modelos se aplican usando la aproximación desarrollada por Ziegler et al. (1985), tal y como se

^oUna descripción detallada aparece en el manual de referencia de la física implementada en GEANT4 (cap. 9, *Charged Hadron Incident*), disponible en <http://geant4.cern.ch/support/userdocuments.shtml>.

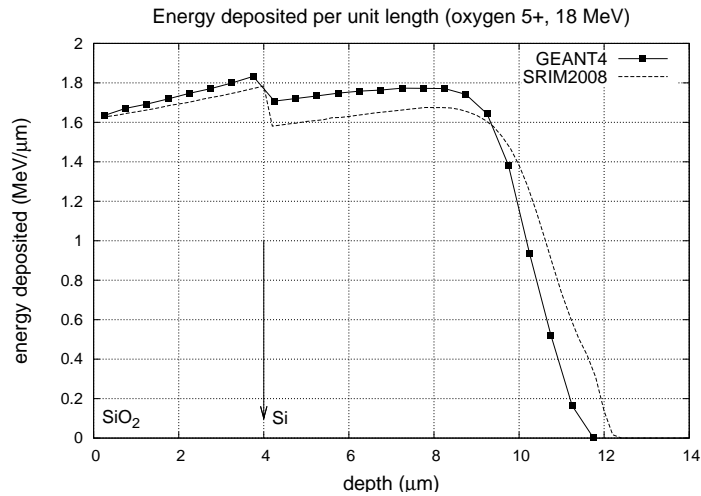


Figura 8.22: Cálculo con GEANT4 de la energía depositada por unidad de longitud por iones de oxígeno que inciden a 18 MeV sobre una capa de SiO_2 de $4 \mu\text{m}$ de espesor seguida por una capa de silicio de $12 \mu\text{m}$. También se presenta el cálculo de LET realizado con SRIM-2008.04 a modo comparativo.

ha comentado anteriormente (sección 8.4.1). La precisión estimada de los modelos implementados en GEANT4 en el rango de energías de este trabajo es, aproximadamente, del 10 %, similar a las diferencias observadas en dicha Fig. 8.22.

La geometría de capas que acabamos de presentar es una aproximación de la geometría global del biestable. En términos medios, en este circuito integrado hay una capa de *pasivación* de SiO_2 de unas $4 \mu\text{m}$ de espesor por encima de los transistores. Esto quiere decir que los volúmenes sensibles del biestable se encuentran a una profundidad aproximada de $5\text{-}6 \mu\text{m}$. A partir del resultado mostrado en la Fig. 8.22, podemos estimar que la energía cinética de los iones de oxígeno a esa profundidad es $\sim 10 \text{ MeV}$ cuando la energía de incidencia sobre el biestable es de 18 MeV.

De acuerdo con el análisis anterior, en la Fig. 8.23 se representa la distribución radial de la energía depositada en silicio, por unidad de volumen, para iones de oxígeno cuya energía cinética está comprendida entre 9 MeV y 14 MeV, calculada con el modo de dosis radial de la aplicación “track analyser”. Con estos resultados podemos estimar el radio lateral de la traza del ion de manera sencilla, obteniendo unos valores comprendidos entre 60 nm (9 MeV) y 110 nm (14 MeV).

Hemos realizado también una verificación cruzada entre estos resultados y los de la Fig. 8.22 utilizando la relación (8.13), comprobando que, efectivamente, la integral de los valores calculados para 10 MeV en la Fig. 8.23 es aproximadamente $1,7 \text{ MeV}/\mu\text{m}$, que es la deposición de energía lineal calculada con GEANT4 para una profundidad de $\sim 5 \mu\text{m}$ (Fig. 8.22).

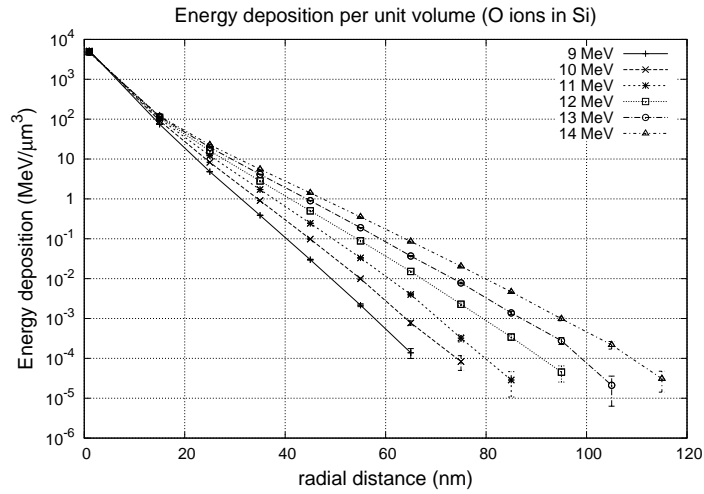


Figura 8.23: Cálculo con GEANT4 de la energía depositada por unidad de volumen en silicio por iones de oxígeno, cuya energía está comprendida entre 9 MeV y 14 MeV, en función de la distancia radial al eje de propagación.

Los cálculos de distribución radial de energía pueden compararse con un modelo semianalítico desarrollado por Waligorski et al. (1986) y posteriormente mejorado por Fageeha et al. (1994). En la Fig. 8.24 se muestra el resultado para iones de oxígeno de 10 MeV en silicio, promediado para 10^3 eventos. En esta gráfica (y también en la Fig. 8.23), se ha representado la energía depositada en cada *bin* anular de la geometría de “ojo de buey” en el centro del intervalo correspondiente, excepto para el caso del *bin* central (0-10 nm), que ha sido representado en 1 nm para poder compararse con el modelo. Se observa que, en general, GEANT4 predice un valor mayor de la energía depositada con respecto al modelo, al igual que extiende su rango lateral más allá de los aproximadamente 40 nm que predice el modelo. Esta sobreestimación puede estar relacionada con la diferencia observada en el cálculo de *LET* con respecto al código SRIM. Sin embargo, hay que destacar que el modelo de Waligorski et al. (1986) y Fageeha et al. (1994) no es fiable para radios menores a 20 nm y que fue parametrizado por ajuste a cálculos realizados con un código Monte Carlo (Hamm et al., 1979). Asimismo, no hay constancia de la precisión estimada para este modelo.

Por otro lado, en la Fig. 8.25 mostramos la misma comparación para protones a 100 MeV en silicio, promediando 10^6 eventos. En este caso el alcance de los electrones secundarios es más de un orden de magnitud mayor que en la situación anterior. Puede observarse que en el intervalo 10-100 nm el cálculo con GEANT4 arroja valores parecidos a los del modelo. Sin embargo, por encima de los 100 nm GEANT4 predice una energía depositada menor con respecto al modelo.

Finalmente, a modo ilustrativo, la Fig. 8.26 muestra una visualización

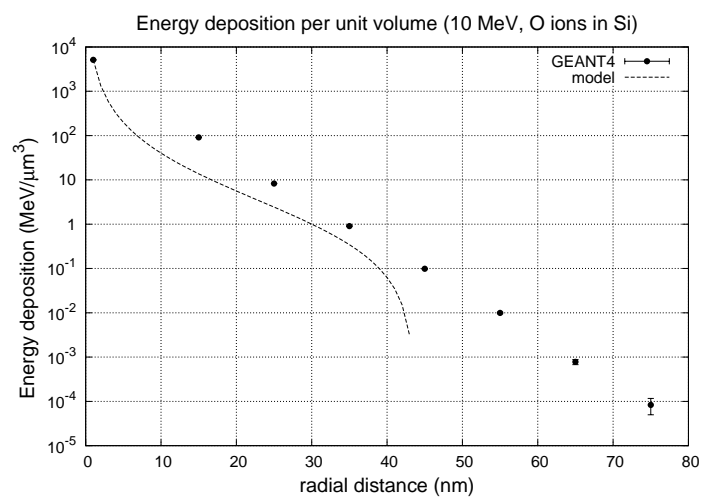


Figura 8.24: Comparación de la energía depositada por unidad de volumen en silicio por iones de oxígeno a 10 MeV calculada con GEANT4 (puntos) y con el modelo propuesto por Waligorski et al. (1986) y Fageeha et al. (1994) (curva).

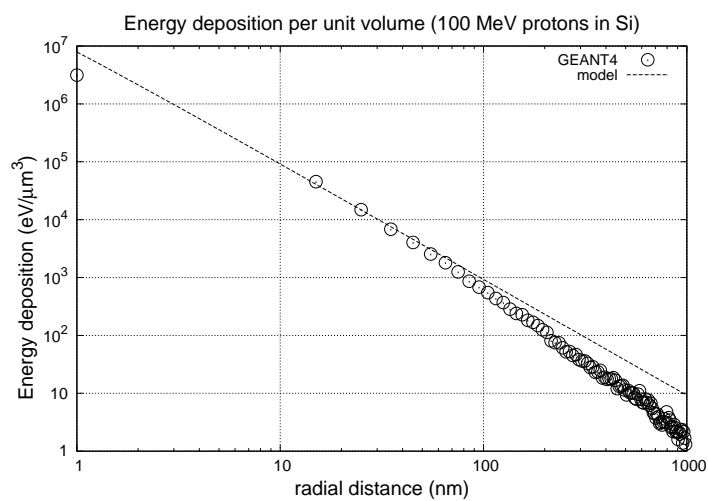


Figura 8.25: Comparación análoga a la realizada en la Fig. 8.24 para protones a 100 MeV en silicio.

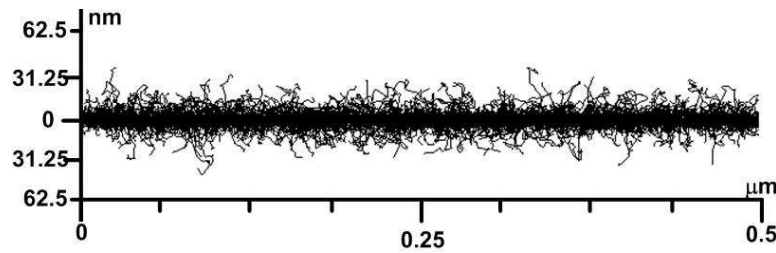


Figura 8.26: Electrones secundarios reproducidos por GEANT4 para iones de oxígeno incidiendo a 10,5 MeV sobre una lámina de silicio de 0,5 μm de espesor. Se representa un total de 10 eventos.

generada por la aplicación “track analyser” de las trazas acumuladas por 10 iones de oxígeno entrando a 10,5 MeV en una lámina de silicio de 500 nm de espesor. Se puede observar que sólo algunos electrones secundarios se separan más de 30 nm del eje de propagación, de acuerdo con el resultado de la Fig. 8.23, donde se aprecia que la dosis a esta distancia radial es varios órdenes de magnitud inferior a la dosis central.

8.6. Discusión

En este capítulo hemos analizado el comportamiento del código GEANT4 en situaciones diversas, algunas de interés en física nuclear y otras de interés en cálculos de microdosimetría.

En primer lugar, hemos podido comprobar que la ausencia de modelos no estadísticos adecuados influye notablemente en las simulaciones de reacciones nucleares a bajas energías en sistemas muy ligados. Para la incidencia de protones de 18 MeV sobre ${}^9\text{Be}$, la simulación subestima en un orden de magnitud la producción de neutrones (Fig. 8.4), e incluso la forma del espectro no es la obtenida experimentalmente. Sin embargo, el caso estudiado para deuterones a 9 MeV es más llamativo, puesto que en esta ocasión se consigue reproducir el espectro por encima de los 8 MeV (Fig 8.5), lo que se atribuye a que la contribución mayoritaria a esta zona del espectro proviene precisamente de interacciones en las que el deuterón es absorbido por el ${}^9\text{Be}$ formando un núcleo compuesto de ${}^{11}\text{B}$ que se desexcita emitiendo un neutrón. Este tipo de procesos sí está incluido en la física hadrónica de GEANT4, que en este caso se reproduce mediante el modelo de *break-up* de Fermi, que se aplica para núcleos con $A \leq 16$. Por lo tanto, con la simulación sí se ha conseguido reproducir la parte del espectro en la que los mecanismos no estadísticos no son dominantes.

En segundo lugar, la radiación gamma producida en la fuente de neutrones no ha podido ser cotejada con resultados experimentales, con lo cual su simulación sólo debe interpretarse de manera estimativa. En estos

cálculos de producción podemos detectar dos posibles fuentes de error. Por un lado, la presencia de los picos espúreos a energías mayores de 9 MeV. Por otro lado, el hecho de que la producción de neutrones simulada con GEANT4 no se corresponda con los datos experimentales. En ambos casos estas limitaciones pueden introducir sesgos en los resultados de emisión de fotones, ya que alteran la contribución de los posibles mecanismos de desexcitación que entran en juego. En cuanto al primero de los aspectos, se ha solucionado el error en la clase *G4NeutronHPInelastic* y se está trabajando en su mejora global. En cuanto al segundo, en la actualidad se están planteando dos alternativas para abordarlo. Por una parte, se tratará de incluir modelos específicos para describir los procesos directos y/o de ruptura no estadística implicados en estas reacciones. Por otra parte, se ha comenzado a trabajar en una interfaz de acceso a datos evaluados de reacciones producidas por partículas cargadas ligeras (protones y deuterones).

Sobre los cálculos de energía depositada en los volúmenes sensibles del biestable, hay que hacer notar que para la irradiación con neutrones y gammas (Figs. 8.10-8.13) la incertidumbre relativa es, en valor medio, de un 20 % a pesar de considerarse la incidencia de 3×10^9 partículas, lo cual se debe a la pequeñísima probabilidad de interacción de estas partículas en estos volúmenes. Sin embargo, los cálculos correspondientes a la incidencia de partículas cargadas (Figs. 8.15-8.20) presentan incertidumbres relativas en torno al 2 % para un total de 10^6 eventos, debido a que éstas últimas siempre dejan una densa traza de ionización a su paso.

En la irradiación con partículas cargadas se ha observado la existencia de un patrón claro en todos los casos estudiados para los óxidos de puerta. Sin embargo, dicho patrón no se ha observado para los canales, que se encuentran justo debajo. El origen de esta contradicción aún no está claro, aunque todo apunta al pequeño espesor del óxido de puerta (12,5 nm) comparado con el del canal (300 nm). En un principio se ha considerado la posibilidad de que alguno de los volúmenes vecinos del óxido de puerta estuviese solapado con éste. En GEANT4, en caso de existir un solapamiento entre volúmenes, prevalece el que se haya colocado en último lugar. Por lo tanto, un solapamiento de 1 nm puede disminuir el cálculo de energía depositada en el óxido en un 10 %. Sin embargo, esta posibilidad ha quedado descartada con verificaciones sistemáticas de las posiciones y tamaños de los volúmenes circundantes. Otra posibilidad para explicar esta contradicción está relacionada con el hecho de que el paso (*step*) de simulación de una partícula a través de este volumen es muy pequeño y puede introducir sesgos en los resultados. No obstante, es preciso investigar este aspecto para poder llegar a conclusiones.

Las simulaciones para calcular la energía depositada a escala sub-micrométrica (Figs. 8.23-8.26) arrojan resultados satisfactorios en cuanto al objetivo inicial de este trabajo. Aunque existen diferencias con respecto

al modelo semianalítico considerado, éste no es preciso a escalas menores de 10 nm. Asimismo, las diferencias observadas se producen a distancias del eje de propagación en las que la energía depositada es varios órdenes de magnitud inferior a la depositada en el centro; por lo tanto, son diferencias muy pequeñas comparadas con el valor total.

Finalmente, hay que resaltar la utilidad de estos cálculos a escala sub-micrométrica para evaluar qué tipo de daños se producen en el biestable en cuanto a su funcionamiento. Las distribuciones de energía calculadas en este trabajo pueden utilizarse como datos de entrada para el modelo de ionización en volumen utilizado por simuladores comerciales TCAD (*Technology Computer-Aided Design*) de transporte electrónico en circuitos integrados sometidos a irradiación. Dichos simuladores pueden calcular el campo eléctrico interno y la señal esperada (corriente eléctrica y voltaje) producida por la microelectrónica como respuesta a esa radiación incidente. Ejemplos de simuladores son *Sentaurus Device TCAD*^p o *Device3D TCAD*.^q Con ellos se pueden relacionar los cálculos realizados con GEANT4 con el observable experimental disponible, que es el funcionamiento del circuito.

8.7. Conclusiones

Hemos simulado con GEANT4 los espectros de emisión de neutrones y gammas de la nueva fuente de berilio instalada en el CNA. Para la transmisión de neutrones a través del tambor de refrigeración de dicha fuente hemos utilizado resultados experimentales publicados en la literatura, mientras que para la producción de gammas hemos considerado la producción calculada con GEANT4, al no encontrar datos experimentales. El espectro de gammas obtenido con GEANT4 presenta unos picos espúreos debidos a un error en el código oficial (en la clase *G4NeutronHPInelastic*) que ya ha sido corregido para la próxima versión de GEANT4. En cualquier caso, los resultados de las simulaciones concluyen que la calidad de la fuente de neutrones es mejor utilizando el haz de protones a 18 MeV.

Por otra parte, hemos realizado estudios microdosimétricos con GEANT4 sobre un circuito integrado biestable. Para ello, hemos importado su modelo geométrico, realizado con precisión nanométrica a partir de su diseño, mediante el esquema GDML, incluido en GEANT4. En este modelo geométrico hemos definido como volúmenes sensibles el drenador, fuente, canal y óxido de puerta de cada uno de los transistores de este circuito. Este nivel de detalle permite calcular por simulación la energía depositada en los volúmenes sensibles en situaciones experimentales previstas en el CNA.

^pPágina web de Sentaurus Device: <http://www.synopsys.com/Tools/TCAD/DeviceSimulation/Pages/SentaurusDevice.aspx>.

^qPágina web de Device3D: http://www.silvaco.com/products/vwf/atlas/device3d/device3d_br.html.

Dichos cálculos no pueden ser medidos experimentalmente debido al pequeño tamaño de los componentes, por lo que estas simulaciones constituyen una herramienta fundamental en la planificación de dichos experimentos.

Finalmente, para el caso de irradiación con partículas cargadas pesadas hemos desarrollado una herramienta específica para analizar la deposición de energía a escala sub-micrométrica. Dicha herramienta permite calcular la distribución espacial de la energía depositada, con la que se puede desarrollar un modelo volumétrico de ionización que puede ser utilizado como dato de entrada en simuladores comerciales de transporte electrónico en circuitos que sufran eventos de irradiación.

Capítulo 9

Simulación del prototipo *mini-SeD*

RESUMEN: En este capítulo presentamos la simulación realizada con GEANT4 del prototipo mini-SeD, actualmente en fase de desarrollo dentro del proyecto HISPEC/DESPEC de FAIR (*Facility for Anti-proton and Ion Research*). El mini-SeD es un detector de gas a baja presión diseñado para reconstruir la trayectoria de partículas de un haz mediante la detección de electrones secundarios producidos en una hoja emisora. Estos electrones secundarios son acelerados y focalizados por un campo eléctrico y un campo magnético. El montaje experimental, incluyendo los campos eléctrico y magnético, ha sido totalmente reproducido con GEANT4. La distribución espacial obtenida para el flujo de electrones es compatible con la distribución de carga observada experimentalmente en los cátodos. Sin embargo, no ha sido posible reproducir el flujo de electrones en el plano del ánodo del mini-SeD debido a la ausencia de modelos de efecto avalancha por debajo del keV.

ABSTRACT: The GEANT4 simulation of the mini-SeD prototype, which is being developed within the scope of the HISPEC/DESPEC project at FAIR, is presented in this chapter. The mini-SeD is a low pressure gas detector designed to reconstruct the particle beam trajectory by detecting secondary electrons produced in a emissive foil. These secondary electrons are accelerated and focused by means of an electric field and a magnetic field. The experimental setup, including both electric and magnetic fields, has been totally reproduced with GEANT4. The electron flux spatial distribution is compatible with the charge distribution observed experimentally in the cathodes. However, it has not been possible to reproduce the electron flux at the mini-SeD anode plane due to the absence of avalanche effect models below keV.

9.1. Introducción

En los últimos años, los centros de producción de haces de núcleos exóticos GANIL (*Grand Accélérateur National d'Ions Lourds* – Caen, Francia) y GSI (*Gesellschaft für SchwerIonenforschung* – Darmstadt, Alemania) han comenzado a ampliar sus instalaciones mediante los proyectos SPIRAL II (*Système de Production d'Ions Radioactifs en Ligne de 2^{ème} génération*) y FAIR, respectivamente. Ambos prevén la construcción de nuevas instalaciones que proporcionarán haces de isótopos inestables de baja energía (< 10 MeV/n) con tasas de recuento superiores a las disponibles actualmente, 10^6 partículas/s (pps). Con estos haces se pretende estudiar la estructura nuclear de isótopos tales como núcleos superpesados, núcleos exóticos o núcleos altamente deformados.

Las características principales de estos haces de baja energía son una gran apertura angular y una baja resolución en energía. Ambas hacen necesario el uso de detectores de trazado para reconstruir la trayectoria de los iones antes de impactar en el blanco, con el objetivo de identificar las condiciones iniciales de las partículas que producen la reacción nuclear. Su detección sólo es posible utilizando un sistema electrónico suficientemente rápido y óptimo de manera que se pueda procesar con elevada estadística toda la información que se genera con alta tasa de producción.

Hasta ahora se ha abordado este problema desde diferentes perspectivas. Por un lado han sido utilizados detectores de tiras de silicio de doble cara, conocidos como DSSSD (*Double-Sided Silicon Strip Detector*) (Boutachkov et al., 2009). Sin embargo, los DSSSD están limitados debido a su baja resistencia ante tasas de recuento mayores de 10^4 pps. También han sido utilizados detectores de placas paralelas de micro canales, MCP (*Micro Channel Plates*), que arrojan resultados aceptables, aunque restringidos a un área activa demasiado pequeña (Feofilov et al., 1995). Asimismo, algunas pruebas con detectores de diamante han mostrado unas prestaciones satisfactorias (Bednarczyk et al., 2007); sin embargo, el precio elevado del material dificulta la producción de detectores con una gran superficie activa. Por otra parte, los detectores gaseosos de baja presión, en particular las cámaras proporcionales multihilos, MWPC (*Multi-Wire Proportional Chamber*), ofrecen buenas prestaciones en este sentido. Un buen ejemplo es el detector CATS (*Chambre A Trajectoires de Saclay*) (Ottini-Hustache et al., 1999). También podemos destacar el detector de electrones secundarios, SeD (*Secondary electron Detector*), instalado en GANIL y desarrollado por el CEA (*Commissariat à l'Énergie Atomique* – Francia) en su sede de Saclay (Francia) como alternativa a las MCP (Drouart et al., 2002).

En este contexto, en el Dpto. de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad de Sevilla se está trabajando en el desarrollo de un detector gaseoso a baja presión, denominado mini-SeD (Pancin et al., 2009), dentro

del proyecto HISPEC/DESPEC de FAIR y en colaboración con CEA-Saclay (Fernández, 2010; Garzón Camacho, 2010). En este capítulo, presentamos las simulaciones realizadas con GEANT4 para evaluar las prestaciones de este prototipo.

Estructura de este capítulo

En la sección 9.2 se describe tanto la estructura y funcionamiento del prototipo mini-SeD como las principales características de la simulación GEANT4 del montaje experimental. En la sección 9.3 mostramos los principales resultados obtenidos sobre la caracterización del flujo de electrones a la entrada del detector, comparados con medidas experimentales. Finalmente, en la sección 9.4 presentamos las conclusiones.

9.2. Simulación GEANT4 del detector

9.2.1. Estructura y principio de funcionamiento

El mini-SeD (Pancin et al., 2009), mostrado en la Fig. 9.1, es un contador proporcional de gas a baja presión basado en la detección de electrones secundarios. Ha sido diseñado para reconstruir la trayectoria, una a una, de todas las partículas pertenecientes a un haz de gran apertura angular y baja resolución en energía, con tasa de recuento del orden de 10^6 pps. Como se muestra más adelante, la reconstrucción se realiza a partir de la emisión de electrones secundarios producidos por el paso del haz a través de una fina hoja emisora.

Su estructura es similar a la del detector CATS (Ottini-Hustache et al., 1999), representada en la Fig. 9.2. El mini-SeD está constituido por una ventana de entrada cuyo área es de 70×70 mm², dos cátodos y un ánodo colocados en planos paralelos con una distancia ánodo-cátodo de 1,6 mm. La ventana de entrada está compuesta por una lámina de *mylar* aluminizado de 0,9 μ m de espesor. Tras esta ventana se encuentra el primer cátodo, que está formado por un plano de 72 hilos paralelos de wolframio con deposición de oro de 50 μ m de diámetro y 1 mm de separación. A continuación se sitúa el ánodo, que consiste en un plano formado también por 72 hilos paralelos con 1 mm de separación entre ellos. Su material es también wolframio con deposición de oro, pero su diámetro es de 20 μ m. Asimismo, la orientación de los hilos del ánodo es perpendicular a la de los hilos del primer cátodo. Finalmente, el segundo cátodo consiste en un plano de 28 pistas (tiras) realizadas en cobre de 2,54 mm de ancho, 0,2 mm de separación entre ellas y colocadas sobre una placa PCB. Su orientación es paralela a la de los hilos del ánodo y perpendicular a la de los hilos del primer cátodo. De esta manera, la señal en el primer cátodo determina la posición en la coordenada y mientras que

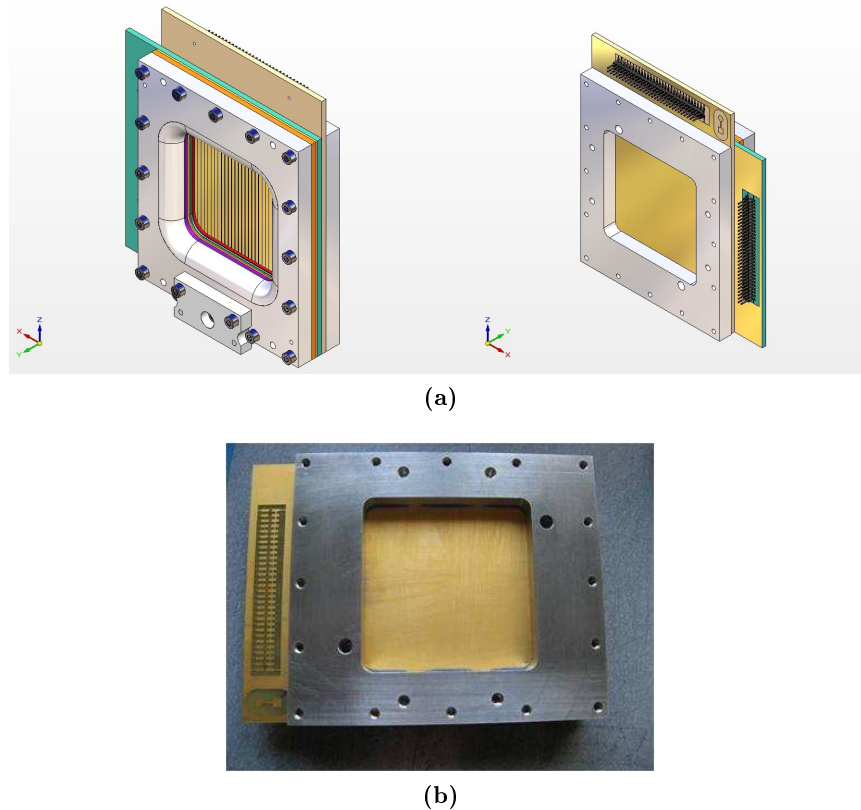


Figura 9.1: El prototipo mini-SeD. (a) Vistas delantera (izquierda) y trasera (derecha) del esquema de la versión final. (b) Fotografía del mini-SeD. (Fernández, 2010)

la señal del segundo cátodo establece la posición en la coordenada x . El volumen delimitado por la lámina de *mylar* aluminizado y la placa PCB, donde se encuentra el segundo cátodo, encierra el gas a baja presión con el que trabaja el detector. En este caso se trata de isobutano puro ($i\text{-C}_4\text{H}_{10}$) a una presión de 4 torr (5,3 mbar). Debido al pequeño espesor de la lámina de *mylar* aluminizado de la ventana de entrada, a ésta se le añade una rejilla de acero inoxidable que cubre toda la superficie de la ventana ($70 \times 70 \text{ mm}^2$) para evitar la deformación de ésta. Dicha rejilla está compuesta por hilos de $46 \mu\text{m}$ de diámetro y separación de $460 \mu\text{m}$.

La principal diferencia del mini-SeD con respecto al detector CATS es que en éste último ambos cátodos están constituidos por un plano de 28 pistas de *mylar* aluminizado. Asimismo, la distancia ánodo-cátodo en el detector CATS es 3,2 mm, el doble que la del mini-SeD. Además, en la Fig. 9.2 podemos observar que el diámetro de los hilos del ánodo es de $10 \mu\text{m}$, mientras que en el caso del mini-SeD es de $20 \mu\text{m}$.

En la Fig. 9.3 se muestra un esquema del principio de funcionamiento del mini-SeD. Como ya se ha comentado, el mini-SeD es un contador

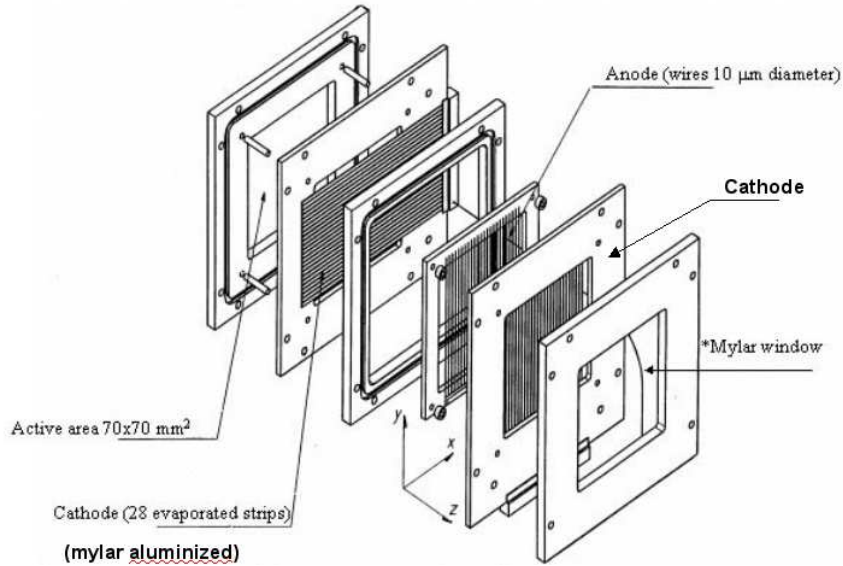


Figura 9.2: Piezas y electrodos que componen el detector CATS (Ottini-Hustache et al., 1999).

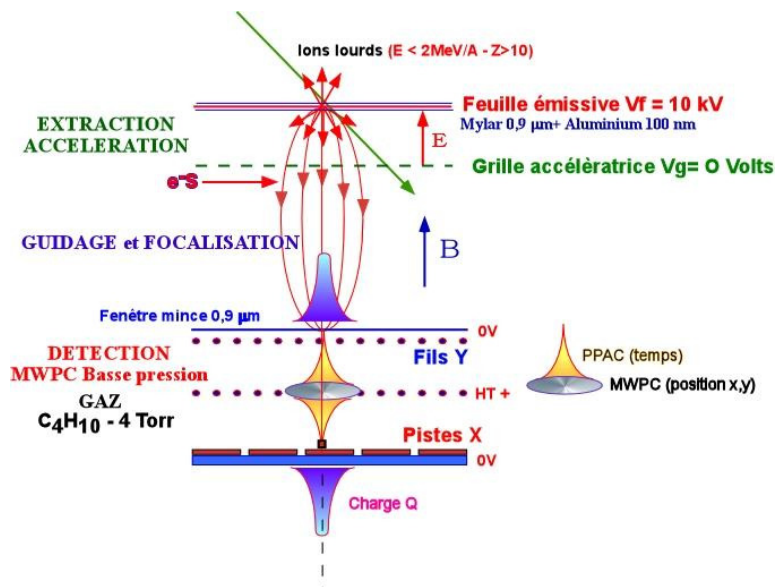


Figura 9.3: Principio de funcionamiento de un detector de electrones secundarios. (Fernández, 2010)

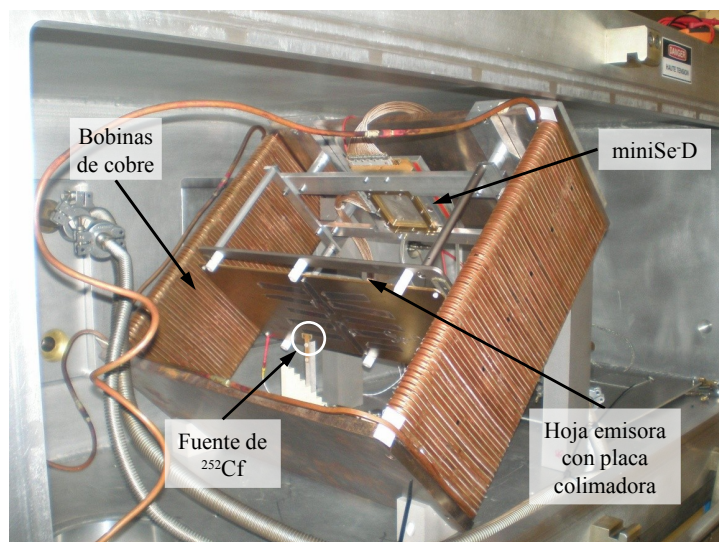
proporcional de gas a baja presión y su funcionamiento permite tanto la reconstrucción de la posición en 2D como la medida del instante de paso de cada partícula del haz a través de un determinado plano.

Para ello, el mini-SeD se encuentra acoplado a una hoja emisora de *mylar* aluminizado, la cual es atravesada por el haz. La estructura se coloca dentro de una cámara de vacío, orientada de tal forma que el mini-SeD queda situado fuera de la trayectoria del haz, formando un ángulo de 45° . Entonces, cuando una partícula del haz incide sobre la lámina, se generan electrones secundarios por ionización. Éstos son acelerados y focalizados hacia el detector mediante un campo eléctrico y un campo magnético, ambos orientados en sentido longitudinal. El campo eléctrico se genera utilizando una malla de hilos de wolframio de $100\ \mu\text{m}$ de diámetro, espaciados 1 mm entre sí, colocada a 1 cm de la hoja emisora. La diferencia de potencial existente entre la lámina y la malla es de 10 kV para que los electrones adquieran la energía cinética suficiente como para atravesar la ventana de *mylar* aluminizado del mini-SeD. Por otra parte, mediante un campo magnético uniforme de aproximadamente 100 G, se focalizan los electrones a la entrada del detector para mejorar la resolución espacial.

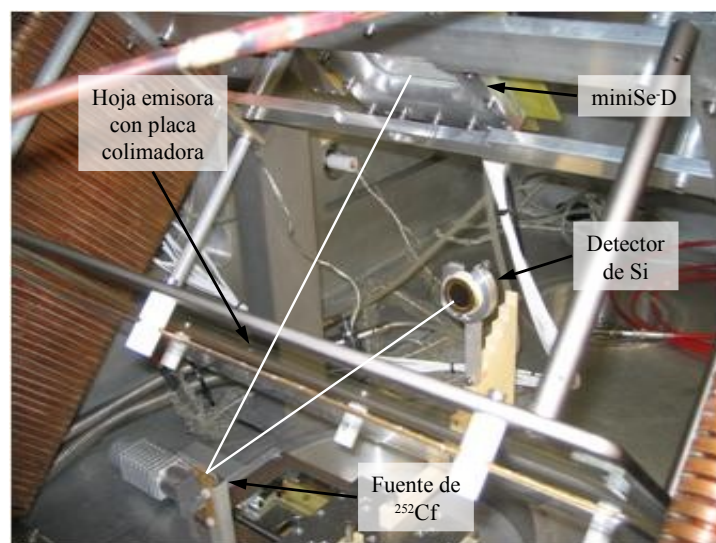
Tras ser acelerados y focalizados, los electrones secundarios entran en el recinto donde se encierra el isobutano a través de la ventana de *mylar*. Éstos pierden energía creando pares ion-electrón a su paso a través del gas, a lo largo de su recorrido entre los dos cátodos. Los electrones son acelerados hacia el plano del ánodo debido a la diferencia de potencial existente entre el ánodo, polarizado a 600 V, y los cátodos, conectados a tierra. En su camino hacia el ánodo, dichos electrones generan más pares ion-electrón por ionización, creando un *efecto avalancha* en el gas (Knoll, 2000). Los hilos del ánodo están conectados a un amplificador rápido que se utiliza para la detección temporal mientras que cada plano de cátodos se conecta a un preamplificador que genera la señal para la detección espacial (Garzón Camacho, 2010).

9.2.2. Simulación del montaje experimental

La Fig. 9.4 muestra el montaje experimental simulado con GEANT4, que corresponde a la medida de resolución espacial del mini-SeD (Fernández, 2010). Para este experimento de prueba se emplea una fuente radiactiva de ^{252}Cf cuya actividad es de 20,6 kBq. Esta fuente emite partículas α (97%) y, en menor proporción, fragmentos por fisión espontánea (3%). Las medidas se realizaron considerando sólo los fragmentos de fisión. En las fotografías se pueden observar unas bobinas de cobre cuyo cometido es generar el campo magnético de intensidad 100 G en el centro. Este campo magnético, junto con el potencial de 10 kV mencionado anteriormente, provoca que los electrones generados en la hoja emisora lleguen a la ventana de entrada del mini-SeD describiendo una trayectoria helicoidal, de manera que se pueda reconstruir el punto de partida de los electrones desde la hoja emisora.



(a)



(b)

Figura 9.4: (a) Montaje de prueba para la resolución espacial del mini-SeD. Las bobinas generan el campo magnético que focaliza los electrones secundarios. La hoja emisora y el mini-SeD forman un ángulo de 45° con la dirección del haz, que en este caso es sustituido por una fuente de ^{252}Cf . (b) Vista ampliada de la posición relativa de los detectores con respecto a la fuente. (Fernández, 2010)

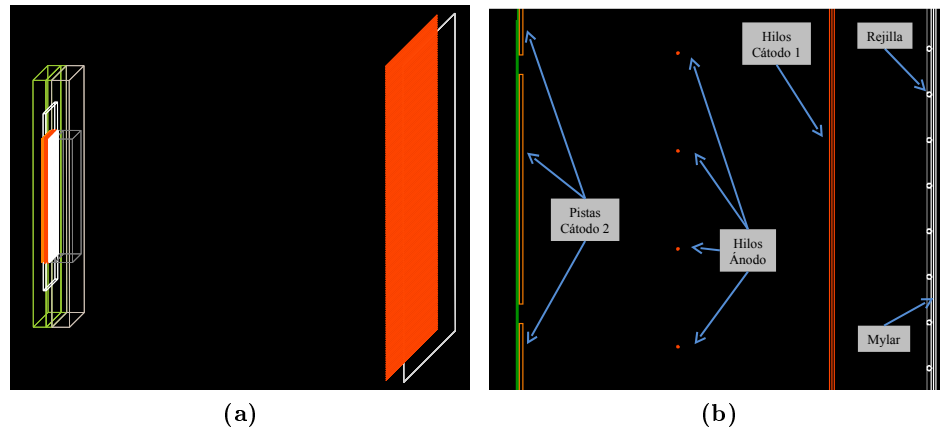


Figura 9.5: (a) Geometría del montaje experimental reproducido con GEANT4; esquema del mini-SeD (izquierda) y hoja emisora junto con la malla de hilos aceleradora (derecha). (b) Detalle de la geometría interna del mini-SeD, donde se puede apreciar la ventana de *mylar* aluminizado junto con la rejilla de acero inoxidable, los planos de los cátodos y el del ánodo.

Por otra parte, el detector de silicio que se observa en la Fig. 9.4b se encarga de detectar los fragmentos de fisión que han sido emitidos en la dirección hipotética del haz. Cuando detecta un fragmento en coincidencia con el mini-SeD, genera una señal de disparo que permite que el sistema de adquisición dé por válido el evento. En esta misma figura puede observarse que el mini-SeD queda fuera de la trayectoria del haz, formando un ángulo de 45° . La distancia entre la hoja emisora y el mini-SeD es de 20 cm.

La Fig. 9.5a muestra una vista lateral del modelo geométrico usado en las simulaciones con GEANT4. En ella el haz entra por la derecha, donde se encuentra la hoja emisora (línea blanca) junto con la malla de hilos (en naranja). Al otro lado de la figura, concretamente a 20 cm, tenemos el mini-SeD, cuya estructura interna es difícil de apreciar debido a problemas de escala. Por ello, la Fig. 9.5b muestra una ampliación donde se pueden observar los diferentes planos definidos en el mini-SeD: ventana de entrada de *mylar* junto con la rejilla de acero inoxidable (en blanco), los hilos del primer cátodo y del ánodo (naranja) y las pistas del segundo cátodo (naranja) sobre PCB (verde). El gas isobutano confinado en el interior del mini-SeD a 4 torr ha sido reproducido en GEANT4 a partir de su composición química, estableciendo su potencial medio de ionización en 23 eV. Por otro lado, el vacío de la cámara se modela utilizando el material `G4_Galactic`, tomado de la base de datos del NIST implementada en GEANT4.

Las medidas experimentales se realizaron considerando sólo los fragmentos de fisión emitidos por el ^{252}Cf , como ya se ha comentado. El número másico de los fragmentos emitidos está comprendido en el rango $66 \leq A \leq 172$ (England y Rider, 1993). De entre todos ellos, hemos

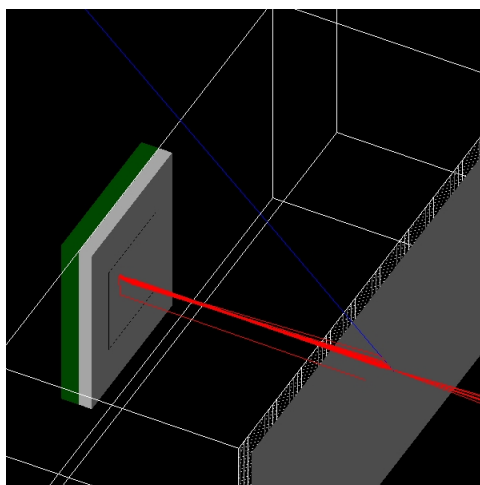


Figura 9.6: Captura de un evento simulado con GEANT4. La trayectoria del fragmento de fisión (^{116}Cd) se representa en azul, mientras que la de los electrones secundarios se muestra en rojo.

elegido como fragmento representativo el ^{116}Cd , puesto que es uno de los fragmentos estables que se emiten con mayor probabilidad y su número másico se encuentra cercano al valor medio del rango mencionado. Asimismo, la energía considerada para este fragmento es de 1 MeV/u, con incidencia a 45° sobre la hoja emisora, tal y como puede apreciarse en la Fig. 9.6, que muestra una captura de un evento simulado con GEANT4. En ella, pueden distinguirse tanto la trayectoria del ^{116}Cd (en azul) como la de los electrones secundarios emitidos desde la hoja emisora (rojo), los cuales son focalizados sobre el mini-SeD. La anécdota de esta figura es la observación un electrón retrodispersado desde la ventana de entrada del detector hacia la malla de hilos, que posteriormente es absorbido por la lámina de *mylar* tras ser frenado por el campo eléctrico que previamente lo había acelerado hacia el detector.

La inclusión de campos eléctricos y magnéticos en diferentes regiones de la geometría es la principal característica novedosa de las simulaciones de este capítulo con respecto a las de los anteriores. En general, no es sencillo definir en una misma región del espacio un campo eléctrico y otro magnético, tal y como ocurre en este caso. Nosotros hemos seguido el esquema implementado en el ejemplo `extended` denominado `field04`, que es el único que muestra cómo superponer campos eléctricos y magnéticos en un mismo volumen.

Puesto que el campo magnético es aproximadamente constante en la región cercana al eje de propagación de los electrones secundarios, hemos supuesto que su intensidad es uniforme de 100 G en todo el volumen de simulación, con orientación constante. Por otra parte, también hemos considerado que el campo eléctrico definido entre la hoja emisora y la malla es uniforme, puesto que la dimensión típica de la región de efectos de borde, que

es del orden de la anchura de separación entre conductores, es mucho menor que la dimensión típica del volumen en el que se define el campo eléctrico. Idéntico razonamiento se puede aplicar a los campos eléctricos presentes entre el ánodo y los cátodos. Así pues, hemos definido un campo eléctrico constante de 10 kV/cm entre la hoja emisora y la malla, y de $\frac{600 \text{ V}}{1,6 \text{ mm}} = 375 \text{ V/mm}$ entre el ánodo y cada uno de los cátodos.

En cuanto al transporte de partículas cargadas en el seno de campos electromagnéticos, GEANT4 proporciona varios propagadores de diversos órdenes de precisión.^a En este trabajo, se ha optado por utilizar la configuración predeterminada de GEANT4, que corresponde al algoritmo clásico de integración Runge-Kutta de cuarto orden. En cuanto a los parámetros de precisión para el transporte de partículas, hemos utilizado los valores definidos en el ejemplo `field04`.

La lista de física está basada en el paquete *Livermore Low-Energy EM* para procesos electromagnéticos y en *QGSP_BIC_HP* para modelar las interacciones hadrónicas, al igual que en el capítulo 8. Sin embargo, en esta ocasión debemos ser especialmente cuidadosos con el hecho de que cualquier electrón emitido por la hoja emisora es posteriormente acelerado por un potencial eléctrico de 10 kV hacia el detector, contribuyendo entonces de manera significativa al resultado final. Por lo tanto, para evitar sesgos en los cálculos de GEANT4, ha sido necesario disminuir el valor del corte de producción de electrones hasta el mínimo valor posible. En nuestro caso hemos optado por utilizar un valor de 5 μm en toda la geometría excepto en la hoja emisora, donde utilizamos un corte de producción de 1 μm . En este sentido, debemos resaltar que aunque el rango de validez de los modelos implementados en el paquete *Livermore* se extiende hasta un límite inferior de 250 eV, este valor puede cambiarse explícitamente en la lista de física, aunque la precisión de estos modelos disminuye por debajo de dicho límite. En nuestro caso, hemos extendido dicho límite hasta los 25 eV.

También se debe mencionar que GEANT4 no incluye modelos para reproducir mecanismos de avalancha de electrones a las energías que se producen en el mini-SeD, inferiores al keV. No obstante, ésta es una limitación presente en todos los códigos Monte Carlo de transporte general de partículas a través de la materia. Por lo tanto, es de esperar que la fluencia de electrones calculada a través del plano del ánodo sea mucho menor que la experimental. Por lo tanto, para sortear esta limitación hemos realizado estimaciones basadas en análisis teóricos realizados a posteriori sobre los resultados de la simulación.

Asimismo, GEANT4 es un código de transporte de radiación a través de la materia y no incorpora mecanismos de inducción que permitan estimar la corriente eléctrica en los electrodos. Lo que sí podemos evaluar es el flujo

^aVéase en la sección 4.3 de la guía del usuario de GEANT4, disponible en <http://geant4.cern.ch/support/userdocuments.shtml>.

de electrones que induce dicha corriente, aunque con las limitaciones ya comentadas. Por ello, la simulación ha sido configurada para analizar el flujo de electrones secundarios a través de diferentes planos definidos dentro del mini-SeD. Dichos planos han sido establecidos utilizando la herramienta de escritura de archivos de espacios de fase en formato del OIEA (capítulo 3). Concretamente, hemos definido cinco planos de espacio de fases, situados en:

- Exterior del mini-SeD a una distancia de 0,1 mm de la ventana de entrada.
- Tras la ventana de entrada a una distancia de 0,1 mm.
- Plano definido por el primer cátodo.
- Plano definido por el ánodo.
- Plano definido por el segundo cátodo.

Como veremos a continuación, también hemos analizado la evolución temporal del flujo de electrones a través de estos planos, por lo que hemos realizado una modificación a las clases descritas en el capítulo 3 para que se almacene también el valor de la coordenada temporal en el archivo de espacio de fases, información que no está incluida en el formato *IAEAphsp*.

9.3. Resultados y discusión

La Fig. 9.7 muestra las características del flujo de electrones secundarios a su llegada a la ventana de entrada del mini-SeD, tras la incidencia de un ion de ^{116}Cd sobre la hoja emisora de mylar aluminizado a una energía de 1 MeV/u. Como cabía esperar, la energía cinética de los electrones a su llegada al detector es mayor de 10 keV, que es la energía adquirida por la aceleración debida al campo eléctrico. La cota superior del espectro viene dada por la suma del potencial acelerador más la energía cinética máxima transferida a un electrón, que para este caso es aproximadamente de 2,2 keV. También se observa una pequeña contribución de electrones por debajo de 10 keV, que es debida a colisiones de éstos en los hilos de la malla aceleradora. La gráfica central de la Fig. 9.7 representa el instante de tiempo en el que inciden los electrones sobre la ventana de mylar, medido desde el momento en el que impacta el ion de ^{116}Cd sobre la hoja emisora. Claramente se observa que todos los electrones inciden sobre el detector dentro de un intervalo menor de 400 ps. Finalmente, la figura inferior muestra la distribución espacial sobre la coordenada x de los electrones, que está contenida en el intervalo $-2 \text{ mm} < x < 2 \text{ mm}$ gracias a la focalización debida al campo magnético.

Las características del flujo de electrones secundarios se analiza dentro del mini-SeD en cuatro planos diferentes, como ya se ha comentado

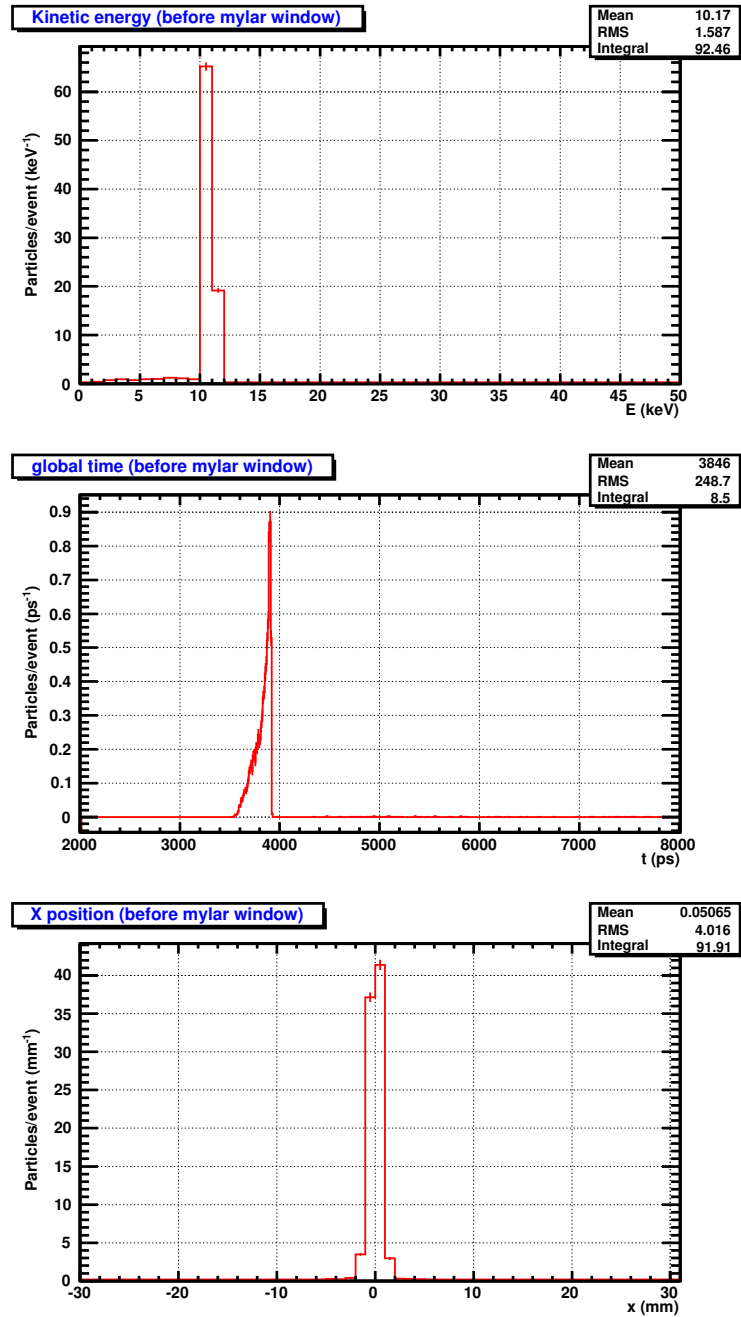


Figura 9.7: Caracterización del flujo de electrones secundarios antes de atravesar la ventana de *mylar* del *mini-SeD*. Se representan las distribuciones de energía cinética (superior), del instante de paso medido desde la incidencia de ion sobre la hoja emisora (central) y de la coordenada x (inferior).

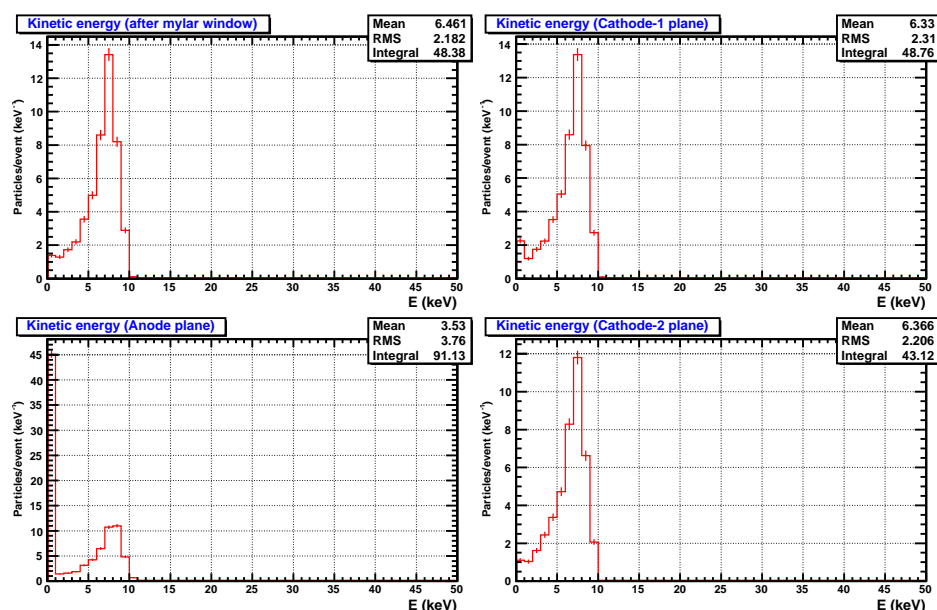


Figura 9.8: Espectro energético de los electrones secundarios a su paso por diferentes planos del detector. De izquierda a derecha y de arriba a abajo: tras la ventana de *mylar*, en el plano del primer cátodo, en el plano del ánodo y en el plano del segundo cátodo.

anteriormente. La Fig. 9.8 muestra el espectro de energía de éstos a su paso por cada uno de ellos. El espectro obtenido tras atravesar la ventana de *mylar* aluminizado es aproximadamente el que se esperaba, ya que el poder de frenado del *mylar* sobre electrones de 10 keV es aproximadamente de $21 \text{ MeV cm}^2/\text{g}$,^b lo que se traduce en una pérdida de energía media de unos 2,7 keV. Por lo tanto, los electrones entran en contacto con el gas isobutano del mini-SeD a una energía de unos 7 keV, aproximadamente. En la figura podemos comprobar que la energía más probable corresponde al *bin* centrado en 7,5 keV (anchura de 1 keV). Por otro lado, para el plano del ánodo se observa claramente un máximo en la distribución de energía para el primer *bin* ($E < 1 \text{ keV}$), que corresponde a electrones generados por ionización en el gas isobutano. Obviamente, estos electrones son capturados en el ánodo, de ahí que el espectro obtenido en el plano del segundo cátodo recupere su aspecto original. Naturalmente, en el espectro del plano del ánodo falta la contribución correspondiente a la avalancha de electrones, que aumenta en varios órdenes de magnitud la cantidad asociada al *bin* correspondiente a $E < 1 \text{ keV}$, tal y como se muestra al final de esta sección.

La Fig. 9.9 muestra la evolución temporal de la tasa del flujo integrado de electrones a través de cada uno de los planos definidos en el mini-SeD. En

^bObtenido de la base de datos ESTAR: <http://www.nist.gov/pml/data/star/index.cfm>.

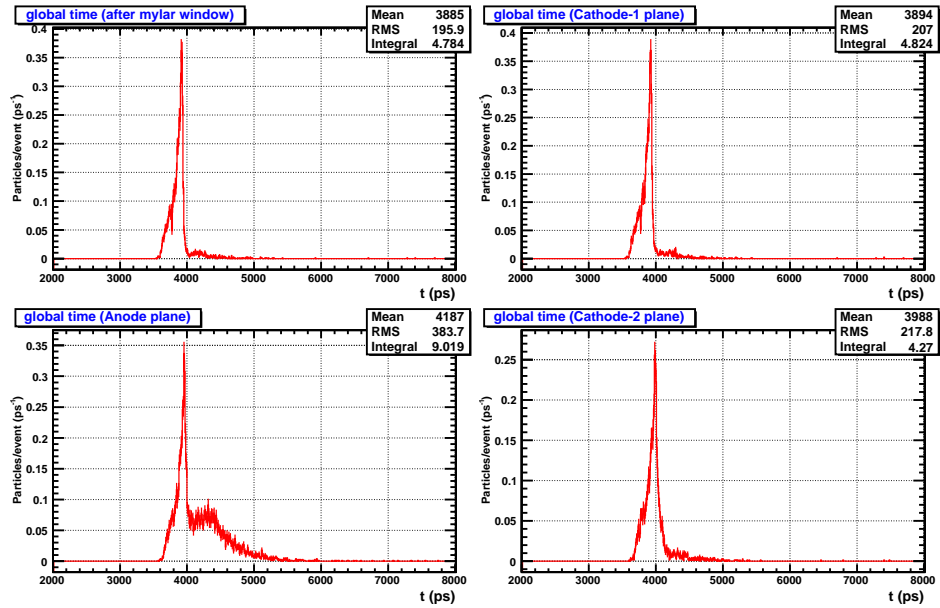


Figura 9.9: Distribución del instante de tiempo en el que los electrones secundarios cruzan cada uno de los planos definidos en el interior del *mini-SeD*. De izquierda a derecha y de arriba a abajo: tras la ventana de *mylar*, en el plano del primer cátodo, en el plano del ánodo y en el plano del segundo cátodo.

todos los casos, el flujo total por unidad de tiempo alcanza su máximo unos 300-400 ps tras el comienzo de la recepción de electrones y posteriormente baja bruscamente en menos de 200 ps. En el caso del ánodo, los electrones son detectados durante un tiempo mayor debido a que los electrones creados por ionización del gas son mucho menos energéticos que los electrones incidentes desde la hoja emisora, de ahí que aparezca en la evolución temporal una “joroba” que se extiende más de 1 ns después del máximo. Al igual que se ha comentado para la figura anterior, en el caso del ánodo falta la contribución correspondiente a los electrones generados durante la avalancha, que igualmente aumenta en un factor significativo tanto la altura como la anchura de la “joroba” observada.

En la Fig. 9.10 se presenta la distribución espacial de los electrones en función de su coordenada x . La anchura de la distribución aumenta a medida que los electrones atraviesan el gas isobutano del *mini-SeD*, como cabía esperar. Experimentalmente, se observa que cada evento detectado en el *mini-SeD* produce una señal de multiplicidad cercana a 7 en ambos cátodos (Fernández, 2010). La multiplicidad indica el número de pistas o hilos en los que se induce carga en un evento. En el primer cátodo, cada canal corresponde a tres hilos, por lo que dicha multiplicidad implica que la distribución de carga generada tiene una anchura de unos 20 mm. En el segundo cátodo, la anchura de cada pista es de 2,54 mm, por lo que,

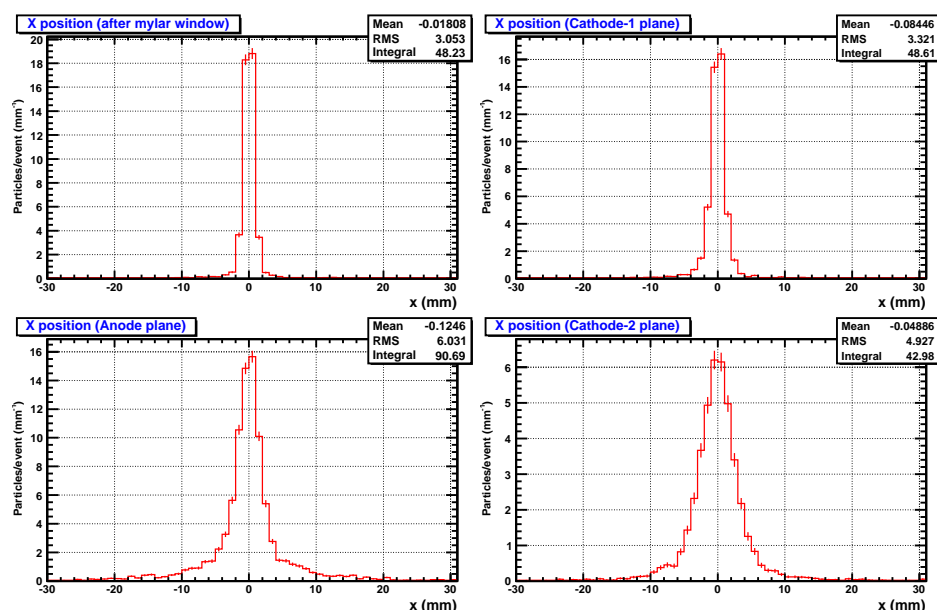


Figura 9.10: Distribución espacial (coordenada x) de los electrones secundarios a su paso por diferentes planos del detector. De izquierda a derecha y de arriba a abajo: tras la ventana de *mylar*, en el plano del primer cátodo, en el plano del ánodo y en el plano del segundo cátodo.

según la multiplicidad experimental, la carga se distribuye en una región de unos 15-20 mm. En esta figura, se observa que la distribución espacial de los electrones presenta una anchura de unos 10 mm en el plano del primer cátodo, que es inferior al valor experimental. En cuanto al segundo cátodo, la distribución espacial presenta una anchura aproximada de unos 20 mm, valor que es compatible con el resultado experimental. Dado que comparamos la distribución de carga de la señal eléctrica experimental con la distribución espacial del flujo que induce dicha señal, el origen de estas diferencias probablemente se deba a la ausencia de mecanismos de inducción de carga en la simulación Monte Carlo que permitan simular la respuesta del detector.

Con GEANT4 no es posible reproducir el flujo de electrones que induce corriente en el ánodo debido a la ausencia ya comentada de modelos para reproducir el efecto avalancha. No obstante, mediante un análisis teórico del efecto avalancha, utilizando la expresión del primer coeficiente de Townsend, α , podemos estimar el factor de ganancia para cada par ion-electrón creado en el gas (Knoll, 2000). Para ello es necesario calcular el número de pares ion-electrón generado por cada electrón que entra en el mini-SeD.

La energía media que pierde un electrón al atravesar el isobutano es de unos 140 eV para electrones a 7 keV (Fernández, 2010). Dicho valor es parecido al resultado mostrado en la Fig. 9.8, donde se observa que el

valor medio de la energía calculada tras la ventana de entrada (6,461 keV) es unos 95 eV mayor que la energía media obtenida en el plano del segundo cátodo (6,366 keV). Entonces, conocido el potencial medio de ionización del isobutano (23 eV), se estima que cada electrón secundario genera 5-6 pares electrón-hueco. Cada uno de estos electrones se multiplica por efecto avalancha con un factor de ganancia de aproximadamente 21 (Garzón Camacho, 2010).

En los resultados de estas simulaciones podemos observar que el número medio de electrones por evento es de aproximadamente 48 tras pasar por la ventana de entrada. Con el efecto avalancha, el número de electrones en el ánodo debería ser aproximadamente de $48 \times 6 \times 21 \simeq 6 \times 10^3$, resultado que es unas cuatro veces menor que el estimado experimentalmente, $\sim 2 \times 10^4$ (Garzón Camacho, 2010). Esta diferencia se debe a que en la simulación tenemos establecido un corte de producción de secundarias en el umbral que hemos establecido de 25 eV. Sin embargo, debemos considerar que el límite inferior de validez de los modelos electromagnéticos utilizados en nuestra lista de física es de 250 eV. Por lo tanto, probablemente la producción de electrones de muy baja energía en la hoja emisora no se reproduce correctamente, al no disponer en GEANT4 de modelos validados a muy bajas energías. De hecho, ningún código Monte Carlo de transporte de radiación incorpora dichos modelos. De cualquier modo, el flujo obtenido con GEANT4 en el ánodo es ~ 90 , que es 2-3 órdenes de magnitud inferior a las estimaciones anteriores. Como ya hemos comentado, es necesario incluir modelos de efecto avalancha a muy baja energía en gases a baja presión para estimar la carga inducida en el ánodo.

9.4. Conclusiones

Hemos presentado una aplicación desarrollada con GEANT4 para simular el montaje de prueba de un nuevo prototipo, denominado mini-SeD, que actualmente está siendo desarrollado por miembros del Dpto. Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad de Sevilla, dentro del proyecto HISPEC/DESPEC de FAIR y en colaboración con CEA-Saclay (Fernández, 2010; Garzón Camacho, 2010). Si bien la geometría es relativamente sencilla de reproducir, ha sido necesario utilizar recursos más avanzados del código GEANT4 para definir campos eléctricos y magnéticos solapados en la misma región del espacio.

GEANT4, al igual que el resto de códigos de transporte de radiación por métodos de Monte Carlo, no incorpora ningún modelo de efecto avalancha a energías por debajo del keV en gases a baja presión, ni de producción de electrones por ionización a muy bajas energías. A pesar de ello ha sido posible realizar una estimación de la distribución de carga en cada evento cuyo resultado es compatible con el valor experimental. Sin embargo, el flujo

de electrones a través del plano del ánodo del mini-SeD es 2-3 órdenes de magnitud inferior a las estimaciones teóricas.

No obstante, la limitación mostrada en este trabajo puede ser resuelta desde diferentes perspectivas. Por un lado, existe la posibilidad de incluir en la simulación un modelo de detector que procese la información que se considere relevante, mediante la definición de *digits* y *hits* (sección 2.4.2). Otra posible perspectiva para abordar este problema, más laboriosa pero también más interesante, es la implementación en el código de modelos físicos que permitan reproducir el fenómeno de avalancha en gases a baja presión. Para ello es necesario modelar el transporte de electrones en medios gaseosos a muy bajas energías. Precisamente, en este rango de energías trabaja actualmente la colaboración GEANT4-DNA (Incerti et al., 2010a), aunque los modelos que actualmente están implementados en el código GEANT4 sólo son válidos en agua líquida debido al interés radiobiológico del proyecto.

Parte IV

Conclusiones / *Conclusions*

Capítulo 10

Conclusiones y perspectivas

10.1. Conclusiones

De los trabajos presentados en esta memoria, podemos extraer los siguientes resúmenes y conclusiones:

- Se ha desarrollado un código independiente y estable que permite leer y generar archivos de espacio de fases en formato del OIEA (*IAEAphsp*) con aplicaciones desarrolladas en GEANT4, respetando correlaciones entre partículas. Este trabajo también incorpora utilidades específicas para simulaciones GEANT4 con interés en radioterapia.
- Hemos desarrollado versiones revisadas de los modelos responsables de los mecanismos de emisión y desexcitación de un núcleo compuesto implementados en GEANT4, consiguiendo de manera global una reproducción satisfactoria del conjunto de datos experimentales compilados en el *benchmark* del OIEA.
- Hemos simulado con GEANT4 el cabezal del acelerador lineal Siemens PRIMUS instalado en el HUVVM, obteniendo un acuerdo del 2% con respecto a las medidas experimentales realizadas en agua en condiciones de referencia con campos $10 \times 10 \text{ cm}^2$ y $5 \times 5 \text{ cm}^2$.
- GEANT4 ha sido nuestro laboratorio virtual para realizar el estudio de viabilidad de un novedoso sistema para la verificación de tratamientos complejos de radioterapia, basado en la tecnología de detectores de silicio divididos en tiras, concretamente con un SSSSD. En dicho estudio, hemos simulado las siguientes situaciones:
 - Calibrado del SSSSD en condiciones de referencia, y estudio de respuesta en condiciones de penumbra. Para ello se ha colocado el detector dentro de un maniquí formado por láminas planas de agua sólida.

- Calibrado del SSSSD y estudio de la dosis depositada en sus tiras en la configuración de tratamiento, esto es, colocado en el interior de un maniquí cilíndrico de polietileno con su plano orientado paralelo a la dirección del haz.

La validación en agua del sistema presenta un acuerdo con los cálculos de Pinnacle³ TPS con una tolerancia del 3 %. Por otra parte, hemos observado que en ciertas condiciones la dosis calculada con GEANT4 es menor que la dosis obtenida experimentalmente con la señal calibrada del SSSSD. En el caso del maniquí cilíndrico, encontramos un factor constante entre ambos resultados, lo que permite describir de manera satisfactoria el comportamiento del detector mediante la calibración apropiada para la nueva disposición. Así pues, los resultados obtenidos en este estudio demuestran la viabilidad de este sistema de detección para verificar tratamientos complejos de radioterapia. No obstante, la mejora de la descripción de los fenómenos físicos que dan lugar a este comportamiento constituye una de nuestras líneas actuales de trabajo.

- Hemos caracterizado con GEANT4 el cabezal del acelerador Siemens ONCOR instalado en el HUVM operando en modo de fotones de 6 MV de energía nominal. Para ello hemos reproducido la geometría del cabezal hasta el mínimo detalle. Para modelar el colimador MLC-160 hemos desarrollado un algoritmo que, además, permite construir cualquier MLC cuya geometría se pueda caracterizar con el mismo conjunto de parámetros del MLC-160. Con nuestro modelado del haz primario de electrones, hemos conseguido reproducir las curvas de dosis relativa con un tolerancia del 2 %. Los factores de salida presentan una discrepancia máxima del 1,3 % con respecto a las medidas experimentales.
- Hemos desarrollado dos técnicas que incrementan la eficiencia computacional de la aplicación GEANT4 que se utiliza en el MGH para simular el cabezal de tratamiento con protones de dicha institución, funcionando en modo BBM. La primera técnica filtra el seguimiento de protones de acuerdo con restricciones puramente geométricas. La segunda consiste en simplificar el modelo geométrico de las cámaras monitoras. En un caso clínico típico, se mejora la eficiencia en un 35 %.
- Hemos simulado con GEANT4 la producción de neutrones y gammas de la nueva fuente del CNA. La producción de neutrones en el blanco de berilio se ha realizado a partir de resultados experimentales y su transporte posterior a través del tambor de refrigeración con GEANT4. La producción de gammas ha sido calculada totalmente con GEANT4 al no existir datos experimentales disponibles. A partir de los resultados

de las simulaciones, hemos concluido que la calidad de la fuente de neutrones es mayor con el haz de protones a 18 MeV.

- Hemos importado el modelo geométrico de un circuito microelectrónico biestable, detallado con precisión nanométrica, en nuestra aplicación GEANT4 usando el esquema GDML. Definiendo como volúmenes sensibles el drenador, fuente, canal y óxido de puerta de cada uno de los transistores de este circuito, hemos calculado la energía depositada en cada uno de ellos para diversos experimentos de irradiación previstos en el CNA. Dichos cálculos son la única alternativa a las medidas experimentales directas, que no pueden realizarse debido al tamaño microscópico de los elementos del biestable.
- Para la irradiación de circuitos microelectrónicos con partículas cargadas pesadas, hemos creado una aplicación GEANT4 para analizar la deposición de energía con precisión sub-micrométrica. Esta herramienta proporciona un modelo volumétrico de ionización que produce los datos de entrada (distribución de carga creada) para un simulador de transporte electrónico en circuitos microelectrónicos y, por lo tanto, de respuesta final de los mismos bajo irradiación.
- Hemos simulado el montaje de prueba del prototipo mini-SeD, que está siendo desarrollado en el Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad de Sevilla, incluyendo los campos eléctricos y magnéticos aplicados. Debido a la ausencia actual de modelos que simulen avalanchas de electrones a energías por debajo del keV, no ha sido posible reproducir satisfactoriamente la intensidad de flujo de electrones a través del plano del ánodo. Sin embargo, la distribución espacial del flujo de electrones obtenida con GEANT4 es compatible con los resultados experimentales.

10.2. Conclusions

From the works presented in this Ph.D. thesis, the following summary and conclusions can be drawn:

- We have developed a stand-alone code intended to read and write phase-space files following the IAEA format (*IAEAphsp*) with GEANT4 applications, keeping particle correlations. This work also includes utilities for GEANT4 applications of special interest in radiotherapy.
- We have developed revised versions of the nuclear emission and de-excitation models implemented in GEANT4. A satisfactory overall reproduction of the experimental data set compiled by the IAEA benchmark has been achieved.

- GEANT4 has been our virtual laboratory to perform the feasibility analysis of a novel system designed for the verification of complex radiotherapy treatments based on the silicon strip detector technology, concretely using a SSSSD. In such analysis, we have simulated these situations:
 - Calibration of the SSSSD in reference conditions and a performance study in penumbra conditions. The SSSSD was placed in a phantom made up of solid-water slabs in both cases.
 - Calibration of the SSSSD and study of the dose deposition in the strips considering the treatment setup, that is, placed within a polyethylene cylindrical phantom with parallel orientation with respect to the beam direction.

The validation in water agrees with Pinnacle³ TPS calculations within a tolerance of 3%. However, we have observed that under certain conditions the dose calculated with GEANT4 is lower than the experimental values obtained with the calibrated signal of the SSSSD. For the cylindrical phantom case, we have found a constant factor between both results, which allows the description of the detector performance by means of using the suitable calibration for this setup. Hence, these results show the feasibility of this detection system to verify complex radiotherapy treatments. Nevertheless, the improvement of the description of the physical phenomena causing this behaviour is one of our current research activities.

- We have assessed the GEANT4 simulation of the Siemens ONCOR treatment head, installed at the HUVVM, in the 6 MV photon mode. We have reproduced the treatment head geometry to the smallest details. To model the MLC-160 we have created an algorithm which, in addition, can reproduce any MLC which geometry can be characterised with the MLC-160 parameter set. With our primary electron beam model, the relative dose curves calculated with Monte Carlo agreed with the experimental results within 2%. The OF have been obtained with a maximum discrepancy of 1.3%.
- We have developed two techniques to increase the computational efficiency of the GEANT4 application used at MGH to simulate their proton therapy treatment head in BBM mode. The first technique filters the tracking of protons according to purely geometrical restrictions. The second technique is a simplification of the monitor chamber geometric model. In a typical clinical case, a 35% improvement of the computational efficiency is achieved.
- We have simulated with GEANT4 the neutron and gamma production of the new source installed at CNA. The neutron production in the

beryllium target was calculated according to experimental data and its transport through the refrigeration drum with GEANT4. The gamma production was calculated with GEANT4, since no experimental data were available. From the simulation results, we have concluded that the neutron source quality is higher with the 18-MeV proton beam.

- We have imported the geometric model of a flip-flop microelectronic circuit, detailed with nanometric precision, in our GEANT4 application by means of the GDML schema. We have defined as sensitive volumes the drain, source, channel and gate oxide for each transistor of the flip-flop; thus, we have calculated the energy deposited in each volume for several irradiation experiments planned at CNA. Such calculations are the only alternative to experimental measurements, which cannot be realized due to the microscopic size of the flip-flop elements.
- For the irradiation of microelectronic circuits with heavy-charged particles, we have created a GEANT4 application to analyse the energy deposition at sub-micrometric scale. This tool provides a volumetric ionisation model which produces the input data (generated charge distribution) used by a simulator of electronic transport in microelectronic devices and, therefore, final response of such devices under irradiation.
- We have simulated the testing setup of the mini-SeD prototype, which is being developed at the Department of Atomic, Molecular and Nuclear Physics of the University of Seville, including the electric and magnetic fields. Due to the current absence of models simulating electron avalanches at energies below keV, it has not been possible to reproduce successfully the electron flux intensity through the anode plane. However, the spatial distribution of the electron flux obtained with GEANT4 is compatible with the experimental results.

10.3. Perspectivas futuras

Los trabajos presentados en esta memoria constituyen la apertura de nuevas líneas de investigación en nuestro grupo, con las siguientes perspectivas inmediatas:

- Con el objetivo de utilizar GEANT4 como un código válido para la verificación de tratamientos complicados de radioterapia, nuestra intención es trabajar en los siguientes aspectos:
 - Implementación de técnicas de reducción de varianza en nuestras simulaciones que permitan incrementar la eficiencia de las mismas. Por ejemplo, la implementación del DBS es fundamental para

simular con alta eficiencia computacional los tratamientos de radioterapia convencional con fotones.

- Los parámetros del haz primario de electrones del modo de fotones de 6 MV de energía nominal del acelerador Siemens ONCOR han sido obtenidos de manera aproximada debido al elevado tiempo de CPU requerido para realizar un ajuste preciso con una estadística superior. En este sentido, el incremento de la eficiencia computacional de las simulaciones permitirá realizar dicho ajuste en un tiempo menor.
 - Asimismo, es fundamental implementar en nuestras simulaciones un sistema de adquisición de datos con el que, a partir de la imagen TAC de un paciente, se pueda generar el correspondiente volumen *voxelizado* en la simulación que permita calcular la dosis recibida por cada tejido.
 - Los aceleradores clínicos del HUVM pueden funcionar con diferentes valores de energía nominal de haz tanto en modo de fotones como de electrones. En este sentido, es especialmente interesante simular el modo de fotones de 15 MV, ya que presenta una contribución no deseada de neutrones producidos por reacciones fotonucleares tanto en los sistemas de colimación como en el blindaje del acelerador. A diferencia de GEANT4, los códigos Monte Carlo considerados estándares en radioterapia no incluyen la física necesaria para simular la producción y el transporte de neutrones. Por ello, una futura línea de trabajo consiste en reproducir, con la mayor exactitud posible, la geometría completa tanto del acelerador clínico como de elementos presentes en la sala de tratamiento. Además, también se prevé incorporar a nuestra aplicación los modos de tratamiento de radioterapia con electrones.
- Los resultados satisfactorios del estudio de viabilidad del nuevo sistema de verificación de tratamientos complejos de radioterapia, basado en la tecnología de detectores de tiras de silicio, abren también nuevas posibilidades de desarrollo futuro. Principalmente, se trabajará en:
- Realizar un modelo más preciso para la calibración del cálculo de dosis tanto experimental como mediante GEANT4. Hasta ahora hemos considerado factores de calibración constantes. Sin embargo, es interesante evaluar la pequeña contribución de borde debida al marco de PCB del detector y, por otro lado, términos relacionados con la orientación con respecto al haz del detector.
 - Introducir en la simulación GEANT4 un modelo de respuesta del detector que permita, en primer lugar, explicar la diferencia

observada entre la señal experimental y la dosis calculada por Monte Carlo y, en segundo lugar, predecir la respuesta de este detector u otros similares colocados con diversas orientaciones respecto al haz.

- Para realizar cálculos microdosimétricos con GEANT4 es importante incluir modelos válidos de transporte de partículas a través de la materia a escala nanométrica. En este sentido, la colaboración GEANT4-DNA está desarrollando actualmente modelos de transporte a escala nanométrica en agua, puesto que el objetivo de este desarrollo está relacionado con la radiobiología. Se prevé realizar un trabajo análogo tanto para el silicio como para gases, permitiendo así la simulación del efecto avalancha presente en el mini-SeD. Dichos desarrollos se realizarán en coordinación con el proyecto GEANT4-DNA.

Bibliografía

- AGOSTINELLI S. ET AL. 2003. GEANT4—a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 506(3), pp. 250–303.
- ALLISON J. ET AL. 2006. Geant4 developments and applications. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 53(1), pp. 270–278.
- ALLISY A. ET AL. 1993. Stopping powers and ranges for protons and alpha particles. Report 49, International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU).
- ALPAT B., MENICHELLI M., CARAFFINI D., PETASECCA M. y RENZI F. 2010. Background estimation in MXGS apparatus on International Space Station. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 57(4), pp. 2010–2016.
- ANDREO P. 1991. Monte Carlo techniques in medical radiation physics. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 36(7), pp. 861–920.
- ANISENKOV A., IGNATOV F., PIROGOV S., SIBIDANOV A., VIDUK S. y ZAYTSEV A. 2010. CMD-3 detector offline software development. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 219(3), p. 032027.
- APOSTOLAKIS J., BAGULYA A., ELLES S., IVANCHENKO V. N., JACQUEMIER J., MAIRE M., TOSHITO T. y URBAN L. 2010. Validation and verification of Geant4 standard electromagnetic physics. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 219(3), p. 032044.
- APOSTOLAKIS J., BAGULYA A., ELLES S., IVANCHENKO V. N., KADRI O., MAIRE M. y URBAN L. 2008. The performance of the Geant4 standard EM package for LHC and other applications. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 119(3), p. 032004.
- ARCE P., RATO P., CAÑADAS M. y LAGARES J. I. 2008. GAMOS: A Geant4-based easy and flexible framework for nuclear medicine applications. En *Nuclear Science Symposium Conference Record, 2008. NSS '08. IEEE*, pp. 3162–3168.
- ARRÁNS R., MIRAS H., ORTIZ-SEIDEL M., TERRÓN J. A., MACÍAS J. y ORTIZ-LORA A. 2009. Dosimetría con películas radiocrómicas. *Revista de Física Médica*, vol. 10(2), pp. 83–104.
- ASO T., KIMURA A., TANAKA S., YOSHIDA H., KANEMATSU N., SASAKI T. y AKAGI T. 2005. Verification of the dose distributions with GEANT4 simulation for proton therapy. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 52(4), pp. 896–901.
- BANERJEE S. 2010. Validation of Geant4 hadronic physics models at intermediate energies. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 219(3), p. 032002.

- BANERJEE S., BROWN D. N., CHEN C., CÔTÉ D., DUBOIS-FELSMANN G. P., GAPONENKO I., KIM P. C., LOCKMAN W. S., NEAL H. A., SIMI G., TELNOV A. V. y WRIGHT D. H. 2008. Validating Geant4 versions 7.1 and 8.3 against 6.1 for BaBar. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 119(3), p. 032007.
- BATTISTONI G., MURARO S., SALA P. R., CERUTTI F., FERRARI A., ROESLER S., FASSÒ A. y RANFT J. 2007. The FLUKA code: Description and benchmarking. *AIP Conference Proceedings*, vol. 896, pp. 31–49.
- BECKER J., BRUNCKHORST E. y SCHMIDT R. 2007. Photoneutron production of a Siemens Primus linear accelerator studied by Monte Carlo methods and a paired magnesium and boron coated magnesium ionization chamber system. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 52(21), p. 6375.
- BEDNARCZYK P. ET AL. 2007. Application of diamond detectors in tracking of heavy ion slowed down radioactive beams. *Acta Physica Polonica B*, vol. 38(4), pp. 1293–1296.
- BERGER M. J. 1963. Monte Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles. En *Methods in Computational Physics* (editado por B. Alder, S. Fernbach y M. Rotenberg), vol. 1, pp. 135–215. Academic, New York, EE. UU.
- BERNAS M. ET AL. 2003. Fission-residues produced in the spallation reaction $^{238}\text{U} + p$ at 1 A GeV. *Nuclear Physics A*, vol. 725, pp. 213–253.
- BERNAS M. ET AL. 2006. Very heavy fission fragments produced in the spallation reaction $^{238}\text{U} + p$ at 1 A GeV. *Nuclear Physics A*, vol. 765(1-2), pp. 197–210.
- BETHGE K., KRAFT G., KREISLER P. y WALTER G. 2004. *Medical Applications of Nuclear Physics*. Biological and Medical Physics, Biomedical Engineering. Springer, Heidelberg, Alemania.
- BEWLEY D. K. 1985. The 8 MeV linear accelerator at the MRC Cyclotron Unit Hammersmith Hospital, London. *British Journal of Radiology*, vol. 58(687), pp. 213–217.
- BOCCI A., CORTÉS-GIRALDO M. A., GALLARDO M. I., ESPINO J. M., ARRÁNS R., ALVAREZ M. A. G., ABOU-HAÏDAR Z., QUESADA J. M., PÉREZ VEGA-LEAL A. y PÉREZ NIETO F. J. 2011. Silicon strip detector for a novel 2D dosimetric method for radiotherapy treatment verification. *Enviado a Nuclear Instruments and Methods A*.
- BÖHLEN T. T., CERUTTI F., DOSANJH M., FERRARI A., GUDOWSKA I., MAIRANI A. y QUESADA J. M. 2010. Benchmarking nuclear models of FLUKA and GEANT4 for carbon ion therapy. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 55(19), pp. 5833–5847.
- BOHR N. y WHEELER J. A. 1939. The mechanism of nuclear fission. *Phys. Rev.*, vol. 56(5), pp. 426–450.
- BONDORF J. P., BOTVINA A. S., ILJINOV A. S., MISHUSTIN I. N. y SNEPPEN K. 1995. Statistical multifragmentation of nuclei. *Physics Reports*, vol. 257(3), pp. 133–221.
- BOUTACHKOV P., NAQVI F., KOENIG W., GREGOR E., PROKOPOWICZ W., GÓRSKA M., WOLLERSHEIM H. J., SCHAFFNER H., ABOU-HAÏDAR Z. y ALVAREZ M. A. G. 2009. Fast timing with DSSSD detectors. Scientific Report FAIR-EXPERIMENTS-30, GSI.
- BRÄUNIG D. y WULF F. 1994. Atomic displacement and total ionizing dose damage in semiconductors. *Radiation Physics and Chemistry*, vol. 43(1-2), pp. 105–127.

- BREDE H., DIETZE G., KUDO K., SCHREWE U., TANCU F. y WEN C. 1989. Neutron yields from thick Be targets bombarded with deuterons or protons. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 274(1-2), pp. 332–344.
- BROWN F. B., BARRETT R. F., BOOTH T. E., BULL J. S., COX L. J., FOSTER R. A., GOORLEY T. J., MOSTELLER R. D., POST S. E., PRAEL R. E., SELCOW E. C., SOOD A. y SWEZEY J. 2002. MCNP version 5. Technical Report LA-UR-02-3935, Los Alamos National Laboratory (LANL), Los Alamos, New Mexico, EE. UU.
- BUDZANOWSKI A. ET AL. 2008. Competition of coalescence and “fireball” processes in nonequilibrium emission of light charged particles from p+Au collisions. *Phys. Rev. C*, vol. 78(2), p. 024603.
- BURKHARDT H., GRICHINE V. M., GUMPLINGER P., IVANCHENKO V. N., KOKOULIN R. P., MAIRE M. y URBAN L. 2005. Geant4 standard electromagnetic physics package. En *Proc. of MC2005*. American Nuclear Society, LaGrange park, IL, Chattanooga, Tennessee, USA.
- CADMAN P., BASSALOW R., SIDHU N. P. S., IBBOTT G. y NELSON A. 2002. Dosimetric considerations for validation of a sequential IMRT process with a commercial treatment planning system. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 47(16), pp. 3001–3010.
- CAPOTE R., JERAJ R., MA C.-M., ROGERS D. W. O., SÁNCHEZ-DOBLADO F., SEMPAU J., SEUNTJENS J. y SIEBERS J. V. 2006. Phase-space database for external beam radiotherapy. Technical Report INDC(NDS)-0484, IAEA.
- CHAMPION C., INCERTI S., AOUCHICHE H. y OUBAZIZ D. 2009. A free-parameter theoretical model for describing the electron elastic scattering in water in the Geant4 toolkit. *Radiation Physics and Chemistry*, vol. 78(9), pp. 745–750.
- CHANG W. 1992. A framework for understanding fast-neutron induced defects in SiO₂ MOS structures. *Journal of Electronic Materials*, vol. 21, pp. 693–699.
- CHATTERJEE A., MURTHY K. H. N. y GUPTA S. K. 1981. Optical reaction cross-sections for light projectiles. *Pramana*, vol. 16(5), pp. 391–402.
- CHAVIE S., FRANCIS Z., GUATELLI S., INCERTI S., MASCIALINO B., MORETTO P., NIEMINEN P. y PIA M. G. 2007. Geant4 physics processes for microdosimetry simulation: Design foundation and implementation of the first set of models. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 54(6), pp. 2619–2628.
- CHAVIE S., GUATELLI S., IVANCHENKO V., LONGO F., MANTERO A., MASCIALINO B., NIEMINEN P., PANDOLA L., PARLATI S., PERALTA L., PIA M., PIERGENTILI M., RODRIGUES P., SALICETI S. y TRINDADE A. 2004. Geant4 low energy electromagnetic physics. En *Nuclear Science Symposium Conference Record, 2004 IEEE*, vol. 3, pp. 1881–1885.
- CHETTY I. J., CURRAN B., CYGLER J. E., DEMARCO J. J., EZZELL G., FADDEGON B. A., KAWRAKOW I., KEALL P. J., LIU H., MA C.-M. C., ROGERS D. W. O., SEUNTJENS J., SHEIKH-BAGHERI D. y SIEBERS J. V. 2007. Report of the AAPM Task Group no. 105: Issues associated with clinical implementation of Monte Carlo-based photon and electron external beam treatment planning. *Medical Physics*, vol. 34(12), pp. 4818–4853.

- CHYTRACEK R., MCCORMICK J., POKORSKI W. y SANTIN G. 2006. Geometry description markup language for physics simulation and analysis applications. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 53(5), pp. 2892–2896.
- CIRRONE G. A. P., CUTTONE G., GUATELLI S., LO NIGRO S., MASCIALINO B., PIA M. G., RAFFAELE L., RUSSO G. y SABINI M. G. 2005. Implementation of a new Monte Carlo-GEANT4 simulation tool for the development of a proton therapy beam line and verification of the related dose distributions. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 52(1), pp. 262–265.
- CIRRONE G. A. P., CUTTONE G., ROSA F. D., PANDOLA L., ROMANO F. y ZHANG Q. 2010. Validation of the Geant4 electromagnetic photon cross-sections for elements and compounds. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 618(1-3), pp. 315–322.
- CORNELIUS I. M. y ROSENFELD A. B. 2004. Verification of Monte Carlo calculations in fast neutron therapy using silicon microdosimetry. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 51(3), pp. 873–877.
- CORTÉS-GIRALDO M. A., QUESADA J. M. y GALLARDO M. I. 2010. GEANT4 application for the simulation of the head of a Siemens Primus linac. *AIP Conference Proceedings*, vol. 1231(1), pp. 209–210.
- CORTÉS-GIRALDO M. A., QUESADA J. M., GALLARDO M. I. y CAPOTE R. 2009. Geant4 interface to work with IAEA phase-space files. Online. Disponible en <http://www-nds.iaea.org/phsp/Geant4> (último acceso, Marzo, 2011).
- COSSUTTI F. 2010. Tuning and optimization of the CMS simulation software. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 219(3), p. 032005.
- CUCINOTTA F. A., KATZ R. y WILSON J. W. 1998. Radial distribution of electron spectra from high-energy ions. *Radiation and Environmental Biophysics*, vol. 37, pp. 259–265.
- CUCINOTTA F. A., MANUEL F. K., JONES J., ISZARD G., MURREY J., DJOJONEGRO B. y WEAR M. 2001. Space radiation and cataracts in astronauts. *Radiation Research*, vol. 156(5), pp. 460–466.
- CULLEN D. E., HUBBELL J. H. y KISSEL L. 1991. EPDL97: the Evaluated Photon Data Library, '97 version. Report UCRL-50400, Lawrence Livermore National Laboratory.
- DEASY J. O. 1998. A proton dose calculation algorithm for conformal therapy simulations based on Molière's theory of lateral deflections. *Medical Physics*, vol. 25(4), pp. 476–483.
- DELANEY T. F. y KOOY H. M., editores. 2008. *Proton and Charged Particle Radiotherapy*. Lippincott Williams & Wilkins (Wolters Kluwer Health), Philadelphia, Pennsylvania, EE. UU.
- DEMENTYEV A. V. y SOBOLEVSKY N. M. 1999. SHIELD – Universal Monte Carlo hadron transport code: scope and applications. *Radiation Measurements*, vol. 30(5), pp. 553–557.
- DOSTROVSKY I., FRAENKEL Z. y FRIEDLANDER G. 1959. Monte Carlo calculations of nuclear evaporation processes. III. Applications to low-energy reactions. *Phys. Rev.*, vol. 116(3), pp. 683–702.

- DROUART A., MAZUR C., ALAMANOS N., AUGER F., BESSON P., BOUGAMONT E., BOURGEOIS P., LOBO G., POLLACCO E. C. y RIALLOT M. 2002. A gas secondary electron detector. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 477(1-3), pp. 401-405.
- ENGLAND T. R. y RIDER B. F. 1993. Evaluation and compilation of fission product yields. Informe Técnico LA-UR-94-3106, ENDF-349, Los Alamos National Laboratory (LANL).
- ENQVIST T. ET AL. 2001. Isotopic yields and kinetic energies of primary residues in 1 A GeV $^{208}\text{Pb}+p$ reactions. *Nuclear Physics A*, vol. 686(1-4), pp. 481-524.
- ERSMARK T., CARLSON P., DALY E., FUGLESANG C., GUDOWSKA I., LUND-JENSEN B., NIEMINEN P., PEARCE M. y SANTIN G. 2007. Influence of geometry model approximations on Geant4 simulation results of the Columbus/ISS radiation environment. *Radiation Measurements*, vol. 42(8), pp. 1342-1350.
- FADDEGON B. A., ASAI M., PERL J., ROSS C., SempaU J., TINSLAY J. y SALVAT F. 2008a. Benchmarking of Monte Carlo simulation of bremsstrahlung from thick targets at radiotherapy energies. *Medical Physics*, vol. 35(10), pp. 4308-4317.
- FADDEGON B. A., KAWRAKOW I., KUBYSHIN Y., PERL J., SempaU J. y URBAN L. 2009. The accuracy of EGSnrc, Geant4 and PENELOPE Monte Carlo systems for the simulation of electron scatter in external beam radiotherapy. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 54(20), pp. 6151-6163.
- FADDEGON B. A., PERL J. y ASAI M. 2008b. Monte Carlo simulation of large electron fields. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 53(5), pp. 1497-1510.
- FAGEEHA O., HOWARD J. y BLOCK R. C. 1994. Distribution of radial energy deposition around the track of energetic charged particles in silicon. *Journal of Applied Physics*, vol. 75(5), pp. 2317-2321.
- FASSÒ A., FERRARI A., RANFT J. y SALA P. R. 2005. FLUKA: a multi-particle transport code. Informe Técnico CERN-2005-10, INFN/TC-05/11, SLAC-R-773, CERN.
- FEOFILOV G. A., STOLYAROV O. I., TSIMBAL F. A., VALIEV F. F. y VINOGRADOV L. I. 1995. Position-sensitive MCP-based detectors with high timing resolution: some results and perspectives. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 367(1-3), pp. 402-407.
- FERMI E. 1950. High energy nuclear events. *Progress of Theoretical Physics*, vol. 5(4), pp. 570-583.
- FERNÁNDEZ B. 2010. Desarrollo de un sistema de trazado de partículas nucleares para futuros aceleradores. Trabajo de Investigación. Universidad de Sevilla.
- FIPPEL M. y SOUKUP M. 2004. A Monte Carlo dose calculation algorithm for proton therapy. *Medical Physics*, vol. 31(8), pp. 2263-2273.
- FOLGER G., IVANCHENKO V. N. y WELLISCH J. P. 2004. The binary cascade. Nucleon nuclear reactions. *The European Physical Journal A - Hadrons and Nuclei*, vol. 21, pp. 407-417.

- FRANCIS Z., INCERTI S., CAPRA R., MASCIALINO B., MONTAROU G., STEPAN V. y VILLAGRASA C. 2011. Molecular scale track structure simulations in liquid water using the Geant4-DNA Monte-Carlo processes. *Applied Radiation and Isotopes*, vol. 69(1), pp. 220–226.
- FURIHATA S., NIITA K., MEIGO S., IKEDA Y. y MAEKAWA F. 2001. The GEM code - A simulation program for the evaporation and fission process of an excited nucleus. Informe Técnico JAERI-Data/Code 2001-015, Japan Atomic Energy Research Institute (JAERI).
- GARCÍA-LÓPEZ J., AGER F. J., BARBADILLO-RANK M., MADRIGAL F. J., ONTALBA M. A., RESPALDIZA M. A. y YNSA M. D. 2000. CNA: The first accelerator-based IBA facility in Spain. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 161-163, pp. 1137–1142.
- GARCÍA-LÓPEZ J., ORTEGA-FELIU I., MORILLA Y. y FERRERO A. 2008. The new Cyclone 18/9 beam transport line at the CNA (Sevilla) for high energy PIXE applications. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 266(8), pp. 1583–1586.
- GARNY S., LEUTHOLD G., MARES V., PARETZKE H. G. y RUHM W. 2009. GEANT4 transport calculations for neutrons and photons below 15 MeV. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 56(4), pp. 2392–2396.
- GARUTTI E. 2009. CALICE scintillator HCAL - E γ electromagnetic and hadronic shower analysis. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 160(1), p. 012077.
- GARZÓN CAMACHO A. 2010. Proyecto SEDA: Investigación, diseño y desarrollo de un preamplificador de señal mixta para el detector de partículas “mini Secondary electron Detector” (mini-SeD). Proyecto Fin de Carrera. Universidad de Sevilla.
- GILBERT A. y CAMERON A. G. W. 1965. A composite nuclear-level density formula with shell corrections. *Canadian Journal of Physics*, vol. 43(8), pp. 1446–1496.
- GODET O., SIZUN P., BARRET D., MANDROU P., CORDIER B., SCHANNE S. y REMOUÉ N. 2009. Monte-Carlo simulations of the background of the coded-mask camera for X- and gamma-rays on-board the Chinese-French GRB mission SVOM. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 603(3), pp. 365–371.
- GREVILLOT L., FRISSON T., MANEVAL D., ZAHRA N., BADEL J.-N. y SARRUT D. 2011. Simulation of a 6 MV Elekta Precise linac photon beam using GATE/GEANT4. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 56(4), pp. 903–918.
- GRIFFIN J. J. 1966. Statistical model of intermediate structure. *Phys. Rev. Lett.*, vol. 17(9), pp. 478–481.
- GUDIMA K. K., MASHNIK S. G. y TONEEV V. D. 1983. Cascade-exciton model of nuclear reactions. *Nuclear Physics A*, vol. 401(2), pp. 329–361.
- GUERTIN A. ET AL. 2005. Neutron and light-charged-particle productions in proton-induced reactions on ^{208}Pb at 62.9 MeV. *The European Physical Journal A - Hadrons and Nuclei*, vol. 23, pp. 49–60.
- GUPTA S. K. 1981. Two-component equilibration in the exciton model of nuclear reactions. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, vol. 303, pp. 329–333.

- HAMM R. N., TURNER J. E., WRIGHT H. A. y RITCHIE R. H. 1979. Heavy-ion track structure in silicon. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 26(6), pp. 4892–4895.
- HEIKKINEN A., BOUDARD A., KAITANIEMI P. y FOLGER G. 2010. A Geant4 physics list for spallation and related nuclear physics applications based on INCL and ABLA models. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 219(3), p. 032043.
- HEIKKINEN A., KAITANIEMI P. y BOUDARD A. 2008. Implementation of INCL cascade and ABLA evaporation codes in Geant4. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 119(3), p. 032024.
- HEIKKINEN A., STEPANOV N. y WELLISCH H. P. 2003. Bertini intra-nuclear cascade implementation in Geant4. En *Proc. CHEP'03*. La Jolla, California, USA.
- HERBACH C.-M., HILSCHER D., JAHNKE U., TISHCHENKO V., GALIN J., LETOURNEAU A., PÉGHAIRE A., FILGES D., GOLDENBAUM F., PIENKOWSKI L., SCHRÖDER W. U. y TÖKE J. 2006. Charged-particle evaporation and pre-equilibrium emission in 1.2 GeV proton-induced spallation reactions. *Nuclear Physics A*, vol. 765(3-4), pp. 426–463.
- HONG L., GOITEIN M., BUCCIOLINI M., COMISKEY R., GOTTSCHALK B., ROSENTHAL S., SERAGO C. y URIE M. 1996. A pencil beam algorithm for proton dose calculations. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 41(8), pp. 1305–1330.
- HOTTA K., KOHNO R., TAKADA Y., HARA Y., TANSHO R., HIMUKAI T., KAMEOKA S., MATSUURA T., NISHIO T. y OGINO T. 2010. Improved dose-calculation accuracy in proton treatment planning using a simplified Monte Carlo method verified with three-dimensional measurements in an anthropomorphic phantom. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 55(12), pp. 3545–3556.
- HOWARD J. W., JR., BLOCK R. C., DUSSAULT H., STAPOR W. J., McDONALD P. T., KNUDSON A. R. y PINTO M. R. 1994. A novel approach for measuring the radial distribution of charge in a heavy-ion track. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 41(6), pp. 2077–2084.
- HUGHES H. L. y BENEDETTO J. M. 2003. Radiation effects and hardening of MOS technology: devices and circuits. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 50(3), pp. 500–521.
- HURTADO S., GARCÍA-LEÓN M. y GARCÍA-TENORIO R. 2004. GEANT4 code for simulation of a germanium gamma-ray detector and its application to efficiency calibration. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 518(3), pp. 764–774.
- HUSEMANN U., MECHNICH J. y SALZBURGER A. 2010. Simulation strategies using FATRAS and Geant4 for a future upgrade of the ATLAS tracking detectors. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 219(3), p. 032021.
- ICRU. 1976. Determination of absorbed dose in a patient irradiated by beams of X or gamma rays in radiotherapy procedures. Report 24, International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU).
- ILJINOV A. S., KAZARNOVSKY M. V. y PARYEV E. Y. 1994. *Intermediate Energy Nuclear Physics*. CRC Press.

- INCERTI S., BALDACCHINO G., BERNAL M., CAPRA R., CHAMPION C., FRANCIS Z., GUATELLI S., GUÈYE P., MANTERO A., MASCIALINO B., MORETTO P., NIEMINEN P., ROSENFELD A., VILLAGRASA C. y ZACHARATOU C. 2010a. The Geant4-DNA project. *Int. J. Model. Simul. Sci. Comput.*, vol. 1(2), pp. 157–178.
- INCERTI S., SEZNEC H., SIMON M., BARBERET P., HABCHI C. y MORETTO P. 2009. Monte Carlo dosimetry for targeted irradiation of individual cells using a microbeam facility. *Radiation Protection Dosimetry*, vol. 133(1), pp. 2–11.
- INCERTI S. ET AL. 2010b. Comparison of GEANT4 very low energy cross section models with experimental data in water. *Medical Physics*, vol. 37(9), pp. 4692–4708.
- INGUIMBERT C., DUZELLIER S. y ECOFFET R. 2002. Contribution of GEANT4 to the determination of sensitive volumes in case of high-integrated RAMs. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 49(3), pp. 1480–1485.
- IVANCHENKO V. 2006. Combined cross sections and elastic scattering. En *11th Geant4 Collaboration Workshop and Users Conference*. Lisbon, Portugal.
- IVANCHENKO V., APOSTOLAKIS J., FOLGER G., GRICHINE V., HOWARD A., IVANTCHENKO A., KOSOV M., RIBON A., UZHINKSY V., BENERJEE S., YARBA J., CORTES M., QUESADA J. M., KOI T. y WRIGHT D. 2008. Hadronic physics in Geant4: Improvements and status for LHC start. En *XII Advanced Computing and Analysis Techniques in Physics Research* (editado por T. Speer, F. Carminati y M. Werlen), vol. ACAT08 de *Proceedings of Science*, p. 111. SISSA, Erice (Italy).
- IVANCHENKO V. N., KADRI O., MAIRE M. y URBAN L. 2010. Geant4 models for simulation of multiple scattering. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 219(3), p. 032045.
- JÄKEL O. 2010. Radiotherapy with protons and ion beams. *AIP Conference Proceedings*, vol. 1231(1), pp. 3–40.
- JAN S. ET AL. 2004. GATE: a simulation toolkit for PET and SPECT. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 49(19), pp. 4543–4561.
- JEMAL A., BRAY F., CENTER M. M., FERLAY J., WARD E. y FORMAN D. 2011. Global cancer statistics. *CA: A Cancer Journal for Clinicians*, vol. 61(2), pp. 69–90.
- KALBACH-WALKER C. 2001. PRECO-2000 exciton model preequilibrium code with direct reactions. Online. Disponible en <http://www.nndc.bnl.gov/nndcscr/model-codes/preco-2000/> (último acceso, Marzo, 2011).
- KANEMATSU N., AKAGI T., TAKATANI Y., YONAI S., SAKAMOTO H. y YAMASHITA H. 2006. Extended collimator model for pencil-beam dose calculation in proton radiotherapy. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 51(19), pp. 4807–4817.
- KANEMATSU N., KOMORI M., YONAI S. y ISHIZAKI A. 2009. Dynamic splitting of Gaussian pencil beams in heterogeneity-correction algorithms for radiotherapy with heavy charged particles. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 54(7), pp. 2015–2027.
- KAWRAKOW I. 2000. Accurate condensed history Monte Carlo simulation of electron transport. I. EGSnrc, the new EGS4 version. *Medical Physics*, vol. 27(3), pp. 485–498.
- KAWRAKOW I., MAINEGRA-HING E., ROGERS D. W. O., TESSIER F. y WALTERS B. R. B. 2009. The EGSnrc code system: Monte Carlo simulation of electron and photon transport. Technical Report PIRS-701, National Research Council of Canada, Ottawa, Canada.

- KIRYUNIN A. E., OBERLACK H., SALIHAGIĆ D., SCHACHT P. y STRIZENEC P. 2009. GEANT4 physics evaluation with testbeam data of the ATLAS hadronic end-cap calorimeter. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 160(1), p. 012075.
- KNOLL G. F. 2000. *Radiation detection and measurements*. John Wiley and Sons, cop., New York, NY, EE. UU., 3^a edición.
- KOBAYASHI A. S., STERNBERG A. L., MASSENGILL L. W., SCHRIMPF R. D. y WELLER R. A. 2004. Spatial and temporal characteristics of energy deposition by protons and alpha particles in silicon. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 51(6), pp. 3312–3317.
- KOCH N., NEWHAUSER W. D., TITT U., GOMBOS D., COOMBES K. y STARKSCHALL G. 2008. Monte Carlo calculations and measurements of absorbed dose per monitor unit for the treatment of uveal melanoma with proton therapy. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 53(6), pp. 1581–1594.
- KOHNO R., TAKADA Y., SAKAE T., TERUNUMA T., MATSUMOTO K., NOHTOMI A. y MATSUDA H. 2003. Experimental evaluation of validity of simplified Monte Carlo method in proton dose calculations. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 48(10), pp. 1277–1288.
- KOI T. 2008. New native QMD code in Geant4. En *Nuclear Science Symposium Conference Record, 2008. NSS '08. IEEE*. IEEE, Dresden, Germany.
- KRÄMER M., JÄKEL O., HABERER T., KRAFT G., SCHARDT D. y WEBER U. 2000. Treatment planning for heavy-ion radiotherapy: physical beam model and dose optimization. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 45(11), pp. 3299–3317.
- LARSSON S., SVENSSON R., GUDOWSKA I., IVANCHENKO V. y BRAHME A. 2005. Radiation transport calculations for 50 MV photon therapy beam using the Monte Carlo code GEANT4. *Radiation Protection Dosimetry*, vol. 115(1-4), pp. 503–507.
- LE POSTOLLEC A., INCERTI S., DOBRIJEVIC M., DESORGHIER L., SANTIN G., MORETTO P., VANDENABEELE-TRAMBOUZE O., COUSSOT G., DARTNELL L. y NIEMINEN P. 2009. Monte Carlo simulation of the radiation environment encountered by a biochip during a space mission to Mars. *Astrobiology*, vol. 9(3), pp. 311–323.
- LEAL A., SÁNCHEZ-DOBLADO F., ARRÁNS R., CAPOTE R., LAGARES J. I., PAVÓN E. C. y ROSELLÓ J. 2004a. MLC leaf width impact on the clinical dose distribution: a Monte Carlo approach. *International Journal of Radiation Oncology*Biophysics*, vol. 59(5), pp. 1548–1559.
- LEAL A., SÁNCHEZ-DOBLADO F., PERUCHA M., CARRASCO E., RINCÓN M., ARRÁNS R. y BERNAL C. 2004b. Monte Carlo simulation of complex radiotherapy treatments. *Computing in Science Engineering*, vol. 06(4), pp. 60–68.
- LECHNER A., IVANCHENKO V. y KNOBLOCH J. 2010. Validation of recent Geant4 physics models for application in carbon ion therapy. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 268(14), pp. 2343–2354.
- LEMIRANI R., M. R., KUDRYAVTSEV V. A., DE JESUS M., GERBIER G. y SPOONER N. J. C. 2006. Low-energy neutron propagation in MCNPX and GEANT4. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 560(2), pp. 454–459.

- LERAY S. ET AL. 2002. Spallation neutron production by 0.8, 1.2, and 1.6 GeV protons on various targets. *Phys. Rev. C*, vol. 65(4), p. 044621.
- LEVIN W. P., KOOY H., LOEFFLER J. S. y DELANEY T. F. 2005. Proton beam therapy. *The British Journal of Cancer*, vol. 93(8), pp. 849–854.
- LI J. S., SHAHINE B., FOURKAL E. y MA C.-M. 2005. A particle track-repeating algorithm for proton beam dose calculation. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 50(5), pp. 1001–1010.
- LIANG E. 2010. Intense laser pair creation and applications. *High Energy Density Physics*, vol. 6(2), pp. 219–222.
- LJUNGVALL J. y NYBERG J. 2005. A study of fast neutron interactions in high-purity germanium detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 546(3), pp. 553–573.
- LOMAX A. J. ET AL. 2001. Intensity modulated proton therapy: A clinical example. *Medical Physics*, vol. 28(3), pp. 317–324.
- MA C.-M. y JIANG S. B. 1999. Monte Carlo modelling of electron beams from medical accelerators. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 44(12), pp. R157–R189.
- MASHNIK S. G., GUDIMA K. K., PRAEL R. E., SIERK A. J., BAZNAT M. I. y MOKHOV N. V. 2008. CEM03.03 and LAQGSM03.03 event generators for the MCNP6, MCNPX and MARS15 transport codes. Report LA-UR-08-2931, Los Alamos National Laboratory (LANL).
- MASHNIK S. G., SIERK A. J., GUDIMA K. K. y BAZNAT M. I. 2006. CEM03 and LAQGSM03 – new modeling tools for nuclear applications. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 41(1), pp. 340–351.
- MASSEY T. N., JACOBS D. K., AL-QURAIISHI S. I., GRIMES S. M., BRIENT C. E., HOWARD W. B. y YANCH J. C. 2002. Study of the Be(p,n) and Be(d,n) source reactions. *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. supp. 2, pp. 677–680.
- MATSUFUJI N., KOMORI M., SASAKI H., AKIU K., OGAWA M., FUKUMURA A., URAKABE E., INANIWA T., NISHIO T., KOHNO T. y KANAI T. 2005. Spatial fragment distribution from a therapeutic pencil-like carbon beam in water. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 50(14), pp. 3393–3403.
- METROPOLIS N. 1987. The beginning of the Monte Carlo method. En *1987 Special Issue dedicated to Stanislaw Ulam*, pp. 125–130. Los Alamos Science.
- METROPOLIS N. y ULAM S. 1949. The Monte Carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, vol. 44(247), pp. 335–341.
- MOKHOV N. V. 2010. Recent Mars15 developments: nuclide inventory, DPA and gas production. Technical Report Fermilab-Conf-10/518-APC, Fermilab, Batavia, Illinois, EE. UU.
- NAPOLITANI P., SCHMIDT K.-H., BOTVINA A. S., REJMUND F., TASSAN-GOT L. y VILLAGRASA C. 2004. High-resolution velocity measurements on fully identified light nuclides produced in ^{56}Fe +hydrogen and ^{56}Fe +titanium systems. *Phys. Rev. C*, vol. 70(5), p. 054607.

- NEUHAUSER W., KOCH N., HUMMEL S., ZIEGLER M. y TITT U. 2005. Monte Carlo simulations of a nozzle for the treatment of ocular tumours with high-energy proton beams. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 50(22), pp. 5229–5249.
- NIITA K., MATSUDA N., IWAMOTO Y., IWASE H., SATO T., NAKASHIMA H., SAKAMOTO Y. y SIHVER L. 2010. PHITS: particle and heavy ion transport code system, version 2.23. Informe Técnico JAEA-Data/Code 2010-022, JAEA.
- NIROOMAND-RAD A., BLACKWELL C. R., COURSEY B. M., GALL K. P., GALVIN J. M., MCLAUGHLIN W. L., MEIGOONI A. S., NATH R., RODGERS J. E. y SOARES C. G. 1998. Radiochromic film dosimetry: Recommendations of AAPM Radiation Therapy Committee Task Group 55. *Medical Physics*, vol. 25(11), pp. 2093–2115.
- OBE G., JOHANNES I., JOHANNES C., AMD G. REITZ K. H. y FACIUS R. 1997. Chromosomal aberrations in blood lymphocytes of astronauts after long-term space flights. *International Journal of Radiation Biology*, vol. 72(6), pp. 727–734.
- OMS. 2008. The global burden of disease: 2004 update. Informe técnico, Organización Mundial de la Salud (OMS), Ginebra, Suiza.
- OTTINI-HUSTACHE S., MAZUR C., AUGER F., MUSUMARRA A., ALAMANOS N., CAHAN B., GILLIBERT A., LAGOYANNIS A., MAILLARD O., POLLACCO E., SIDA J. L. y RIALLOT M. 1999. CATS, a low pressure multiwire proportionnal chamber for secondary beam tracking at GANIL. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 431(3), pp. 476–484.
- PAGANETTI H. 2004. Four-dimensional Monte Carlo simulation of time-dependent geometries. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 49(6), pp. N75–N81.
- PAGANETTI H. 2006. Monte Carlo calculations for absolute dosimetry to determine machine outputs for proton therapy fields. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 51(11), pp. 2801–2812.
- PAGANETTI H., JIANG H., LEE S.-Y. y KOOY H. M. 2004. Accurate Monte Carlo simulations for nozzle design, commissioning and quality assurance for a proton radiation therapy facility. *Medical Physics*, vol. 31(7), pp. 2107–2118.
- PAGANETTI H., JIANG H., PARODI K., SLOPSEMA R. y ENGELSMAN M. 2008. Clinical implementation of full Monte Carlo dose calculation in proton beam therapy. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 53(17), pp. 4825–4853.
- PALOMO F. R., MOGOLLÓN J. M., NÁPOLES J., GUZMÁN-MIRANDA H., VEGALEAL A. P., AGUIRRE M. A., MORENO P., MÉNDEZ C. y VÁZQUEZ DE ALDANA J. R. 2009. Pulsed laser SEU cross section measurement using coincidence detectors. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 56(4), pp. 2001–2007.
- PALOMO F. R., MORILLA Y., MOGOLLÓN J. M., GARCÍA-LÓPEZ J., LABRADOR J. A. y AGUIRRE M. A. 2010. Early works on the nuclear microprobe for microelectronics radiation tests at the CEICI. En *Proc. Int. Conf. on Nuclear Microprobe Technology and Applications*. Leipzig, Germany.
- PANCIN J., CHAMINADE T., DROUART A., FERNANDEZ B., KEBBIRI M., NAQVI F. y RIALLOT M. 2009. Secondary electrons detectors for beam tracking: micromegas and wire chamber. *Journal of Instrumentation*, vol. 4(12), p. P12012.

- PATRONIS N., KOKKORIS M., GIANTSOUDI D., PERDIKAKIS G., PAPADOPOULOS C. T. y VLASTOU R. 2007. Aspects of GEANT4 Monte-Carlo calculations of the BC501A neutron detector. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 578(1), pp. 351–355.
- PENA J., GONZÁLEZ-CASTAÑO D. M., GÓMEZ F., SÁNCHEZ-DOBLADO F. y HARTMANN G. H. 2007. Automatic determination of primary electron beam parameters in Monte Carlo simulation. *Medical Physics*, vol. 34(3), pp. 1076–1084.
- PERKINS S. T., CULLEN D. E., CHEN M. H., HUBBELL J. H., RATHKOPF J. y SCOFIELD J. 1991a. Tables and graphs of atomic subshell and relaxation data derived from the LLNL Evaluated Atom Data Library (EADL), Z=1-100. Report UCRL-50400, Lawrence Livermore National Laboratory.
- PERKINS S. T., CULLEN D. E. y SELTZER S. M. 1991b. Tables and graphs of electron-interaction cross-sections from 10 eV to 100 GeV derived from the LLNL Evaluated Electron Data Library (EEDL), Z=1-100. Report UCRL-50400, Lawrence Livermore National Laboratory.
- PETERSON S. W., POLF J., BUES M., CIANGARU G., ARCHAMBAULT L., BEDDAR S. y SMITH A. 2009. Experimental validation of a Monte Carlo proton therapy nozzle model incorporating magnetically steered protons. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 54(10), pp. 3217–3229.
- PETTI P. L. 1992. Differential-pencil-beam dose calculations for charged particles. *Medical Physics*, vol. 19(1), pp. 137–149.
- POON E. y VERHAEGEN F. 2005. Accuracy of the photon and electron physics in GEANT4 for radiotherapy applications. *Medical Physics*, vol. 32(6), pp. 1696–1711.
- QUESADA J. M. 2010. Results obtained with nuclear models of Geant4 in IAEA benchmark of spallation. Online. Disponible en <http://nds121.iaea.org/alberto/mediawiki-1.6.10/index.php/Benchmark:2ndWorkProg> (último acceso, Marzo, 2011).
- QUESADA J. M., CORTÉS M. A., HOWARD A., FOLGER G. y IVANCHENKO V. N. 2008. Improvements of preequilibrium and evaporation models in Geant4. En *Nuclear Science Symposium Conference Record, 2008. NSS '08. IEEE*, pp. 847–849. IEEE, Dresden (Germany).
- REDONDO-FERNÁNDEZ I., BUTTAR C., WALSH S., MANOLOPOULOS S., HOMER J. M., YOUNG S. y CONWAY J. 2007. Performance of the first Δ OSI microstrip dosimeter prototype in the characterization of a clinical accelerator. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 573(1-2), pp. 141–144.
- REGIDOR E., GUTIÉRREZ-FISAC J. L. y ALFARO M. 2009. *Indicadores de Salud 2009. Evolución de los indicadores del estado de salud en España y su magnitud en el contexto de la Unión Europea*. Ministerio de Sanidad y Política Social, Madrid, España.
- RICCIARDI M. V. ET AL. 2006. Light nuclides produced in the proton-induced spallation of ^{238}U at 1 GeV. *Phys. Rev. C*, vol. 73(1), p. 014607.
- RIGGI S., ROCCA P. L., LEONORA E., PRESTI D. L., PAPPALARDO G. S., RIGGI F. y RUSSO G. V. 2010. Geant4 simulation of plastic scintillator strips with embedded optical fibers for a prototype of tomographic system. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 624(3), pp. 583–590.

- RIKNER G. y GRUSELL E. 1985. Selective shielding of a p-Si detector for quality independence. *Acta Radiologica Oncology*, vol. 24, pp. 65–69.
- RODRIGUES P., TRINDADE A., PERALTA L., ALVES C., CHAVES A. y LOPES M. C. 2004. Application of GEANT4 radiation transport toolkit to dose calculations in anthropomorphic phantoms. *Applied Radiation and Isotopes*, vol. 61(6), pp. 1451–1461.
- ROGERS D. W. O. 2002. Monte Carlo techniques in radiotherapy. *Physics in Canada*, vol. 58(2), pp. 63–70.
- ROGERS D. W. O. 2006. Fifty years of Monte Carlo simulations for medical physics. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 51(13), pp. R287–R301.
- ROGERS D. W. O., FADDEGON B. A., DING G. X., MA C.-M., WE J. y MACKIE T. R. 1995. BEAM: A Monte Carlo code to simulate radiotherapy treatment units. *Medical Physics*, vol. 22(5), pp. 503–524.
- ROGERS D. W. O., WALTERS B. y KAWRAKOW I. 2009. *BEAMnrc Users Manual*. National Research Council of Canada, Ottawa, Canada.
- SALGUERO F. J. 2008. *Modulación de haces de electrones para el tratamiento de tumores superficiales mediante planificación Monte Carlo*. Tesis Doctoral, Universidad de Sevilla, Sevilla, España.
- SALVAT F., FERNÁNDEZ-VAREA J. M. y SEMPAY J. 2009. *PENELOPE-2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*. OECD Nuclear Energy Agency, Issy-les-Moulineaux, France. ISBN 978-92-64-99066-1.
- SANTIN G., IVANCHENKO V., EVANS H., NIEMINEN P. y DALY E. 2005. GRAS: a general-purpose 3-D modular simulation tool for space environment effects analysis. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 52(6), pp. 2294–2299.
- SARKAR R. y CHAKRABARTI S. 2010. Feasibility of spectro-photometry in X-rays (SPHINX) from the moon. *Experimental Astronomy*, vol. 28, pp. 61–77.
- SAUVAN P., SANZ J. y OGANDO F. 2010. New capabilities for Monte Carlo simulation of deuteron transport and secondary products generation. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 614(3), pp. 323–330.
- SCHAFFNER B., PEDRONI E. y LOMAX A. 1999. Dose calculation models for proton treatment planning using a dynamic beam delivery system: an attempt to include density heterogeneity effects in the analytical dose calculation. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 44(1), pp. 27–41.
- SCHARDT D., ELSÄSSER T. y SCHULZ-ERTNER D. 2010. Heavy-ion tumor therapy: Physical and radiobiological benefits. *Reviews of Modern Physics*, vol. 82(1), pp. 383–425.
- SCHIMMERLING W. 1992. Radiobiological problems in space. *Radiation and Environmental Biophysics*, vol. 31, pp. 197–203.
- SELTZER S. M. 1991. Electron-photon Monte Carlo calculations: The ETRAN code. *International Journal of Radiation Applications and Instrumentation. Part A. Applied Radiation and Isotopes*, vol. 42(10), pp. 917–941.

- SEON J., KIM S.-J., SUNG B.-I., AL MARRI S. y LEE S.-H. 2010. A small space radiation monitor capable of measuring multiple ISD-VGS values of MOSFET. *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 47(4), pp. 340–344.
- SHARMA A. C., HARRAWOOD B. P., BENDER J. E., TOURASSI G. D. y KAPADIA A. J. 2007. Neutron stimulated emission computed tomography: a Monte Carlo simulation approach. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 52(20), p. 6117.
- SHEIKH-BAGHERI D. y ROGERS D. W. O. 2002. Sensitivity of megavoltage photon beam Monte Carlo simulations to electron beam and other parameters. *Medical Physics*, vol. 29(3), pp. 379–390.
- SIMONYAN M. 2009. The response of the ATLAS Tile calorimeter to pions and protons in test beam and in GEANT4 Monte Carlo simulation. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 160(1), p. 012074.
- SÓBOL I. M. 1983. *Método de Montecarlo*. Lecciones populares de matemáticas. Editorial MIR, Moscú, Rusia, 2ª edición.
- SOUKUP M., FIPPEL M. y ALBER M. 2005. A pencil beam algorithm for intensity modulated proton therapy derived from Monte Carlo simulations. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 50(21), pp. 5089–5104.
- SUMMERS G. P., BURKE E. A., SHAPIRO P., MESSENGER S. R. y WALTERS R. J. 1993. Damage correlations in semiconductors exposed to gamma, electron and proton radiations. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 40(6), pp. 1372–1379.
- SUMMERS G. P., BURKE E. A. y XAPSOS M. A. 1995. Displacement damage analogs to ionizing radiation effects. *Radiation Measurements*, vol. 24(1), pp. 1–8.
- TACKE M. B., NILL S., HARING P. y OELFKE U. 2008. 6 MV dosimetric characterization of the 160 MLC, the new Siemens multileaf collimator. *Medical Physics*, vol. 35(5), pp. 1634–1642.
- TACKE M. B., SZYMANOWSKI H., OELFKE U., SCHULZE C., NUSS S., WEHRWEIN E. y LEIDENBERGER S. 2006. Assessment of a new multileaf collimator concept using GEANT4 Monte Carlo simulations. *Medical Physics*, vol. 33(4), pp. 1125–1132.
- TAÏEB J. ET AL. 2003. Evaporation residues produced in the spallation reaction $^{238}\text{U}+p$ at 1 A GeV. *Nuclear Physics A*, vol. 724(3-4), pp. 413–430.
- TAKATA T., TANAKA H., SAKURAI Y. y MARUHASHI A. 2010. Increase in irradiation beam intensity using a hybrid target system in cyclotron-based neutron capture therapy. *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 47(7), pp. 575–581.
- TANG H. H. K. 1996. Nuclear physics of cosmic ray interaction with semiconductor materials: Particle-induced soft errors from a physicist's perspective. *IBM Journal of Research and Development*, vol. 40(1), pp. 91–108.
- TANG S. y SMITH D. M. 2010. GEANT4 simulations of gamma-ray emission from accelerated particles in solar flares. *The Astrophysical Journal*, vol. 721(2), p. 1174.
- TESTARD I., SABATIER L., RITTER S., DURANTE M. y KRAFT G. 2002. *Nuclear Science in Europe: Impact, Applications, Interactions*, cap. 9, pp. 137–142. Nuclear Physics European Collaboration Committee (NuPECC).

- VAN DYK J., BARNETT R. B., CYGLER J. E. y SHRAGGE P. C. 1993. Commissioning and quality assurance of treatment planning computers. *International Journal of Radiation Oncology*Biography*Physics*, vol. 26(2), pp. 261–273.
- VERHAEGEN F. y SEUNTJENS J. 2003. Monte Carlo modelling of external radiotherapy photon beams. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 48(21), pp. R107–R164.
- VILLAGRASA C., FRANCIS Z. y INCERTI S. 2011. Physical models implemented in the GEANT4-DNA extension of the GEANT-4 toolkit for calculating initial radiation damage at the molecular level. *Radiation Protection Dosimetry*, vol. 143(2-4), pp. 214–218.
- VILLAGRASA-CANTON C. ET AL. 2007. Spallation residues in the reaction $^{56}\text{Fe}+p$ at 0.3A, 0.5A, 0.75A, 1.0A, and 1.5A GeV. *Phys. Rev. C*, vol. 75(4), p. 044603.
- WALIGORSKI M. P. R., HAMM R. N. y KATZ R. 1986. The radial distribution of dose around the path of a heavy ion in liquid water. *International Journal of Radiation Applications and Instrumentation. Part D. Nuclear Tracks and Radiation Measurements*, vol. 11(6), pp. 309–319.
- WALTERS B. R. B., KAWRAKOW I. y ROGERS D. W. O. 2002. History by history statistical estimators in the BEAM code system. *Medical Physics*, vol. 29(12), pp. 2745–2752.
- WEISSKOPF V. F. y EWING D. H. 1940. On the yield of nuclear reactions with heavy elements. *Phys. Rev.*, vol. 57(6), pp. 472–485.
- WELLISCH H. P. y AXEN D. 1996. Total reaction cross section calculations in proton-nucleus scattering. *Phys. Rev. C*, vol. 54(3), pp. 1329–1332.
- WILSON J. W., SHINN J. L., TRIPATHI R. K., SINGLETERRY R. C., CLOUDSLEY M. S., THIBEAULT S. A., CHEATWOOD F. M., SCHIMMERLING W., CUCINOTTA F. A., BADHWAR G. D., NOOR A. K., KIM M. Y., BADAVI F. F., HEINBOCKEL J. H., MILLER J., ZEITLIN C. y HEILBRONN L. 2001. Issues in deep space radiation protection. *Acta Astronautica*, vol. 49(3-10), pp. 289–312.
- WILSON R. R. 1946. Radiological use of fast protons. *Radiology*, vol. 47, pp. 487–491.
- WROE A., ROSENFELD A., CORNELIUS I., PROKOPOVICH D., REINHARD M., SCHULTE R. y BASHKIROV V. 2006. Silicon microdosimetry in heterogeneous materials: Simulation and experiment. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 53(6), pp. 3738–3744.
- WROE A., ROSENFELD A., REINHARD M., PISACANE V., ZIEGLER J., NELSON M., CUCINOTTA F., ZAIDER M. y DICELLO J. 2007. Solid state microdosimetry with heavy ions for space applications. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 54(6), pp. 2264–2271.
- XAPSOS M. A., SUMMERS G. P., BURKE E. A. y POIVEY C. 2001. Microdosimetry theory for microelectronics applications. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 184(1-2), pp. 113–134.
- YEPES P., RANDENIYA S., TADDEI P. y NEWHAUSER W. 2009. A track repeating algorithm for fast Monte Carlo dose calculations of proton radiotherapy. *Nuclear Technology*, vol. 168, pp. 736–740.

- YIN Z., HUGTENBURG R. P. y BEDDOE A. H. 2004. Response corrections for solid-state detectors in megavoltage photon dosimetry. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 49, pp. 3691–3702.
- ZACHARATOU JARLSKOG C. y PAGANETTI H. 2008. Physics settings for using the Geant4 toolkit in proton therapy. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, vol. 55(3), pp. 1018–1025.
- ZEIDAN O. A., STEPHENSON S. A. L., MEEKS S. L., WAGNER T. H., WILLOUGHBY T. R., KUPELIAN P. A. y LANGEN K. M. 2006. Characterization and use of EBT radiochromic film for IMRT dose verification. *Medical Physics*, vol. 33(11), pp. 4064–4072.
- ZIEGLER J. F., BIRSACK J. P. y LITTMARK U. 1985. *The Stopping and Ranges of Ions in Solids*, vol. 1. Pergamon Press.

Lista de acrónimos

3DCRT	<i>3-Dimensional Conformal Radiotherapy</i>
ADN	Ácido DesoxirriboNucleico
AMIS	<i>AMI Semiconductor</i> (Compañía que fabrica circuitos integrados diseñados para problemas específicos)
ASCII	<i>American Standard Code for Information Interchange</i>
ASIC	<i>Application-Specific Integrated Circuit</i>
BBM	<i>Broad Beam Modulation</i>
BIC	<i>BInary Cascade</i>
CAD	<i>Computer-Aided Design</i>
CATS	<i>Chambre A Trajectoires de Saclay</i>
CEA	<i>Commissariat à l'Énergie Atomique</i> – Francia
CEM	<i>Cascade Exciton Model</i>
CERN	<i>Organisation Européenne pour la Recherche Nucléaire</i> – Ginebra, Suiza (Organización Europea para la Investigación Nuclear)
CMOS	<i>Complementary Metal-Oxide-Semiconductor</i> (Tecnología usada para construir circuitos integrados)
CNA	Centro Nacional de Aceleradores – Sevilla, España
CPE	<i>Charged-Particle Equilibrium</i>
CPU	<i>Central Processing Unit</i>
DBS	<i>Directional Bremsstrahlung Splitting</i>
DSSSD	<i>Double-Sided Silicon Strip Detector</i>

- EGS *Electron Gamma Shower*
- EM..... *Electromagnetic*
- ESA..... *European Space Agency* – Noordwijk, Países Bajos
(Agencia Espacial Europea)
- ETRAN *Electron TRANsport*
- FAIR..... *Facility for Anti-proton and Ion Research*
- FERMILAB..... *FERMI national accelerator LABORatory* – Batavia,
Illinois, EE. UU.
- FLUKA..... *FLUktuierende KAskade*
- GAMOS *Geant4-based Architecture for Medicine-Oriented
Simulations*
- GANIL *Grand Accélérateur National d'Ions Lourds* – Caen, Francia
- GATE *Geant4 Application for Tomographic Emission*
- GDML..... *Geometry Description Markup Language*
- GEANT4..... *Geometry ANd Tracking*
- GEM..... *Generalized Evaporation Model*
- GSI *Gesellschaft für SchwerIonenforschung* – Darmstadt,
Alemania
- HIMAC..... *Heavy Ion Medical ACcelerator* – Chiba, Japón
- HP *High Precision*
- HUVM..... Hospital Universitario Virgen Macarena – Sevilla, España
- IAEA *International Atomic Energy Agency* (Siglas en inglés del
OIEA)
- IBA *Ion Beam Applications SA* – Louvain-La-Neuve, Bélgica
- IC..... *Ionization Chamber*
- ICRU *International Commission on Radiation Units and
Measurements* (Comisión Internacional de Unidades
Radiológicas)

- IGRT *Image-Guided Radiation Therapy*
- IMF *Intermediate Mass Fragment*
- IMPT *Intensity-Modulated Proton Therapy*
- IMRT *Intensity-Modulated Radiation Therapy*
- IN2P3 *Institut National de Physique Nucléaire et de Physique des Particules – Francia*
- INFN *Istituto Nazionale di Fisica Nucleare – Italia*
- KEK *en inglés, High Energy Accelerator Research Organization – Tsukuba, Ibaraki, Japón*
- LANL *Los Alamos National Laboratory – Los Alamos, New Mexico, EE.UU.*
- LBNL *Lawrence Berkeley National Laboratory – Berkeley, California, EE.UU.*
- LET *Linear Energy Transfer*
- LHC *Large Hadron Collider*
- LIP *Laboratório de Instrumentação e Física Experimental de Partículas – Portugal*
- LLNL *Lawrence Livermore National Laboratory – Livermore, California, EE.UU.*
- MCNP *Monte Carlo N-Particle*
- MCNPX *Monte Carlo N-Particle eXtended*
- MCP *Micro Channel Plates*
- MGH *Massachusetts General Hospital – Boston, Massachusetts, EE.UU.*
- MLC *Multi-Leaf Collimator*
- MOS *Metal Oxide Semiconductor*
- MOSIS *Metal Oxide Semiconductor Implementation Service*
- MU *Monitor Unit*
- MWPC *Multi-Wire Proportional Chamber*

- NASA..... *National Aeronautics and Space Administration* – Washington DC, EE. UU.
- NIEL..... *Non-Ionizing Energy Loss*
- NIST..... *National Institute of Standards and Technology*
- OF..... *Output Factor*
- OIEA..... Organismo Internacional de Energía Atómica – Viena, Austria
- OMS..... Organización Mundial de la Salud – Ginebra, Suiza
- PBS..... *Pencil-Beam Scanning*
- PCB..... *Printed Circuit Board*
- PDD..... *Percentage Depth Dose*
- PDG..... *Particle Data Group*
- PENELOPE.. *PENetration and Energy LOss of Positrons and Electrons*
- PHITS..... *Particle and Heavy Ion Transport code System*
- PHSP..... *PHase SPace*
- POO..... Programación Orientada a Objetos
- PTCOG..... *Particle Therapy Co-Operative Group*
- PTRAN..... *Proton TRANsport*
- QGSP..... *Quark-Gluon String Precompound*
- QMD..... *Quantum Molecular Dynamics*
- RAM..... *Random-Access Memory*
- RBE..... *Relative Biological Effectiveness*
- SED..... *Secondary electron Detector*
- SEE..... *Single Event Effect*
- SLAC..... *Stanford Linear Accelerator Center* – Menlo Park, California, EE. UU.
- SOBP..... *Spread-Out Bragg Peak*

-
- SPIRAL II.... *Système de Production d'Ions Radioactifs en Ligne de 2^{ème} génération*
- SRIM..... *The Stopping and Range of Ions in Matter*
- SSD..... *Source Surface Distance*
- SSSSD..... *Single-Sided Silicon Strip Detector*
- TAC..... *Tomografía Axial Computarizada*
- TCAD..... *Technology Computer-Aided Design*
- TID..... *Total Ionization Dose*
- TPS..... *Treatment Planning System*
- UK/STFC.... *United Kingdom Science & Technology Facilities Council – Reino Unido*
- UML..... *Unified Modeling Language*
- VLSI..... *Very-Large-Scale Integration*
- VRML..... *Virtual Reality Modeling Language*
- XML..... *eXtensible Markup Language*

Adenda

Con posterioridad al depósito de esta memoria y antes del pertinente acto de defensa del trabajo en sesión pública, ha sido resuelto el origen por el cual aparecen las discrepancias existentes en la sección 5.3.4 entre los resultados obtenidos con GEANT4 y la señal experimental del detector, que claramente se observan en la Fig. 5.17 y, en menor medida, en la Fig. 5.13.

La causa de dichas discrepancias se debe a un mal posicionamiento del maniquí plano en la simulación con la que se obtienen los resultados de la Fig. 5.12, que sirven para calibrar la dosis en silicio con respecto a agua. Dicho posicionamiento defectuoso se produjo debido un error trivial en la codificación de la geometría.

Una vez corregido dicho error, la Fig. 1 debe sustituir a la Fig. 5.12 de la memoria, conservándose la validez del correspondiente pie de figura. Claramente, el resultado nuevo implica un cambio muy significativo en el valor de la constante K_{Si} , que ahora debe ser mayor que la unidad. Concretamente, el nuevo valor obtenido, mediante el mismo procedimiento descrito, es

$$K_{Si} = 1,100 \pm 0,005 , \quad (1)$$

que sustituye al resultado (5.7).

Asimismo, en la Fig. 5.13 desaparecen las discrepancias que se observan, consiguiéndose un acuerdo dentro de las incertidumbres asociadas a la medida experimental, tal y como se muestra en la Fig. 2, que la sustituiría conservando la validez del correspondiente pie de figura. Por otra parte, la Fig. 5.14 sufre cambios poco significativos, tal y como se muestra en la Fig. 3, por lo que el valor de la anchura de la penumbra obtenido por simulación Monte Carlo tampoco cambia de manera significativa.

Las Figs. 5.15-5.16 no experimentan ningún cambio ya que corresponden a cálculos realizados considerando el maniquí cilíndrico como agua en su totalidad y por lo tanto no se ven afectadas por este error. Por el contrario, la Fig. 5.17 mejora drásticamente gracias al uso del nuevo resultado (1), tal y como se observa en la Fig. 4. Con lo cual, el valor medio del cociente $K_{G4,\parallel}$, obtenido en (5.11), es ahora

$$K_{G4,\parallel} = 1,19 \pm 0,03 , \quad (2)$$

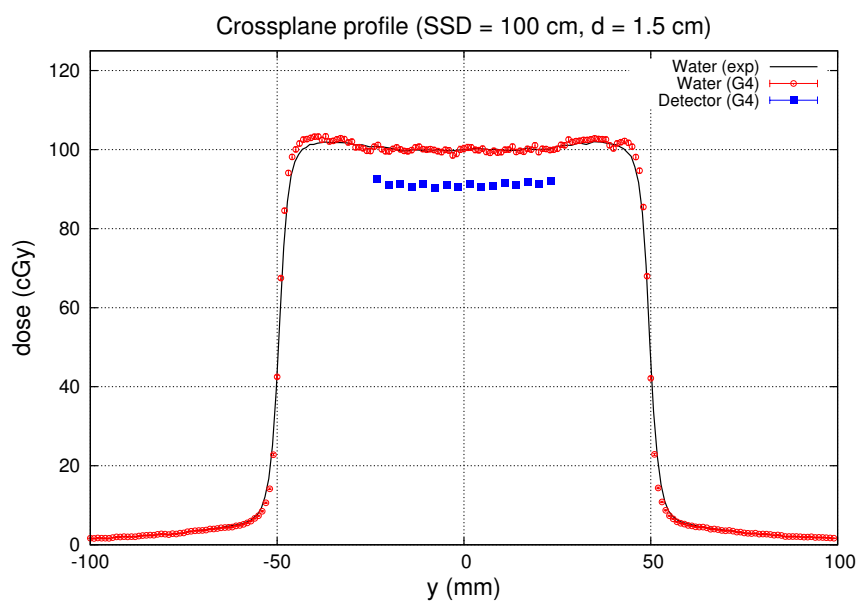


Figura 1: Nueva Fig. 5.12.

valor que es compatible con el cociente obtenido experimentalmente, mostrado en (5.12), de acuerdo con su incertidumbre. Al igual que en las figuras anteriores, el pie de la Fig. 5.17 sigue siendo válido.

En definitiva, hemos detectado un error que permanecía oculto en el código con el que hemos definido la geometría de la simulación en nuestra aplicación. Una vez arreglado, hemos podido explicar el origen las discrepancias mostradas en la sección 5.3.4, demostrando así que las posibles causas discutidas en dicha sección no son tan significativas como cabría esperar. No obstante, ello no minimiza el interés por analizar el impacto relativo de cada una de ellas sobre el resultado final.

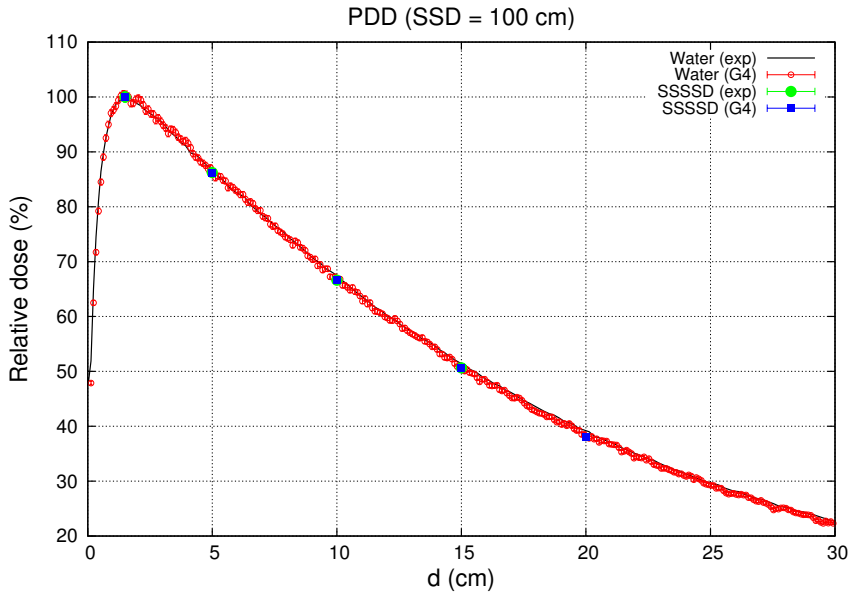


Figura 2: Nueva Fig. 5.13.

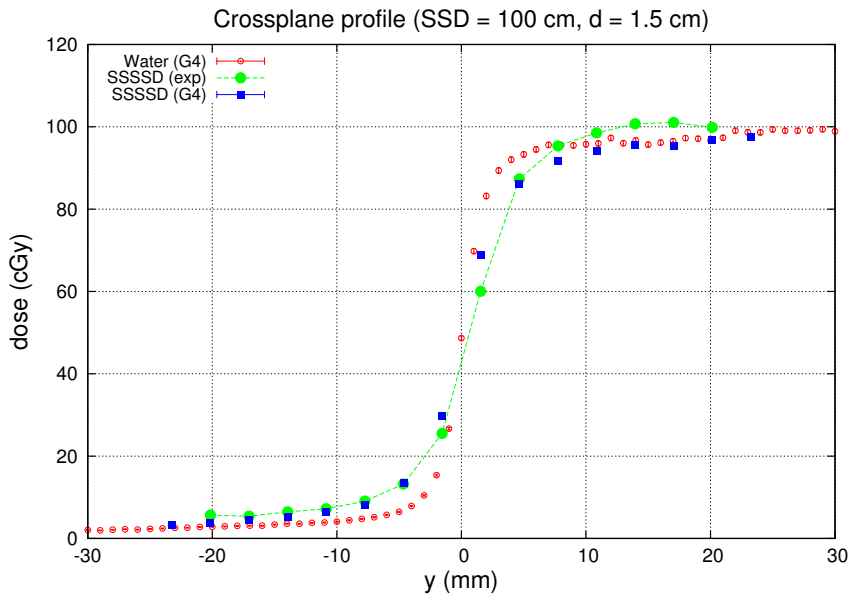
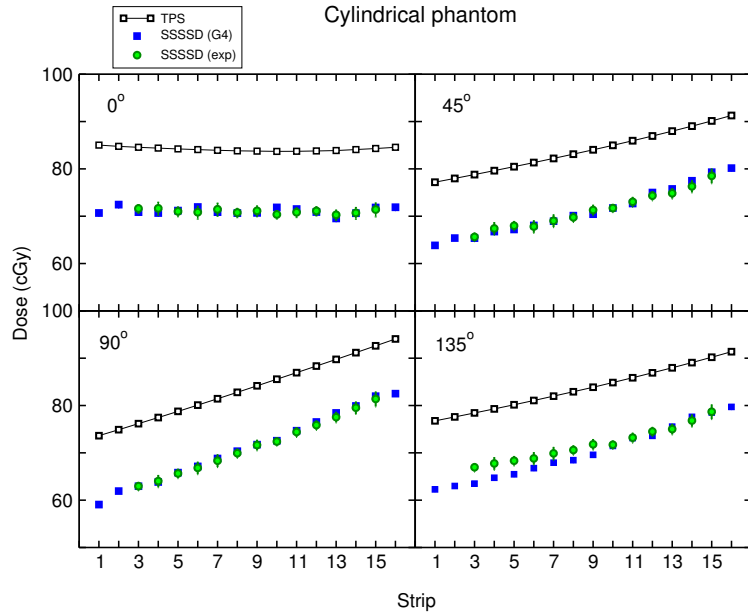
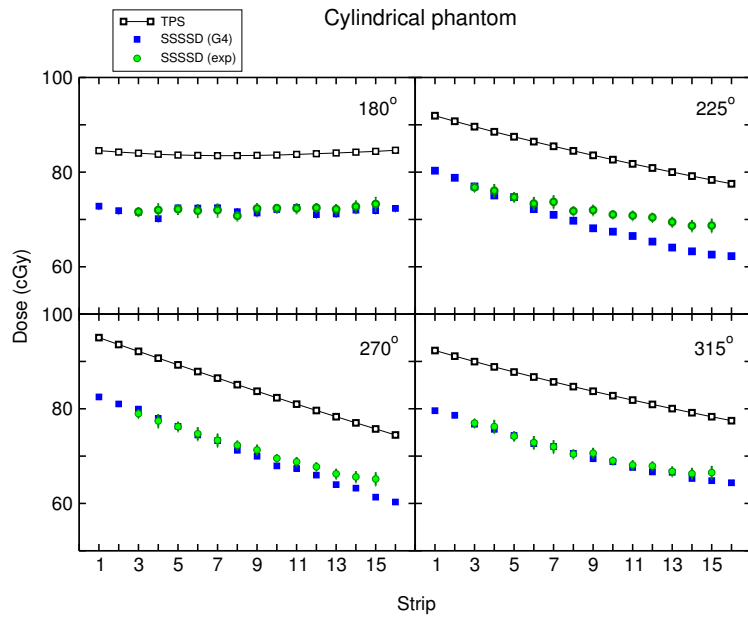


Figura 3: Nueva Fig. 5.14.



(a)



(b)

Figura 4: Nueva Fig. 5.17.