

## 2. SIMULACION MONTE CARLO

---

Con el fin de abordar el método usado por PENELOPE para la simulación de espectros de rayos X de baja energía, es necesario conocer algunos aspectos básicos que determinan las bases teóricas del método MONTE CARLO, así como la generación de números aleatorios, el transporte de las partículas a través de un medio y los procesos de dispersión que se generan en los eventos a simular. En este capítulo se presenta una visión resumida de estos aspectos.

### 2.1. *Método Monte Carlo*

El método de Monte Carlo es una técnica de análisis numérico que se basa en el uso de secuencias de números aleatorios para muestrear los valores de las variables de probabilidad de un problema determinado. En efecto, con mucha frecuencia el número de estados posibles del sistema es tan elevado que hace imposible calcular valores promedio sumando sobre todos los estados, por lo que se opta por tomar una muestra y estimar los valores promedio a partir de ella. Los valores muestreados se obtienen a partir de las distribuciones de probabilidad de cada variable. La solución al problema planteado se estima analizando los valores de la muestra a través de métodos estadísticos.

Si bien el nombre de "Método Monte Carlo" es relativamente reciente y fue acuñado por John von Neumann y Stanislaw Ulam cuando trabajaban en el proyecto Manhattan durante la segunda guerra mundial, la idea del cálculo Monte Carlo es mucho más antigua que la aparición de los computadores y era conocido anteriormente por el nombre de "muestreo estadístico", cuando los cálculos aún se realizaban con papel y lápiz. Inicialmente Monte Carlo no fue un método para resolver problemas en física, sino para evaluar integrales que no podían ser evaluadas de otra manera: el cálculo de integrales de funciones pobremente

comportadas y las integrales en espacios multidimensionales fueron dos áreas en las que el método Monte Carlo probó ser muy provechoso.

Posteriormente, con el advenimiento de las máquinas mecánicas para realizar cálculos a finales del siglo diecinueve, la posibilidad de realizar un enorme número de operaciones aritméticas permitió aplicar la técnica de muestreo estadístico a problemas físicos. El primer ejemplo de un cálculo Monte Carlo del movimiento y colisión de moléculas en un gas fue descrito por William Thomson en 1901. La primera aplicación real del método de muestreo estadístico a un problema físico parece haber sido hecha por Enrico Fermi en sus trabajos de difusión de neutrones, a principios de 1930. Fermi nunca publicó sus trabajos, pero (de acuerdo con su estudiante y colaborador Emilio Segre) sus métodos fueron precisamente los métodos Monte Carlo usados posteriormente por Stanislaw Ulam, John von Neumann y Nick Metropolis para la construcción de la bomba de hidrógeno en el computador electrónico ENIAC [31]

En el presente trabajo, el Método Monte Carlo es usado para describir el transporte acoplado de electrones y fotones dentro de los materiales<sup>1</sup>. Como se mencionó anteriormente el procedimiento de simulación está basado en el código PENELOPE. Las rutinas del programa PENELOPE simulan las trayectorias de las partículas en el interior de una gran variedad de materiales. Una geometría puede ser definida directamente en el programa principal con ayuda del paquete geométrico PENGEO [16]

El primer componente de un cálculo Monte Carlo es el muestreo numérico de variables aleatorias con funciones densidad de probabilidad específicas. En esta sección se describen las diferentes técnicas para generar valores aleatorios de una variable  $x$  distribuida en el intervalo  $x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$  de acuerdo a la **función densidad de probabilidad** - FDP  $p(x)$ .

---

<sup>1</sup> Archivo PDCOMPOS.TAB presenta 279 materiales predefinidos, y también posibles nuevas combinaciones de éstos

### 2.1.1. Generador de números aleatorios

Los promedios de muchos eventos aleatorios en simulación Monte Carlo, ofrecen resultados con una exactitud razonable en algún caso particular de estudio. Para obtener dichos eventos aleatorios se necesitan herramientas generadoras de números aleatorios. En realidad lo que en programación es preferible usar, son generadores pseudoaleatorios que dada una semilla se produce siempre una secuencia de números aleatorios igual y uniformemente distribuidos entre 0 y 1 y que pasan las pruebas de aleatoriedad.

El generador de números pseudoaleatorios más utilizado se denomina *generador de congruencia lineal* que tiene la forma mostrada en la siguiente ecuación y los números reales entre 0 y 1 se obtienen simplemente dividiendo por  $x$ , así:

$$R_n = (aR_{n-1} + c) \text{ mod } x; \quad i_n = \frac{R_n}{x} \quad (2.1)$$

Donde  $a$  y  $c$  son constantes enteras. El máximo periodo que se puede lograr con este generador es  $x$ , para una elección adecuada de los valores  $a$  y  $c$ . Por ejemplo,  $x = 2^{31} - 1$ ,  $a = 7^5$  y  $c=0$

El generador implementado en fortran77 y que usa PENELOPE es la función denominada RAND descrita por L'Ecuyer (1988), el cual produce 32-bits de números de puntos flotantes uniformemente distribuidos en el intervalo abierto entre 0 y 1. Su periodo es del orden de  $10^{18}$  es cual es virtualmente inagotable en simulaciones prácticas.

A partir de un generador de números pseudoaleatorios uniformemente distribuidos en el intervalo (0-1) es posible construir generadores con distribuciones uniformes  $p(x)$  a través de diferentes procedimientos. A continuación se enumeran algunos de ellos.

## 2.1.1.1. Método de la transformada Inversa

Sea  $x$  una variable aleatoria continua en un intervalo  $x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$ . Para medir la probabilidad de obtener  $x$  en un intervalo  $(a, b)$  usamos una probabilidad  $p(x \mid a < x < b)$ . De esta manera la probabilidad de obtener  $x$  en un intervalo diferencial de longitud  $dx$  entre  $x_1$  se puede expresar como

$$p\{x \mid x_1 < x < x_1 + dx\} = p(x)dx, \quad (2.2)$$

donde  $p(x)$  es la función densidad de probabilidad FDP de  $x$ . Esta debe ser positiva y normalizada y debe satisfacer que

$$p(x) \geq 0 \quad \int_{\min}^{\max} p(x)dx = 1 \quad (2.3)$$

Sea  $P(x)$  la función de distribución acumulativa de  $p(x)$  definida por

$$P(x) = \int_{x_{\min}}^x p(x') dx', \quad (2.4)$$

que es una función no decreciente de  $x$  y varía de  $P(x_{\min}) = 0$  a  $P(x_{\max}) = 1$ , como se ve en la figura 5. Una función de distribución acumulativa de  $p(x)$  tiene una función inversa  $P^{-1}(\xi)$ . La transformación  $\xi = P(x)$  se define como una nueva variable estocástica que asume valores en el intervalo  $[0, 1]$ , como se evidencia en la figura también. Debido a la correspondencia entre los valores de  $x$  y  $\xi$  la función densidad de probabilidad de  $\xi$ ,  $P\xi(\xi)$  es una de  $x$ ,  $p(x)$  relacionadas por  $P\xi(\xi) d\xi = p(x)dx$  y

$$P_\xi(\xi) = p(x) \left( \frac{d\xi}{dx} \right)^{-1} = p(x) \left( \frac{P(x)}{dx} \right)^{-1} = p(x) [p(x)]^{-1} = 1 \quad (2.5)$$

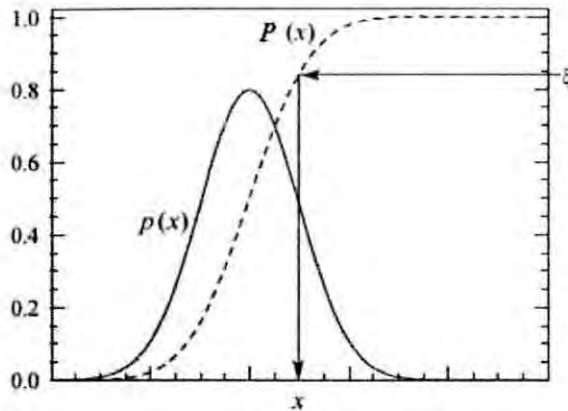


Figura 5 Toma de muestras aleatorias de una distribución  $P(x)$  usando el método de transformada inversa.  
(Adaptada de Salvat et al., 2003)

O sea que  $\xi$ , es distribuida uniformemente en el intervalo  $[0, 1]$ . Entonces  $\xi$  es un número aleatorio, una variable  $x$  definida por  $P^{-1}(\xi)$  es aleatoriamente distribuida en el intervalo  $[x_{min}]$  y  $[x_{max}]$  con una FDP  $p(x)$ , como vemos en la figura 2.5. Esto fortalece el método práctico para la obtención de valores aleatorios de  $x$ , usando un generador de números aleatorios distribuidos en el intervalo  $[0, 1]$ . La aleatoriedad de  $x$  es asegurada por la de  $\xi$  de la siguiente manera

$$\xi = \int_{\min}^x P(x)' dx' \quad (2.6)$$

Que es denominada ecuación de Interpolación de muestras de la variable  $x$ . Este método es particularmente adecuado para FDPs  $p(x)$  dadas por expresiones analíticas, de tal manera que ésta ecuación puede ser resuelta analíticamente también. El método se puede extender para generar distribuciones conjuntas de dos o tres variables, que se pueden integrar parcialmente para generar la distribución deseada. Esta es la forma estándar de generar la distribución gaussiana.

## 2.1.1.2. Método de Rechazo

Este método consiste en tener un muestreo de una variable aleatoria no invertible con una cierta distribución - diferente a  $p(x)$  ó  $P(x)$  - y sometiendo ésta a un test aleatorio para determinar si es aceptada o rechazada. Estos métodos de rechazo llegan a ser técnicas muy generales para muestreos de cualquier FDP (Función densidad de Probabilidad). El método de rechazo puede entenderse en términos de la siguiente grafica

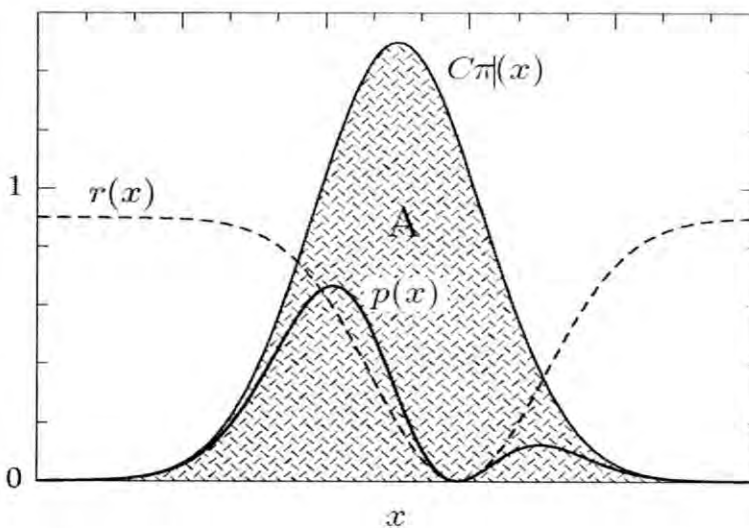


Figura 6. Muestreo aleatorio de una distribución  $p(x)$  usando el método de rechazo

La forma en que se realiza, es generando una distribución general  $\pi(x)$  similar a la deseada y se acepta o se rechaza el valor de  $x$  para ajustar la distribución de salida a  $p(x)$ . La construcción del generador inicia determinando una constante  $C$  tal que  $p(x) \leq C\pi(x)$  para todo  $x$  que pertenezca al intervalo  $[x_{\min}, x_{\max}]$ . Luego se genera un valor  $x$  con distribución  $\pi(x)$  y se genera un segundo número aleatorio  $r$  con distribución uniforme en el intervalo  $(0,1)$ . Si  $C\pi(x)r \leq p(x)$ , es decir se encuentra en la región A, el valor  $x$  se acepta y se da como salida, si no, se rechaza y se repite el procedimiento hasta lograr un

valor de  $x$  que sea aceptado. Una desventaja de este método es que requiere la generación de varios números aleatorios para muestrear cada valor de  $x$ .

### 2.1.1.3. Método de Composición.

Si no es posible hallar una integral definida de  $\pi(x)$  es posible usar el método de composición, el cual consiste en seleccionar la función  $i$ -ésima  $\pi_i(x)$  con probabilidad  $p_i$  y generar un valor aleatorio  $x$  a partir de la función de distribución seleccionada. Se puede expresar de la siguiente manera

$$\pi(x) = \sum_i p_i \pi_i(x)$$

Donde  $p_i \geq 0$  y  $\sum_i p_i = 1$ , aquí las funciones  $\pi_i(x)$  representan distribuciones de probabilidad que se pueden muestrear fácilmente por medio de alguno de los métodos ya descritos. El conjunto de números así generados satisfacen la distribución  $\pi(x)$ .

### 2.1.1.4. Método de Composición de 2 variables - Combinado

Si se desea muestrear la variable  $x$  en el intervalo  $[x_{\min}, x_{\max}]$  de acuerdo a la función normalizada  $p(x)$ , se parte del hecho de que esta función pueda escribirse de la forma

$$p(x) = \sum_{i=1}^n N_i p_i(x) \pi_i(x)$$

Donde  $N_i > 0$ , las  $p_i(x)$  son funciones de probabilidad normalizadas en el intervalo  $[x_{\min}, x_{\max}]$  y  $0 \leq p_i(x) \leq 1$ . Para generar aleatoriamente un valor de  $x$ , primero se selecciona el número  $i$  del conjunto  $1, 2, 3, \dots, n$  con probabilidad proporcional a  $N_i$ , luego se genera un valor  $x$  por medio de la distribución  $\pi_i(x)$ . Como resultado el conjunto de valores obtenidos de esta forma para  $x$  estarán distribuidos de acuerdo a la función  $p(x)$



### 2.1.2. Medidas estadísticas e incertidumbres

En simulación Monte Carlo, una cantidad de interés descrita generalmente por  $Q$ , es estimada como el valor medio de un valor  $q$  para un gran número  $N$  de historias simuladas, así:

$$Q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n q_i, \quad (2.7)$$

donde  $q_i$  es el valor de  $q$  obtenido en la  $i$ -ésima historia. La desviación estadística puede ser expresada por (adaptado de Salvat et al 2003)

$$\sigma_q = \sqrt{\frac{1}{N} \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n q_i^2 - Q^2 \right]} \quad (2.8)$$

Para valores grandes de  $N$ ,  $\sigma_q$ , representa la incertidumbre estadística del resultado de la simulación Monte Carlo. La probabilidad de que se encuentre el valor exacto en el intervalo  $Q \pm \sigma_q$  es de 68%, en el intervalo  $Q \pm 2\sigma_q$  es de 95.4% y de  $Q \pm 3\sigma_q$  de 99.7 %

## 2.2. Transporte de Radiación

En esta sección se describe la simulación Monte Carlo adoptada por PENELOPE para el transporte de radiación. Se considera el método detallado de simulación donde todos los eventos experimentados por una partícula son simulados en orden cronológico y sucesivo, sin tener en cuenta la generación de partículas secundarias.



### 2.2.1. Secciones eficaces de Interacción

Las partículas interactúan con los átomos o moléculas del medio a través de varios mecanismos. Cada mecanismo de interacción se caracteriza por una sección eficaz diferencial asociada SED, la cual es función de las variables de estado de las partículas que son modificadas en el curso de la interacción. Se considera por simplicidad en este caso, los mecanismos en los cuales la partícula es desviada y pierde energía.

Para definir la sección eficaz de interacción se debe considerar un experimento de dispersión mostrado en la figura 7. Un haz paralelo de partículas mono energético, con energía  $E$  y dirección de movimiento  $\hat{d}$  incide sobre un átomo o molécula blanco,  $T$ , que se encuentra en el origen del marco de referencia. Se asume que el haz es lateralmente homogéneo y que su extensión lateral es mucha más grande que las dimensiones del blanco.

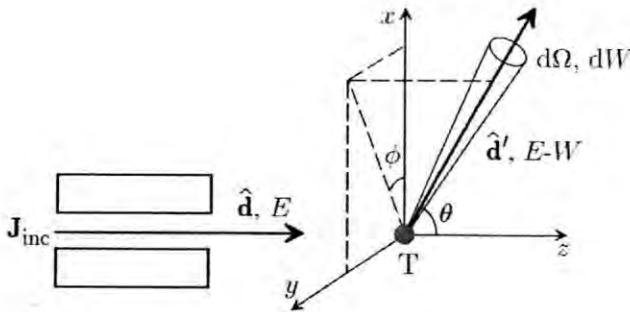


Figura 7. Diagrama esquemático de un experimento para medir la SED

El haz entonces se caracteriza porque posee una densidad de corriente  $J_{inc}$ . Se supone que las partículas interactúan solo en el mecanismo considerado, en una interacción la partícula pierde cierta cantidad de energía  $W$  y es desviada. Un detector, colocado a una distancia macroscópica del origen en la dirección  $(\theta, \phi)$  y cubriendo un ángulo sólido  $d\Omega$ , detecta y cuenta todas las partículas que entran su volumen sensible con energías en el intervalo  $(E - W - dW, E-W)$ , esto es partículas que han tenido pérdida de energía y

energía entre  $W$  y  $W + dW$ . El detector es efectivamente controlado por el haz incidente así que solamente partículas que experimenten alguna interacción serán contadas. Sea  $\dot{N}_{\text{cuenta}}$  el número de cuentas por unidad de tiempo. De esta manera la doble diferencial de la SED por unidad de ángulo sólido y unidad de pérdida de energía, es definido como

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dW} \equiv \frac{\dot{N}_{\text{cuenta}}}{|J_{\text{inc}}| d\Omega dW}$$

La SED entonces tiene dimensiones de un área/(ángulo sólido \* energía). La pérdida de energía diferencial SED, es obtenida integrando la expresión anterior así:

$$\frac{d\sigma}{dW} \equiv \int \frac{d^2\sigma}{d\Omega dW} d\Omega$$

La sección eficaz total  $\sigma$  es definida como la integral de la pérdida de energía SED sobre la pérdida de energía

$$\sigma \equiv \int_0^E \frac{d\sigma}{dW} dW = \int_0^E \left( \int \frac{d^2\sigma}{d\Omega dW} d\Omega \right) dW$$

Geoméricamente la sección eficaz total representa el área de una superficie plana que cuando es colocada perpendicularmente a el haz incidente, es atravesada por el mismo número de proyectiles que experimenta interacciones con alguna desviación angular y pérdida de energía.

### 2.2.2. Camino Libre medio

Ahora bien, consideremos una partícula con energía  $E_0$  moviéndose en un sólido, donde los átomos de la molécula están aleatoriamente distribuidos con densidad uniforme. Por simplicidad, consideremos que una partícula puede interactuar con un medio a través de 2 mecanismos de dispersión: *Interacción elástica A* e *interacción inelástica B*. En cada

## SIMULACION MONTE CARLO

interacción la partícula puede perder energía  $W$  y / o cambiar su dirección de movimiento. Una deflexión angular es determinada por el ángulo azimutal  $\phi$  y por el ángulo polar de dispersión  $\theta$ , dados por la dirección de movimiento de la partícula antes y después de la dispersión. Otro modelo de interacción es completamente especificado por las secciones eficaces diferenciales SED, atómicas y moleculares (dependiendo del material del blanco) para cada interacción considerada. Como se explico en la sección anterior.

Consideremos el número de moléculas por unidad de volumen

$$N = N_A \frac{\rho}{A_w} \quad (2.9)$$

Donde  $N_A$  es el número de Avogadro,  $\rho$  es la densidad de masa del material y  $A_w$  es la masa molecular. La probabilidad por unidad de camino de que una partícula sufra una interacción tipo (Interacción elástica) es dada por el inverso del camino libre medio.

$$\frac{1}{\lambda_A} = N \int_E^{E_0} d\omega \int d^2 \sigma_A dW d\Omega (E_0, W, \theta) = N \sigma_A (E_0) \quad (2.10)$$

Donde  $\sigma_A (E_0)$  es la sección eficaz de choque para interacciones tipo A. La pérdida de energía  $W$  en un ángulo de dispersión  $\theta$ , que describe el efecto de cada evento de interacción, son variables estocásticas. Las FDP son obtenidas simplemente normalizando sus correspondientes SED.

$$p_A (E_0, W, \theta) = \frac{1}{\sigma_A (E_0)} \frac{d^2 \sigma_A}{dW d\Omega} (E_0, W, \theta) \quad (2.11)$$

$$p_B (E_0, \theta) = \frac{1}{\sigma_B (E_0)} \frac{d^2 \sigma_B}{dW d\Omega} (E_0, \theta) \quad (2.12)$$

Considerando los eventos A y B correlacionados, la probabilidad de interacción de cualquier tipo por unidad de camino es

$$\frac{1}{\lambda_T} = \frac{1}{\lambda_A} + \frac{1}{\lambda_B} = N [\sigma_A (E_0) + \sigma_B (E_0)] = N \sigma_T (E_0) \quad (2.13)$$

Donde  $\lambda_T$  es el camino libre medio total entre colisiones y  $\sigma_T (E_0)$  es la sección eficaz de choque total.

La longitud  $s$  de un camino libre recorrido por la partícula entre interacciones consecutivas es también una variable estocástica que obedece una distribución exponencial

$$p_s = \frac{1}{\lambda_T} \exp \frac{-s}{\lambda_T} \quad (2.14)$$

Valores aleatorios de  $s$  pueden ser fácilmente generados por el método de la transformada inversa descrita anteriormente. La ecuación 2.4 puede introducir  $s$  y quedar como

$$s = \lambda_T \ln(1-\xi) = \lambda_T \ln \xi \quad (2.15)$$

Donde ésta última igualdad se verifica por ser  $1 - \xi$  también un número aleatorio distribuido en el intervalo  $[0,1]$ .

### 2.3. Historia de una partícula en PENELOPE

Con PENELOPE la simulación del camino de una partícula ocurre en 3 dimensiones. Un sólido es considerado homogéneo con una densidad  $\rho$  y átomos aleatoriamente distribuidos. De esta manera, después de cada dispersión, el estado de la partícula es definido por su posición  $r = (x, y, z)$ , Energía  $E$  y los cosenos directores de movimiento, es decir los componentes vectoriales  $\hat{d} = (u, v, w)$ . Cada camino simulado es descrito como una secuencia de estados  $r_n, E_n, \hat{d}_n$ , donde  $r_n$  es la Posición de la  $n$ -ésima partícula dispersada,  $E_n$  es la energía y la dirección de movimiento inmediatamente después de

cada interacción. La generación de un camino aleatorio de la partícula transportada, que comienza con una secuencia de estados  $r_n, E_n, \hat{d}_n$ , sigue el siguiente esquema:

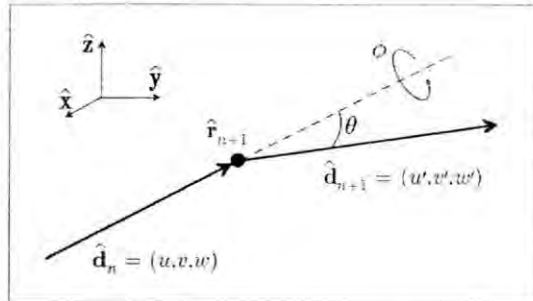


Figura 8. Desviación angular de eventos con una única dispersión

1. Un valor aleatorio de camino libre  $s$  ante una próxima interacción es generado por la ecuación 2.15
2. La partícula avanza una distancia  $s$  en la dirección de movimiento  $\hat{d}_n$ . La siguiente interacción ocurre en la posición  $r_{n+1} = r_n + s\hat{d}_n$ .
3. El tipo de interacción (A ó B) es aleatoriamente seleccionado dando las probabilidades de 2 diferentes eventos de interacción.

$$p_{A_0B} = \frac{\sigma_{A_0B}}{\sigma_T} \quad (2.16)$$

4. Los valores de los ángulos  $\theta$  y  $\phi$  de la pérdida de energía  $W$ , son obtenidos de las correspondientes SED
5. La energía reducida de la partícula es:  $E_{n+1} = E_n W$
6. La dirección de movimiento  $\hat{d}_{n+1} = (u', v', w')$  después de una interacción es obtenida por una rotación del vector unitario  $\hat{d}_n = (u, v, w)$

## SIMULACION MONTE CARLO

Estos pasos son repetidos cuantas veces sean necesario. Ver figura 9.. Un camino es terminado cuando la partícula deja el material o cuando su energía se torne menor que la energía de absorción  $E_{abs}$ , caso donde se asume que la partícula ha sido efectivamente detenida y absorbida por el medio.

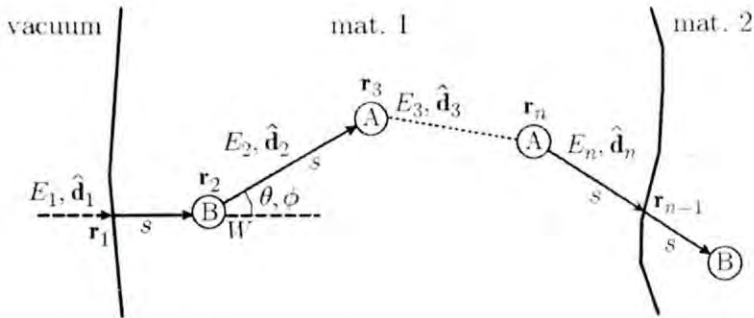


Figura 9. Generación de trayectorias aleatorias usando simulación detallada. Una partícula entra al material 1 desde el vacío y después de múltiples interacciones atraviesa la interfase entre el material 1 y 2.

La radiación con energía suficientemente alta puede generar partículas secundarias con energías menores. Esto puede ocurrir a través de los eventos de impacto directo (colisiones inelásticas, emisión Bremsstrahlung, dispersión Compton, y absorción fotoeléctrica) o a través de la relajación de los átomos ionizados o excitados. El código PENELOPE, simula la emisión de rayos X característicos y electrones Auger que resultan de la relajación de vacancias producidas en capas K y L por absorción fotoeléctrica, dispersión de fotones o impacto de electrones y positrones. Partículas secundarias emitidas con energía inicial mayor que la energía de absorción correspondiente, son guardadas en una memoria y simuladas después de concluida la simulación de un camino primario



#### 2.4. *Simulación Mixta de Clase II para electrones*

Las secciones eficaces diferenciales SED adoptadas por PENELOPE, son definidas como funciones analíticas y obtenidas en tablas numéricas, siendo exactas para la mayoría de las situaciones prácticas. Son lo suficientemente simples para permitir métodos aleatorios rápidos, importante en el método Monte Carlo, y al mismo tiempo son flexibles para tener en cuenta los aspectos relevantes de las interacciones. El conocimiento de las SED de interacción permite realizar una simulación detallada y exacta del transporte de electrones y positrones en la materia. Este tipo de simulación es viable en 2 situaciones: Cuando la simulación ocurre en capas delgadas de material y para energías relativamente bajas, de hasta algunos cientos de eV y para altas energías, sin embargo, el número de interacciones que experimenta un electrón en su paso por la materia es muy grande, de tal forma que se torna inviable una simulación detallada. Para este caso se utilizan métodos de simulación condensados o de clase I, como los utilizados en códigos de simulación como ETRAN (berget e Seltzer, 1988)[18], ITS (Halbleib et al., 1992)[19] EGS4 (Nelson et al., 1985) y GEANT3 (Brun et ta., 1986)[20].

En estos códigos una teoría de dispersión múltiple se utiliza para describir el efecto global de muchas colisiones en un paso computacional. PENELOPE difiere de otros códigos de aplicabilidad semejante por utilizar un método mixto (Salvat et al.,)[16] o de clase II para una simulación de transporte de electrones y positrones. Este considera las simulaciones detalladamente para interacciones fuertes y de forma condensada en el caso de interacciones leves, superando así muchas limitaciones de los métodos de clase I.

Interacciones que implican valores individuales de ángulos de dispersión  $\theta$  o pérdida de energía  $W$  mayores que los valores de corte  $\theta_c$  y  $W_c$  previamente determinados, son consideradas fuertes, y la simulación se realiza detalladamente. Los que presentan un ángulo de dispersión o pérdida de energía menor que los valores de corte, son llamados pequeños y son simuladas condensadamente. En el transcurso entre interacciones fuertes consecutivas o entre una interacción fuerte en una interfase, un electrón puede



sufrir muchas interacciones leves. Como una evolución electrónica es poco influenciada por estas interacciones, el efecto acumulativo de muchos eventos pequeños que ocurren a lo largo de una cierta ruta puede ser simulado exactamente a través de un enfoque de dispersión múltiple. Con PENELOPE los valores de corte son determinados dinámicamente, es decir varían con una energía cinética del electrón transportado de forma que la simulación es más condensada a altas energías y se torna progresivamente más detallada a medida que la energía cinética de los electrones disminuye

### 2.4.1. Dispersión elástica de electrones y modelo MW (Wenzel modificado)

Las interacciones elásticas son por definición, aquellas donde los estados cuánticos inicial y final de un átomo o molécula blanco son los mismos. Una interacción elástica se puede describir en términos de dos ángulos de dispersión: ángulo polar  $\theta$  y ángulo azimutal  $\phi$ .

Las SED adoptadas en el código PENELOPE (Salvat et al., 2003)[16] son dadas por una función obtenida por el modelo analítico simple de Wenzel modificado (MW). El uso de las secciones eficaces analíticas ofrece una ventaja de simplificar el algoritmo de muestreo y reducir al mínimo la base de datos numéricos necesarios. Los resultados obtenidos por el modelo MW son confiables apenas en condiciones de múltiple dispersión, cuando cada electrón sufre en promedio 20 colisiones elásticas o más en su camino completo.

Las colisiones elásticas son la dispersión de la partícula por el campo electrostático del átomo. Para la dispersión potencial central, la distribución angular de spin electrónico polarizada no es axialmente simétrica en torno a la dirección de incidencia, lo que significa que no hay dependencia de  $\phi$ . Para efectos de simulación, es conveniente medir la deflexión angular producida por cada interacción en términos de la variable

$$\mu = \frac{1 - \text{Cos } \theta}{2}. \quad (2.17)$$

Una SED elástica de un átomo se puede escribir como la ecuación 2.12

$$\frac{d\sigma_{elec}(E)}{d\mu} = \sigma_{elec}(E) p_{elec}(E, \mu), \quad (2.18)$$

donde  $p_{elec}(E, \mu)$  es una FDP de  $\mu$  en cada colisión y  $\sigma_{elec}(E)$  es la sección eficaz de choque elástica total, dada por

$$\sigma_{elec}(E) = \int \frac{d\sigma_{elec}(E)}{d\Omega} d\Omega = \int \frac{d\sigma_{elec}(E)}{d\mu} d\mu \quad (2.19)$$

donde  $d\Omega$  es el elemento de ángulo sólido en la dirección  $(\theta, \phi)$ . El camino libre medio elástico entre eventos sucesivos es

$$\lambda_{elec} = \frac{1}{N\sigma_{elec}(E)} \quad (2.20)$$

Donde N es el número de átomos por unidad de volumen.

Los valores medios de  $\mu$  y  $\mu^2$  en cada colisión elástica están dados por:

$$\langle \mu \rangle = \int_0^1 \mu p_{elec}(E, \mu) d\mu \quad (2.21)$$

y

$$\langle \mu^2 \rangle = \int_0^1 (\mu - \mu^2) p_{elec}(E, \mu) d\mu \quad (2.22)$$

La primera sección eficaz de choque de transporte  $\sigma_{elec,1}$ , se define como

$$\sigma_{elec,1} = \int (1 - \cos\theta) \frac{d\sigma_{elec}(E)}{d\Omega} d\Omega = 2\sigma_{elec}(E) \int_0^1 \mu p_{elec}(E, \mu) d\mu = 2\sigma_{elec} \langle \mu \rangle, \quad (2.23)$$

y el primer camino libre medio de transporte  $\lambda_{elec,1}$ , está dado por:

$$\lambda_{elec,l}^{-1} = N\sigma_{elec,l} = \frac{2}{\sigma_{elec}} \langle \mu \rangle, \quad (2.24)$$

que forma una medida de deflexión angular media por unidad de camino. En analogía con el potencial de choque, que se define como una pérdida media de energía por unidad de camino, la cantidad  $2\lambda_{elec,l}^{-1}$  se denomina potencial de dispersión.

Una SED (Sección eficaz diferencial) del modelo MW (Salvat et al., 2003)[16] está dada por una función analítica basada en las SED de Wentzel, que son SED para dispersión de electrones por un campo de Coulomb blindado, calculado por la primera aproximación de Born (Campos, 2003)[21]. Una distribución angular  $p_{elec}(E, \mu)$  de MW contiene dos parámetros que son determinados por la reproducción de valores esperados de  $\langle \mu \rangle$  y  $\langle \mu \rangle^2$ . De esta forma unas SED de MW son completamente determinadas por la sección eficaz de choque elástica total  $\sigma_{elec}(E)$  y por estos valores esperados.

La base de datos del código PENELOPE contiene estas cantidades para electrones y positrones con energías entre 100 eV y 1 GeV. Esta base de datos fue generada con el código de ondas parciales DPWA, que resuelve la ecuación de Dirac para el movimiento de proyectiles en el campo de un átomo blanco usando análisis de ondas parciales. El cálculo está basado en la aproximación de un campo estacionario (Mott y Massey, 1965; Walter, 1971) [22], donde las interacciones entre partícula incidente y átomo son descritas por un potencial local central.

$$V(r) = V_{ex}(r) + z_0 e V_{est}(r), \quad (2.25)$$

donde  $r$  es la posición de la partícula y  $z_0$  su carga en unidades de  $e$  ( $-1$  para electrones y  $+1$  para positrones). El término  $V_{ex}(r)$  es aplicado apenas en electrones que representan una aproximación local para una interacción de intercambio entre la partícula y los electrones atómicos (Salvat et. al 2003) [16].  $V_{est}(r)$  es la energía de interacción electrostática entre la partícula y el átomo, considerando un sistema de origen del sistema de referencia,



$$V_{est}(r) = \frac{Z_c}{r} - e4\pi \left[ \frac{1}{r} \int_0^r \rho(r') r'^2 dr' + \int_0^\infty \rho(r') r' dr' \right], \quad (2.26)$$

donde  $\rho(r)$  es la densidad electrónica del átomo, asumida como esféricamente simétrica. Esta densidad fue calculada usando el código de multiconfiguración Dirac - Fock de Desclaux (1975) [23] para átomos libres. Una SED por unidad de ángulo sólido para dispersión elástica de un proyectil con una energía cinética  $E_0$  incidiendo el elemento de ángulo sólido  $d$  en la dirección  $(\theta, \phi)$  es dada por (Walter 1971)[24]:

$$\frac{d\sigma_{elcc}}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2 \quad (2.27)$$

Donde  $f(\theta)$  y  $g(\theta)$  son respectivamente las amplitudes de dispersión directa y de intercambio de spin, determinadas por el código DPWA (Salvat et al., 2003)[16]. La figura 10 muestra las SED calculadas por ondas parciales para dispersión elástica de electrones para átomos de oro como función de deflexión  $\mu = (1 - \cos^2 \theta)/2$ . Estos resultados numéricos muestran una variación de las SED elásticas con una energía cinética de proyectil y un número atómico  $Z$  del blanco, y que la SED del oro y otros elementos pesados presentan una estructura compleja para electrones de baja energía.

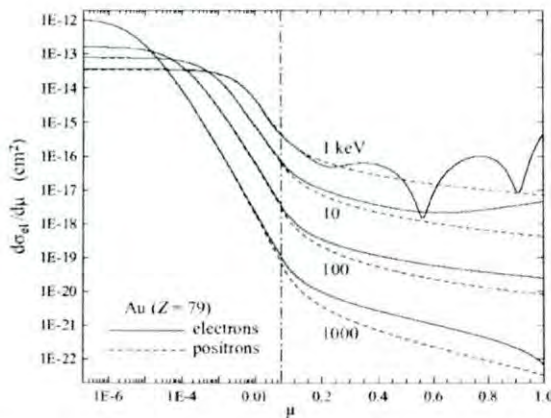


Figura 10. SED de dispersión de electrones y positrones para el átomo de oro como función de deflexión  $\mu = (1 - \cos^2 \theta)/2$  (adaptada de Salvat et al., 2003)

En la figura 11 son comparadas las SED por ondas parciales numéricas con el modelo analítico de MW para una SED de dispersión de electrones por átomos de oro. Se muestra que el modelo MW reproduce de forma un tanto rudimentaria los aspectos de SED de ondas parciales. Esta diferencia no es importante, sin embargo por ambas SED tienen los mismos valores de  $\sigma_{elec}$ ,  $\langle \mu \rangle$  y  $\langle \mu^2 \rangle$ . Esto garantiza que los modelos proporcionan resultados equivalentes en las simulaciones, desde que el número de eventos considerados para cada electrón sea mayor de 10, pues el método de dispersión múltiple suprime los detalles de los eventos individuales. (Salvat et al., 2003) [16].

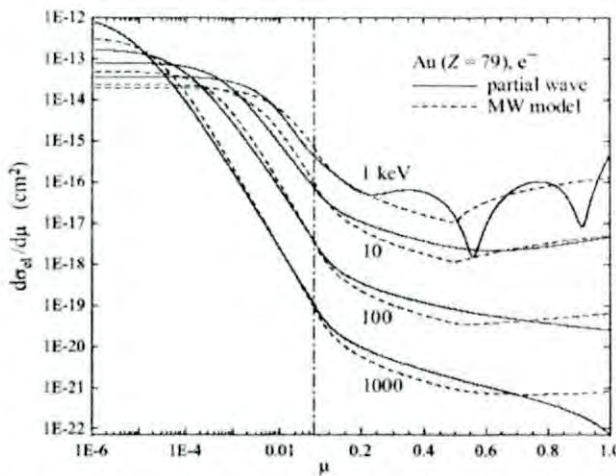


Figura 11. Método de ondas parciales y modelo MW para dispersión elástica de electrones por átomos de oro (adaptada de Salvat et al., 2003)

#### 2.4.2. Dispersión Inelástica de electrones y modelo GOS

Las colisiones inelásticas son descritas por SED que son funciones de la energía y del ángulo de dispersión. En el código PENELOPE estas SED son calculadas por medio de la primera aproximación relativista de Born y por el modelo de fuerza de oscilación

## SIMULACION MONTE CARLO

generalizado (GOS) propuesto por Leljequist (1983) [25]. En este modelo, las excitaciones de cada capa electrónica en el átomo son representadas por un oscilador armónico simple, caracterizado por su fuerza de oscilación y energía de resonancia. El modelo GOS permite determinar analíticamente el camino libre medio y el poder de frenado inelásticos. Describe aproximadamente la dependencia observada de estas cantidades con la energía cinética de la partícula. Una distribución de pérdida de energía en cada evento de interacción leve difiere, en el caso de este modelo, de las distribuciones obtenidas por otros métodos considerados más realistas. Esta diferencia, sin embargo, no afecta el resultado global, siempre que cada electrón sufra en promedio un número estadísticamente significativo de colisiones elásticas dentro del material. Una emisión de electrones secundarios en el caso de dispersión de electrones es también simulado de acuerdo con el modelo de oscilación de Leljequist y los poderes de frenado calculados de esta manera están de acuerdo con aquellos recomendados por el ICRU reporte 37 (1984) [26].