

4. SIMULACION DE ESPECTROS DE EMISION DE RAYOS X

4.1. *Espectros de emisión de Rayos X*

El código PENELOPE proporciona una descripción bastante exacta de transmisión de electrones en la materia. Los caminos generados por los electrones, pueden ser considerados replicas numéricas de caminos reales, como es requerido para garantizar la exactitud en el cálculo de la distribución de fotones emitidos. En esta sección se consideraría un mecanismo de interacción electrónica que genera fotones y sus interacciones en el medio antes de llegar a un detector. Un código simula las historias de dos fotones a través del método convencional de simulación detallada. Las interacciones consideradas son dispersión coherente (Rayleigh), dispersión incoherente (Compton) y absorción fotoeléctrica. La producción de pares ocurre a energías mayores que 1.22 MeV, energía mucho mayor que la energía de los rayos X diagnósticos, por lo cual, la producción de pares no es considerada en este trabajo. Las secciones eficaces de choque implementadas son dadas por funciones analíticas de tres métodos distintos:

- Obtenidas de cálculos por primeros principios, como la dispersión Compton o las SED angulares para fotoelectrones;
- Definidas en base a datos numéricos, como la absorción fotoeléctrica o producción de pares;
- Calculadas por métodos semi-empíricos, con parámetros obtenidos de ajustes de datos de interacciones confiables

Un modelo consistente para la simulación de rayos X debe considerar los siguientes aspectos en el proceso:

- Una distribución de ionizaciones de capas internas y eventos de Bremsstrahlung a lo largo de la trayectoria de la partícula.

- Las probabilidades de ionización de varias capas electrónicas de átomos por impacto de electrones fijos.
- Las energías y probabilidades de emisión de rayos X y electrones Auger liberados en relajamiento y cascada de átomos ionizados.

4.1.1. Ionización de capas internas por impacto electrónico

Las colisiones inelásticas con electrones de las capas más internas (K o L) son descritas por el modelo GOS propuesto por Liljequist (1983) [25]. Las secciones eficaces de choque para ionización de capas internas obtenidas con el modelo GOS difieren significativamente de resultados obtenidos por métodos más exactos de medidas también experimentales. Sin embargo, la simulación de la trayectoria de la partícula es un serio inconveniente, pues la sección eficaz de choque para ionización de capas internas es mucho menor que la inelástica total. El modelo GOS forma así una descripción apropiada del efecto medido de colisiones elásticas en el camino de la partícula. Sin embargo, en la simulación de producción de rayos X es necesario una descripción más exacta de ionización de capas internas, donde ocurren significativas pérdidas de energía y una emisión posterior de fotones característicos K_{α} y K_{β} .

La estrategia adoptada en la versión 2006 del código PENELOPE fue simular la creación de vacancias en capas internas por impacto de electrones como un proceso independiente. Para evitar repetir, es considerado que la energía en la dirección de la partícula permanecen inalteradas al evento de ionización de capa interna. Así toda la información necesaria para simular la producción de rayos X por la ionización dada de capas está reducida a una tabla. Donde se presentan los valores de sección eficaz de ionización de esta capa como función de la energía cinética de la partícula, $\sigma_{capa}(E_0)$.

Los valores de la sección eficaz de choque de ionización para las capas internas K y L incluidas en la versión 2006 de PENELOPE fueron obtenidas por primera aproximación

relativista de ondas planas de Born, usando GOS parciales, a partir de la sección eficaz de choque fotoeléctrica de las capas (Salvat et al., 2003) [16]

4.1.2. Emisión Bremsstrahlung

Los fotones generados por Bremsstrahlung son emitidos sobre un espectro continuo de energía que va de 0 hasta el valor correspondiente a la energía cinética máxima de los proyectiles. La simulación con PENELOPE se ve afectado por el algoritmo desarrollado por Acosta et al (2002)[27], basado en las SEDs numéricas para electrones incidentes en un medio de bajas densidades, amorfo y compuesto por un único elemento con un número atómico Z . La SED depende de la energía de los fotones emitidos W y del ángulo polar θ de este en relación con la dirección de la partícula, y puede ser expresada como

$$\frac{d_2\sigma}{dW d(\text{Cos}\theta)} = \frac{d\sigma}{dW} p(Z, E, k; \text{Cos}\theta) \quad (4.28)$$

Donde $k; \equiv \frac{W}{E}$ es la energía reducida del fotón y $\frac{d\sigma}{dW}$ es la SED de pérdida de energía, diferentes apenas en relación a la energía del fotón emitido. Finalmente $z(Z, E, k; \text{Cos}\theta)$ y una FDP de $\text{Cos}\theta$ para los valores dados de E_0 y k .

Una SED de Bremsstrahlung ponderada se define como:

$$\sigma_p = \left(\frac{\beta^2}{Z^2} \right) W \frac{d\sigma}{dw} \quad (4.29)$$

Donde $\beta = \frac{v}{c}$ y las velocidades del electrón en unidades de velocidad de la luz. Seltzer y Berger (1985) [18] producen extensas tablas con valores de estas SED. Son considerados elementos con número atómico variando de 1 -92 y electrones con energía de 1 keV a 10 GeV.

Versiones anteriores de PENELOPE utilizan otros modelos, una versión actual adoptada para Bremsstrahlung es un modelo descrito por Acosta et al (2002) [27]:

1. La energía de los fotones emitidos es avalada para el espectro numérico de pérdida de energía de electrones obtenido de tablas de secciones de choque ponderadas de Seltzer y Berger (1985). En la SED se tabulan muchos valores de energía cinética de electrones, permitiendo una rápida y exacta interpolación lineal en variable $\ln E_0$;
2. La distribución angular de fotones emitidos $p(Z, E, k; \cos \theta)$ es representada por una expresión analítica con parámetros determinados por los ajustes de funciones de ondas parciales de Kissel et al. (1983)[28]

Este modelo de simulación prácticamente reproduce las secciones eficaces diferenciales calculadas por Kissel et al (1983) [28], son los cálculos mas confiables disponibles, indicando que ofrecen una correcta correlación entre las variables W y θ .

4.1.3. Relajación de átomos excitados

Las vacancias en capas electrónicas internas del átomo pueden ser producidas por absorción fotoeléctrica, dispersión compton e impacto electrónico. PENELOPE asume que el proceso de relajación atómica es independiente del proceso por el cual la vacancia inicial fue creada. Un relajamiento atómico es considerado hasta que se llenen las capas K y L, de tal manera que las vacancias migran a una capa M u otras más externas. Estas

SIMULACIÓN DE ESPECTROS DE EMISIÓN DE RAYOS X

vacancias externas producen rayos X y electrones Auger, y contribuyen apenas para una región de baja energía del espectro. Una cascada de relajación es una secuencia de dos tipos de eventos diferentes:

- Transiciones radiativas $S_0 \rightarrow S_1$. Ocurren cuando un electrón de la capa S_1 llena una vacancia en la capa S_0 , dejando un hueco en S_1 la diferencia de energía es liberada en forma de una onda electromagnética y una nueva vacancia que ocurre en la capa S_1 .
- Transiciones no radiativas $S_0 \rightarrow S_1 \rightarrow S_2$. Un electrón de una capa S_1 llena una vacancia en S_0 y la energía liberada es absorbida por un electrón Auger de la capa S_2 . En este proceso son producidas dos vacancias, una es la capa S_1 y otra en la S_2 . Transiciones no radiativas de tipo $L_i-L_j-X_q$, que involucran una transición electrónica entre 2 subcapas L (indicadas genéricamente por L_i y L_j), y la liberación de un electrón de una capa externa (indicada por X_q) son conocidas como transiciones Coster-Cronig de capa L .

La información necesaria para simular la cascada de relajación para cada elemento es una tabla con los valores de:

- Transiciones posibles y probabilidades de transición
- Energías de electrones y rayos X emitidos
- Energías que generan vacancias en las capas K y subcapas L.

Estos datos son entrados a través de la definición de un archivo de materiales. Las probabilidades de transición son extraídas de LLNL Evaluated Atomic Data library (Perkins et al., 1991)[29].

SIMULACIÓN DE ESPECTROS DE EMISIÓN DE RAYOS X

Las energías de rayos X característicos emitidos en transiciones $S_0 \rightarrow S_1$ son expresadas por:

$$E_x = U_{S_0} - U_{S_1} \quad (4.30)$$

Donde U_{S_1} es la energía de ionización de un electrón en una capa S_1 a un átomo neutro, que es obtenida de la base de datos de PENELOPE. La energía cinética del electrón Auger emitido en la transición no radiativa $S_0 \rightarrow S_1 \rightarrow S_2$ se expresa como

$$E_e = U_{S_0} - U_{S_1} - U_{S_2} \quad (4.31)$$

Estas emisiones de energías son consideradas de tal modo que la presencia de las vacancias no altera las energías de ionización de capas electrónicas activas lo cual es una aproximación. Podría notarse que estas fórmulas son usadas para determinar las energías de la radiación emitida en cualquier estado de la cascada de des-excitación, lo cual significa que se desprecia la posible relajación iónica. De esta manera, la aproximación no produciría líneas satélites de rayos X L_α y L_β , que son originadas en el llenado de las vacancias de una capa L doblemente ionizada (generada por una transición de Koster Kronig), la cual libera energía que es significativamente diferente de la energía liberada cuando las capas contienen una única vacancia. Las probabilidades de transición son aproximadas, como se dijo anteriormente, teniendo que para una capa K se espera una exactitud de cerca del 99%. Para otras capas la incertidumbre es más bien mayor. En una vacancia de la capa L por ejemplo la suma de las probabilidades de transición radiativas tiene una incertidumbre de alrededor del 20% (Perkins et al., 1991) [29].

La simulación de la cascada de relajación es presentada por la subrutina RELAX. La transición que llene una vacancia inicial es seleccionada aleatoriamente de acuerdo con las probabilidades de transición adoptadas. Esta transición deja un ión con una o dos vacancias. Si la energía del rayo X característico o electrón Auger emitido es más grande que la del la energía de absorción correspondiente, las variables de estado de la partícula secundaria producida es almacenada en un archivo para una simulación posterior. Una

SIMULACIÓN DE ESPECTROS DE EMISIÓN DE RAYOS X

cascada continua con la repetición del proceso para cada vacancia remanente. La simulación termina cuando las capas K y L se hayan llenado o cuando haya suficiente energía para producir radiación activa (con una energía mayor que la energía de absorción). La energía de excitación del ión residual se asume que es depositada localmente.

Los valores de energía de los rayos X dados por la ecuación 4.30 son aproximados y producen líneas características desviadas de los valores medidos. PENELOPE resuelve este problema incorporando la base de datos de valores de relajación experimentales de rayos X de las capas K y L tabuladas por Bearden (1967) [30]. Notemos que las intensidades de las líneas simuladas dependen de las secciones eficaces de ionización y probabilidades de transición de relajación, a las cuales están sujetas unas incertidumbres considerables. Diferencias en relación a intensidades medidas deben ser por este motivo, esperadas.

4.1.4. Atenuación de los rayos X por la materia

Una energía fija de rayos X E_f con intensidad I_0 incidiendo normalmente en un blanco de espesor t , es atenuado, a medida que penetra en el material. La intensidad $I(t)$ de rayos X no dispersados a una profundidad t está dada por:

$$I(t) = I_0 \exp \left[- \left(\frac{\mu}{\rho} \right) \rho t \right] \quad (4.32)$$

Donde ρ es la densidad de masa del material y $\frac{\mu}{\rho}$ es el coeficiente de atenuación másico para fotones de energía E_f .

SIMULACIÓN DE ESPECTROS DE EMISIÓN DE RAYOS X

Para un material con un único elemento, el coeficiente de atenuación másico está relacionado con la sección eficaz de absorción atómica σ_a a través de:

$$\mu = \frac{N_A \rho}{A} \sigma_a \quad (4.33)$$

Donde N_A es el número de avogadro y A es la masa atómica. La sección eficaz atómica σ_a es la suma de las secciones eficaces de choque para interacciones de tipo rayleigh, Compton y absorción fotoeléctrica

4.2. Características de los Espectros de Rayos X

Una distribución espectral de fotones emitidos por un tubo de rayos X diagnósticos se muestra en la Figura 15. El gráfico muestra el número de fotones de rayos X simulados por el intervalo de energía, como función de la energía de los fotones. El área bajo la curva es igual al número total de fotones simulados. Otro modo de representar el espectro se muestra en la Figura 16 y consiste en graficar la energía incidente por intervalo de energía, en función de la energía de los fotones. Esto se hace multiplicando cada ordenada de la gráfica por el eje de abscisas correspondiente, es decir, el número de fotones que transportan la energía. El área bajo la curva es igual a la energía total transportada por el haz.

SIMULACIÓN DE ESPECTROS DE EMISIÓN DE RAYOS X

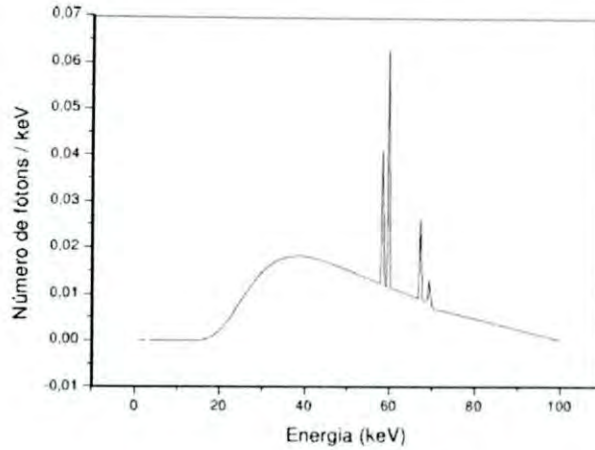


Figura 15 . Distribución espectral del número de fotones generados en una simulación. Irineau [32]

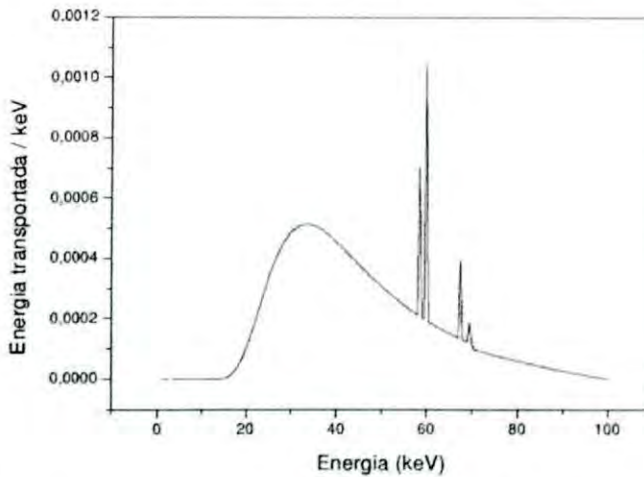


Figura 16 Distribución espectral de energía transportada por los fotones. Irineau [32]

El espectro se forma por la superposición de dos procesos de producción de rayos X. Una componente continua es originada por radiación Bremsstrahlung, llamada “radiación blanca” en analogía con el espectro continuo de luz blanca emitida por una lámpara de filamento caliente. Los picos son debidos a la radiación discreta característica y sus energías dependen del número atómico del material que los produce. Como el presente trabajo haremos comparación entre espectros generados por diferentes métodos, es

necesario realizar una estandarización. Esto se hace, igualando los valores de sus áreas a un mismo valor constante.

4.3. *Efecto Anódico*

Cuando el haz de electrones incide en el ánodo, los fotones pueden ser generados en las distintas regiones de la misma y pueden propagarse en cualquier dirección. Así, dependiendo de la profundidad de origen de los fotones y su dirección de propagación, puede ser más o menos atenuado dentro del propio blanco. Esto hace que la intensidad de los fotones producidos no sea superficialmente homogénea en la región de interés, en particular varían cuando se utilizan ánodos con diferentes ángulos.

4.4. *Análisis Estadístico*

Estadísticamente hablando discretizar las distribuciones de probabilidad de los procesos de interacción simulados, se hace por medio de histogramas, de tal forma que en cada una de las simulaciones se almacena la energía E_i^j (incluyendo todas las partículas iniciales y aquellas que son generadas por interacciones secundarias). Esto permite por medio de Monte Carlo obtener el valor promedio de su energía E_j (por partícula inicial) el cual está dado por

$$\bar{E}^j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_i^j \quad (4.34)$$

Donde N es el número de historias simuladas. Adicionalmente $(E_i^j)^2$ es almacenado con el fin de calcular la incertidumbre estadística, la cual está dada por

SIMULACIÓN DE ESPECTROS DE EMISIÓN DE RAYOS X

$$\sigma_{\bar{E}_j} = \sqrt{\frac{1}{N} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (E_i^j)^2 - \bar{E}_j^2 \right]} \quad (4.35)$$

Aquí E_i^j es la energía total depositada en j -ésimo bin por la i -ésima historia.

Para poder cuantificar las diferencias estadísticas entre los resultados experimentales y simulados se utiliza el test de confiabilidad χ^2 . Este es usado para evaluar si se observan o no desviaciones en los histograma de n datos con un rango de datos de interés

De esta manera la estadística de χ^2 es

$$\chi_{z_1, z_2}^2 = \sum_{i=1}^M \frac{(z_1^i - z_2^i)^2}{(\sigma_1^i)^2 + (\sigma_2^i)^2} \quad (4.36)$$

Donde M representa el número de puntos en las curvas, z_1, z_2 son los valores de las curvas en el bin i . σ_1^i y σ_2^i son las correspondientes incertidumbres. Si

$$\frac{\chi_{z_1, z_2}^2}{M} \approx 1 \quad (4.37)$$

se puede decir que las curvas z_1 y z_2 son similares. De otra manera, un valor de

$$\frac{\chi_{z_1, z_2}^2}{M} > 1 \quad (4.38)$$

indica una apreciable discrepancia estadística entre z_1 y z_2 .